

No. 607

Juni 2019

Radiale Basisfunktionen

**S. Karras, L. Linz, D. Buchatz, P. Symann,
L. Schulte Huxel, P. M. Dreyer,
C. Heise, J. von Lehmden**

ISSN: 2190-1767

Technische Universität Dortmund

Fakultät für Mathematik

Studienprojekt

Wirtschaftsmathematik

Radiale Basisfunktionen

Lehrstuhl III, Angewandte Mathematik und Numerik

Professor: Prof. Dr. Stefan Turek

Betreuer: Dr. Andriy Sokolov

Wintersemester 2018/2019

Autoren:

Samuel Karras

Lucia Linz

David Buchatz

Paul Symann

Linus Schulte Huxel

Philip Marten Dreyer

Christopher Heise

Johann von Lehmden

Vorwort

Die vorliegende Arbeit wurde von acht Studenten des Masterstudiengangs Wirtschaftsmathematik an der Technischen Universität Dortmund im Rahmen des Studienprojektes Wirtschaftsmathematik am Lehrstuhl für Angewandte Mathematik und Numerik verfasst. Ziel dieser Arbeit ist es dem Leser einen Überblick über die Anwendung Radialer Basisfunktionen zu geben, welche sich sowohl zur Interpolation verstreuter Daten als auch zur Lösung partieller Differentialgleichungen eignen.

Die Zielsetzungen wurden gemeinschaftlich mit allen Teilnehmern des Projektes besprochen und dennoch wurde, um die Effizienz des Fortschrittes zu verbessern, eine thematische Einteilung auf die einzelnen Unterthemen vorgenommen. Das Kapitel 1 wurde insbesondere von Samuel Karras verfasst. In Kapitel 2 wurde Abschnitt 2.1 insbesondere von Lucia Linz, Abschnitt 2.2 von David Buchatz und Abschnitt 2.3 bis 2.4 von Paul Symann ausgearbeitet. Linus Schulte Huxel und Philip Marten Dreyer bearbeiteten hauptverantwortlich Kapitel 3, während Johann von Lehmden und Christopher Heise insbesondere das Kapitel 4 behandelten.

Ein Hilfsmittel, welches uns die Erstellung dieses Dokumentes erleichtert hat, ist der Online-LaTeX-Editor Overleaf. Mit Hilfe von Overleaf konnten alle Autoren gleichzeitig Online am Dokument arbeiten, jeder Autor sah (live) den Fortschritt der jeweiligen anderen Autoren und es war ein Zugriff auf die Datei von jedem internetfähigen Endgerät möglich.

Ein zentrales Ziel der Arbeit war es die einzelnen Unterthemen sinnvoll miteinander zu verknüpfen. Aufgrund der sehr guten Teamarbeit hoffen wir, dass uns dies zufriedenstellend gelungen ist.

Studienprojekt WiMa, Dortmund, 12. Juni 2019

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	II
---------------------------	----

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	V
------------------------------	----------

Tabellenverzeichnis	VIII
----------------------------	-------------

1 Einführung in die Theorie der RBF	1
1.1 Interpolation verstreuter Daten	2
1.2 MQ-Methode	6
1.3 RBF-Methode	9
1.4 RBF-FD	13
2 Scattered Data Interpolation Problem	17
2.1 RBFs und kubische Splines	17
2.1.1 Interpolation mit Splines	18
2.1.2 Güte der Spline-Interpolation und Approximation . . .	28
2.1.3 Von kubischen Splines zu Radialen Basisfunktionen . .	32
2.2 RBFs und positiv definite Funktionen	39
2.2.1 Positiv definite Matrizen und Funktionen	41
2.2.2 Vollständig monotone Funktionen	46
2.3 Bedingt positiv definite Radiale Basisfunktionen und die er-	
weiterte RBF-Methode	55
2.3.1 Motivation der erweiterten RBF-Methode	56
2.3.2 Die erweiterte RBF-Methode	60
2.3.3 Bedingt positiv definite Radiale Basisfunktionen	67
2.3.3.1 Eigenschaften bedingt positiver definiter RBFs .	70
2.3.3.2 Identifizierung über vollständige Monotonie .	75
2.3.4 Unisolvente Mengen	78
2.3.5 Restriktion an die Menge der Datenpunkte in der er-	
weiterten RBF-Methode	84

2.4	Zusammenfassung der bisherigen Resultate der einfachen und erweiterten RBF-Methode	86
3	Error Estimation für RBFs	90
3.1	Lagrange Form des Interpolanten	90
3.2	Native Space und die Power Function	94
3.2.1	Hilberträume mit reproduzierendem Kern und der Native Space	94
3.2.2	Die Power Function	100
3.3	Fehlerabschätzung	104
3.3.1	Fehlerabschätzung für Funktionen in der Native Space	104
3.4	Stabilität und Kondition	113
3.5	Fehlerminimierung mit Hilfe des Shape Parameters	118
3.5.1	Die Power Function als Indikator	119
3.5.2	Leave-One-Out-Kreuzvalidierung	121
4	RBF-Finite Differenzen	125
4.1	Einführung Finite Differenzen	125
4.2	RBF-Finite Differenzen	129
4.2.1	Kollokationsverfahren	130
4.2.2	RBF-Finite Differenzen	133
4.2.3	Ghost-Knoten Strategie	136
4.3	Approximation von Differentialoperatoren mittels RBF-FD . .	138
4.3.1	Bestimmung partieller Ableitungen von radialen Basisfunktionen	139
4.3.2	Approximation des Differentialoperators	141
4.4	Simulation	143
5	Fazit	150

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	IV
Literatur	IX
A Anhang	XVI
A.1 Ergänzungen zu Splines	XVI
A.2 Symbolverzeichnis	XXII
A.3 Abkürzungsverzeichnis	XXV

Abbildungsverzeichnis

1	Darstellung der Kurven c_1 und c_2 in der offenen Kugel U_δ . . .	5
2	Darstellung von Höhenlinien durch MQ-Methode	7
3	Darstellung und Vergleich der MQ-Methode	8
4	Darstellung einiger Radialer Basisfunktion	12
5	Darstellung von Höhenlinien durch kubischen Splines	23
6	Gegebene Daten zur Interpolation von $f(x) = \exp(x)$	24
7	Natürlicher kubischer Spline nach Wendland zur Funktion $f(x) = \exp(x)$ und der „Fehler“ der Interpolation	27
8	Natürlicher kubischer Spline zur Funktion $f(x) = \exp(x)$ und der „Fehler“ der Interpolation	27
9	Plots der Funktionen Gaussian, Inverse Quadratic, Multiqua- drics, Inverse Multiquadric	41
10	Gaussian mit $\varepsilon = 1$ („fundamentale“ VM-Funktion)	50
11	Beispiele bedingt positiv definiter Radialer Basisfunktionen. . .	57
12	Die Interpolante in der erweiterten RBF-Methode zur Funkti- on $f(x) = \exp(x)$ und der „Fehler“ der Interpolation.	65
13	Eine Veranschaulichung der Teilmengenbeziehung von bedingt positiv definiten Funktionenklassen in Abhängigkeit der Ord- nung.	74
14	Eine Veranschaulichung der Teilmengenbeziehung von bedingt positiv definiten Funktionenklassen in Abhängigkeit der Di- mension des Definitionsbereiches der Funktion.	75
15	Ein Beispiel für eine unisolvente Menge.	83
16	Eine Veranschaulichung der Beziehung von bedingt positiv de- finiten Funktionenklassen in Abhängigkeit der kleinsten Ord- nung, sodass eine Funktion bedingt positiv definit ist.	84

17 Die Funktion $f(x, y) = \exp(x) \cdot \sin(6y + \pi)$ und die Menge der
 Datenpunkte \mathcal{X} zur Interpolation von f 88

18 Die Interpolationen von $f(x, y) = \exp(x) \cdot \sin(6y + \pi)$ in der
 einfachen und erweiterten RBF-Methode. 88

19 Die „Fehler“ der Interpolationen von $f(x, y) = \exp(x) \cdot \sin(6y + \pi)$
 in der einfachen und erweiterten RBF-Methode. 89

20 Beispiel Kardinale Basisfunktionen 92

21 Stützstellen Power Function Beispiel I 102

22 Beispiel Power Function I 103

23 Beispiel Power Function II 104

24 $f(x, y) = \exp(x) \cdot \sin(6y + \pi)$ 107

25 Interpolation und Interpolationsfehler I 107

26 Interpolation und Interpolationsfehler II 108

27 Interpolation und Interpolationsfehler III 109

28 Deterministische Stützstellen 110

29 Interpolation und Interpolationsfehler für verstreute Stützstellen 111

30 Interpolation und Interpolationsfehler für verstreute Stützstel-
 len II 112

31 Maximumsnorm der Powerfunction 120

32 Beispiel Kreuzvalidierung 122

33 Interpolationsfehler unterschiedlicher Shape Parameter ε . . . 123

34 Approximation mittels Finite Differenzen und RBF-Finite Dif-
 ferenzen 128

35 Fehler der Approximation mittels Finite Differenzen und RBF-
 Finite Differenzen 129

36 FD Stern 133

37 RBF-FD Stencil 133

38 Darstellung der Wahl der Knoten nach [7] 138

39	Fehlerentwicklung RBF-FD Methode	144
40	Diskretisierung des Einheitskreises	147
41	Maximaler Fehler in Abhängigkeit des Shape Parameters . . .	148

Tabellenverzeichnis

1	Approximationsfehler der MQ-Methode in Abhängigkeit von ε	9
2	Auflistung von Radialen Basisfunktionen	11
3	Anwendungsgebiete von Radialen Basisfunktionen	16
4	Häufig verwendete Radiale Basisfunktionen	40
5	n -te Glied der Taylorentwicklung von Inverse Quadratic	49
6	n -te Glied der Taylorentwicklung von Inverse Quadratic	49
7	Die Existenz und Eindeutigkeit einer Interpolation wird in Kapitel 2 für die aufgelisteten Radialen Basisfunktionen mittels der einfachen oder der erweiterten RBF-Methode festgestellt. .	87
8	Maximaler Fehler und Konvergenzordnung IQ	145
9	Maximaler Fehler und Konvergenzordnung GA	145

1 Einführung in die Theorie der RBF

Mit den Arbeiten zur Multiquadratischen Methode eröffnete der Geodäse R. L. Hardy in den siebziger Jahren des letzten Jahrhundert ein neues Forschungsfeld für die Mathematik. Resultierend aus der Maultquadratischen Methode entstand die verallgemeinerte Theorie der Radialen Basisfunktionen, die Untersuchungsgegenstand dieses Studienprojekts sein soll. Obwohl die Theorie schon vermeintlich lange Zeit existiert, zeigt sich die Relevanz des Themas an den zahlreichen Einsatzmöglichkeiten der Radialen Basisfunktionen. Heute finden RBFs Anwendung in der Biologie, Ingenieurwissenschaften, Geologie, Wirtschaftswissenschaften und Physik, um nur einige Einsatzgebiete zu nennen (vgl. [54], S. ix). Dabei orientiert sich die Anwendung im Wesentlichen an zwei Aspekten. Zum einen können mit RBFs verstreute Daten beliebiger Dimension interpoliert werden und zum anderen können RBFs zum numerischen Lösen von gewöhnlichen sowie partiellen Differentialgleichungen beitragen.

Diese Arbeit soll dem Leser einen umfassenden Einstieg und Überblick über die Theorie der Radialen Basisfunktionen eröffnen. Dazu wird im ersten Kapitel eine Einführung in das Thema gegeben, wobei die wesentliche Problemstellung der Interpolation verstreuter Daten erörtert und die grundlegende Idee der Radialen Basisfunktionen anhand der MQ-Methode erklärt wird. Außerdem wird eine Einführung in das numerische Lösen von partiellen Differentialgleichungen mithilfe von Radialen Basisfunktionen gegeben, wobei auf die verschiedenen Anwendungsgebiete kurz eingegangen wird. Das zweite Kapitel greift daraufhin das Problem der Interpolation verstreuter Daten nochmals auf und stellt einen Zusammenhang zwischen Radialen Basisfunktionen und Splines her. Außerdem wird in diesem Kapitel behandelt, unter welchen Voraussetzungen die RBF-Methode das Problem der Interpolation verstreuter Daten löst. Daraufhin widmet sich das dritte Kapitel einer Feh-

lerabschätzung der Interpolation mit der RBF-Methode. Außerdem wird die Stabilität und Kondition der einfachen RBF-Methode behandelt. Dazu wird ein konkretes Beispiel betrachtet, für das der optimale Shape Parameter ermittelt wird. Im letzten Kapitel wird das numerische Lösen von partiellen Differentialgleichungen behandelt und an konkreten Beispielen erläutert.

1.1 Interpolation verstreuter Daten

In der Mathematik und weiteren Naturwissenschaften stellt die Interpolation von verstreuten Daten (engl.: scattered data) bzw. Rekonstruktion einer unbekanntem Funktion aus verstreuten Daten ein weit verbreitetes Problem dar. Verschiedene wissenschaftliche Disziplinen von angewandter Mathematik über Geologie, Biologie, Ingenieurwesen bis hin zur Betriebswirtschaft nutzen dies zur Oberflächenrekonstruktion, Lösen von partiellen Differentialgleichungen oder Parametreabschätzung (vgl. [54], S. ix).

Bei der Interpolation mit verstreuten Daten werden Datenpunkte $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_i : i = 1, \dots, n\} \subset \mathbb{R}^d$ in der Dimension $d \geq 1$ und zugehörige reelle Datenwerte $\mathcal{Y} = \{y_i : i = 1, \dots, n\} \subset \mathbb{R}$ betrachtet. Gesucht ist nun eine Funktion $\mathcal{P}_f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, welche an den Datenpunkten die zugehörigen Datenwerte annimmt, d.h. die Bedingung

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}_i) = y_i \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

erfüllt. Darüber hinaus sind Stetigkeit und Differenzierbarkeit wünschenswerte Eigenschaften, welche die Interpolante \mathcal{P}_f erfüllen sollte.

Ein Ansatz zum Finden einer solchen Interpolante besteht darin, die Interpolante als Linearkombination von Basisfunktionen darzustellen. Dafür

wählt man linear unabhängige Basisfunktionen B_1, B_2, \dots, B_n und löst das Gleichungssystem

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^n c_k B_k(\mathbf{x}_i) = y_i \quad \text{für } i = 1, \dots, n.$$

Dabei sind c_1, c_2, \dots, c_n reelle Koeffizienten. Stellt man an die Basisfunktionen die Forderung der Stetigkeit und Differenzierbarkeit, so gehen diese Eigenschaften direkt auf die Interpolante \mathcal{P}_f über. In Matrixschreibweise überträgt sich der Ansatz auf die Lösung des Gleichungssystems $A\mathbf{c} = \mathbf{y}$ folgender Gestalt

$$\begin{pmatrix} B_1(\mathbf{x}_1) & B_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & B_n(\mathbf{x}_1) \\ B_1(\mathbf{x}_2) & B_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & B_n(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_1(\mathbf{x}_n) & B_2(\mathbf{x}_n) & \cdots & B_n(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Nach Möglichkeit sollen die Basisfunktionen die Eigenschaft erfüllen, dass unabhängig von der Verteilung der Datenpunkte X stets eine eindeutige Interpolante existiert. Dies ist offensichtlich genau dann gegeben, wenn die Matrix A invertierbar ist.

Wählt man im eindimensionalen Fall $d = 1$ für die Basisfunktionen Monome $B_k(x) = x^{k-1}$ für $k = 1, 2, \dots, n$, so erhält man durch Lösen des Gleichungssystems das eindeutige Interpolationspolynom. Bei der Polynominterpolation ist bekannt, dass die Existenz und Eindeutigkeit unabhängig von der Wahl der Datenpunkte \mathcal{X} im eindimensionalen Fall gegeben ist. Im mehrdimensionalen Fall $d > 1$ hingegen, kann die Invertierbarkeit der Matrix A und damit die eindeutige Existenz einer Interpolante nicht mehr garantiert werden. Ferner wird gezeigt, dass bei jeglicher Wahl von stetigen Basisfunktion und Datenpunkten \mathcal{X} aus einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit mindestens einem inne-

ren Punkt immer eine Auswahl von Datenpunkten $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$ existiert, sodass die Matrix A singularär ist. Dazu benötigt man den Begriff des Haar Raums (vgl. [54], S.18).

Definition 1.1 *Seien $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet mit mindestens n Punkten und $\mathcal{B} \subset \mathcal{C}(\Omega)$ ein n -dimensionaler linearer Vektorraum mit Basis $\{B_1, B_2, \dots, B_n\}$. Man bezeichnet \mathcal{B} als Haar Raum genau dann, wenn für beliebige paarweise verschiedene Datenpunkte $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\} \subset \Omega$ mit beliebigen Datenwerten $\mathcal{Y} = \{y_1, y_2, \dots, y_n\} \subset \mathbb{R}$ genau eine Interpolante $\mathcal{P}_f \in \mathcal{B}$ existiert.*

Über die Definition hinaus existieren weitere äquivalente Charakterisierungen des Haar Raums.

Theorem 1.2 *Unter den Voraussetzungen von Definition 1.1 sind folgende Aussagen äquivalent:*

1. \mathcal{B} ist ein Haar Raum.
2. Jede Funktion $f \in \mathcal{B}$ besitzt höchstens $n - 1$ Nullstellen.
3. Die Matrix $A = (B_j(\mathbf{x}_i))_{i,j}$ ist invertierbar.

Beweis Siehe [54] S. 19. □

Mithilfe des Haar Raums und der äquivalenten Formulierung 3. aus Theorem 1.2 können wir nun zeigen, dass im mehrdimensionalen Fall $d \geq 2$ keine Wahl von Basisfunktionen existiert, welche die eindeutige Existenz einer Interpolationsfunktion für alle paarweise verschiedenen Datenpunkte $\mathcal{X} \subset \Omega$ garantiert.

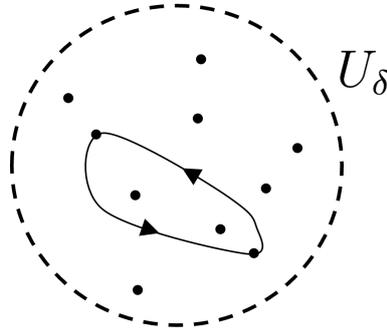


Abbildung 1: Darstellung der Kurven c_1 und c_2 in der offenen Kugel U_δ .

Theorem 1.3 (Maierhuber-Curtis Theorem) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet mit mindestens einem inneren Punkt. So existiert für $d \geq 2$ und $n \geq 2$ kein Haar Raum.

Beweis Aufgrund von Theorem 1.2 reicht es zu zeigen, dass man stets Datenpunkte $\mathcal{X} \subset \Omega$ findet, sodass die Matrix A singularär ist.

Angenommen es existiert ein Haar Raum $\mathcal{B} \subset \mathcal{C}(\Omega)$ mit Basis $\{B_1, B_2, \dots, B_n\}$. Da das Gebiet Ω einen inneren Punkt enthält, können wir eine offene Kugel U_δ mit Radius $\delta > 0$ wählen, die komplett im Gebiet Ω enthalten ist. Nun kann man n verschiedene Punkte $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\} \subset U_\delta \subset \Omega$ wählen. Darüber hinaus kann man zwei geschlossene Kurven $c_1, c_2: [0, 1] \rightarrow U_\delta$ mit $c_1(0) = \mathbf{x}_1 = c_2(1)$ und $c_1(1) = \mathbf{x}_2 = c_2(0)$ konstruieren. Des Weiteren sollen die Kurven keine der anderen Punkte $\mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_n$ schneiden. Man vergleiche die Anforderungen an die Kurve mit der Abbildung 1. Aufgrund der Stetig-

keit der Kurven und der Determinante erhalten wir durch Verkettung eine stetige Funktion.

$$D(t) = \det \left(\underbrace{\begin{pmatrix} B_1(c_1(t)) & B_2(c_1(t)) & \cdots & B_n(c_1(t)) \\ B_1(c_2(t)) & B_2(c_2(t)) & \cdots & B_n(c_2(t)) \\ B_1(\mathbf{x}_3) & B_2(\mathbf{x}_3) & \cdots & B_n(\mathbf{x}_3) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_1(\mathbf{x}_n) & B_2(\mathbf{x}_n) & \cdots & B_n(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix}}_{=:A_t} \right)$$

Aus dem Theorem 1.2 Aussage 3 folgt $0 \neq D(0) = -D(1)$. Insbesondere existiert aufgrund der Stetigkeit von D ein $t \in (0, 1)$ mit $D(t) = 0$, d.h. die Matrix ist nicht invertierbar, obwohl $\{c_1(t), c_2(t), \mathbf{x}_3, \dots, \mathbf{x}_n\} \subset \Omega$ ist. Dies ist ein Widerspruch zu der Annahme, dass \mathcal{B} ein Haar Raum ist (in Anlehnung an [8], S.15 und [54], S.19). \square

1.2 MQ-Methode

Bereits 1968 entwickelte der Geodäse R. L. Hardy eine Methode, welche das zuvor aufgeworfene Problem, die Eindeutigkeit und Existenz einer Interpolante, löste. Die sogenannte Multiquadratische Methode (MQ-Methode) entstand nicht mit dem Ziel das Problem bei der Interpolation mit verstreuten Daten zu beheben. Die Wissenschaft der Geodäsie widmet sich der Vermessung der Erdoberfläche und der kartographischen Darstellung. Insbesondere forschte Hardy, wie man aus verstreuten Messpunkten eine Karte für Höhenlinien erzeugen kann. Dafür wählte Hardy Messpunkte auf Hügeln und Senken des zu kartographierenden Gebiets, d.h. an lokalen Hoch- und Tiefpunkten. Die gewählten Punkte sind auf der linken Seite der Abbildung 2 dargestellt. Um nun eine Karte mit Höhenlinien, wie auf der rechten Sei-

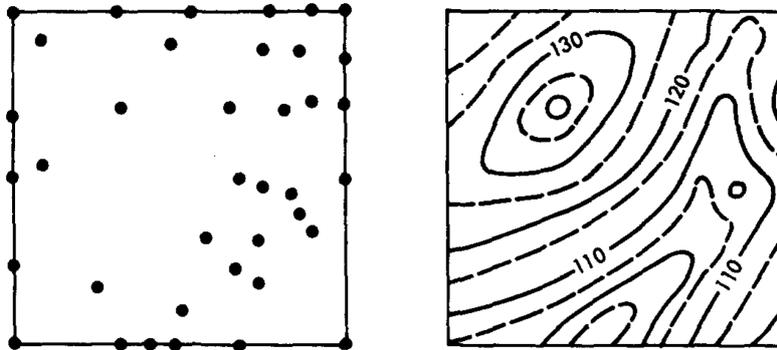


Abbildung 2: Darstellung von Höhenlinien durch MQ-Methode (vgl. [24], S.167)

te der Abbildung 2 dargestellt, zu erzeugen, wird eine mindestens stetige Interpolationsfunktion gesucht. Bereits bekannte Verfahren wie Interpolation mit Fourierreihen und Polynominterpolation erwiesen sich als ungeeignet. Die Interpolation mit Fourierreihen erzeugte starke Oszillationen zwischen den einzelnen Messpunkten, während die Polynominterpolation aufgrund der dünn besetzten Verteilung der Messpunkte abrupte Höhenunterschiede unzulänglich abbildete (vgl. [23], S. 1906). Darüber hinaus ist zu berücksichtigen, dass im mehrdimensionalen Fall bei beiden Methoden das Maierhuber-Curtis Theorem anwendbar ist und damit weder Existenz noch Eindeutigkeit einer Interpolanten vorausgesetzt werden kann (vgl. [56], S. 4f).

Im Folgenden wird die MQ-Methode anhand eines Beispiels im eindimensionalen Fall erläutert. Man betrachte die in Abbildung 3 schwarz eingezeichnete Freihandfunktion f und interpretiere diese als Geländeprofil auf dem Intervall $[0, 3.85]$. Zehn Messpunkte $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_{10}\} = \mathcal{X}$ werden wie bei Hardy an Hügeln und Senken des Geländeprofiles gewählt. Das Ziel besteht nun darin eine Interpolationsfunktion zu finden, welche das Geländeprofil möglichst exakt approximiert. In rot sieht man in Abbildung 3 das im eindimensionalen Fall eindeutige Interpolationspolynom eingezeichnet. Offensichtlich führt die Polynominterpolation zu Überschwingungen am Rand

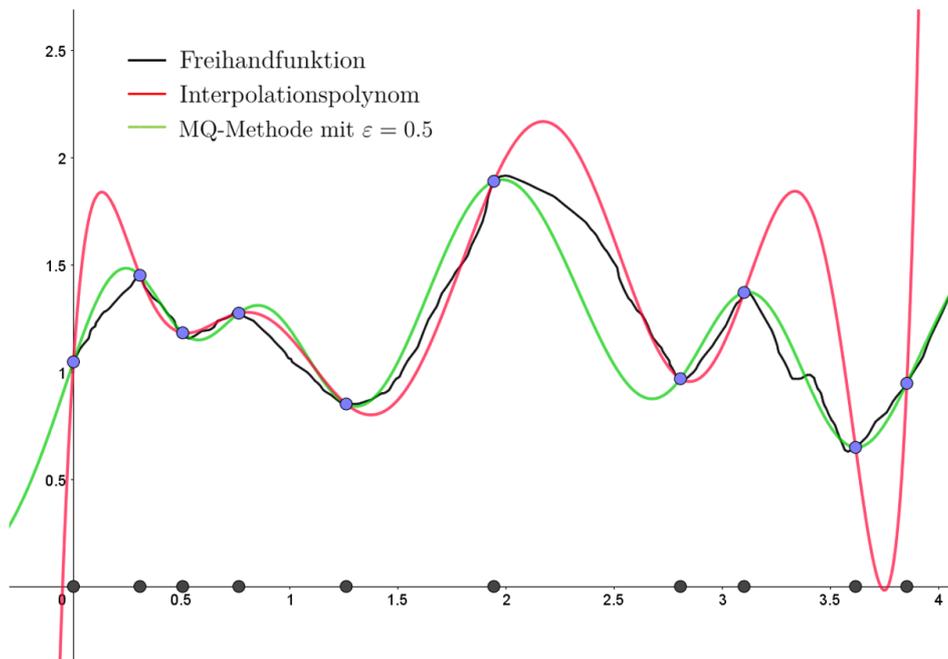


Abbildung 3: Darstellung und Vergleich der MQ-Methode [Programm: Multiquadric.ggb]

des betrachteten Intervalls und bei abrupten Höhenunterschieden. Misst man den Fehler der Approximation auf dem Intervall $[0, 3.85]$ in der L^1 -Norm, so erhält man den Wert 0.7661.

Bei der MQ-Methode werden mithilfe der euklidischen Norm $\|\cdot\|_2$ die Basisfunktionen B_1, B_2, \dots, B_{10} in Abhängigkeit von den gewählten Messpunkte \mathcal{X} definiert. Hardy wählte für $k = 1, \dots, n$ die Basisfunktionen

$$B_k(\mathbf{x}) = \sqrt{\varepsilon^2 + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2}$$

für $x \in \mathbb{R}^d$ und $\varepsilon \in \mathbb{R}$. In diesem Beispiel betrachten wir den Fall $n = 10$ und $d = 1$. Mit ε wird der frei wählbare Shape Parameter bezeichnet. Offensichtlich sind für $\varepsilon \neq 0$ die Basisfunktionen glatt (Vgl. [56], S. 5). Wählt man $\varepsilon = 0$, so erhält man den Polygonzug entlang der Interpolationspunkte, d. h. eine stückweise lineare Interpolation. In der Abbildung 3 ist in grün

ε	$\int_0^{3.85} f(x) - \mathcal{P}_f^\varepsilon(x) dx$	$\max\{ f(x) - \mathcal{P}_f^\varepsilon(x) : x \in [0, 3.85]\}$
0.1	0.3039	0.2743
0.2	0.3331	0.3122
0.3	0.3632	0.3737
0.4	0.3902	0.4255
0.5	0.4122	0.4769
0.6	0.4275	0.5121
0.7	0.4402	0.5346
0.8	0.4533	0.5450
0.9	0.4671	0.5445
1.0	0.4785	0.5347

Tabelle 1: Approximationsfehler der MQ-Methode in Abhängigkeit von ε
[Programm: Multiquadric.ggb]

die Interpolante $\mathcal{P}_f^\varepsilon$ mit der MQ-Methode und Shape Parameter $\varepsilon = 0.5$ dargestellt. Diese Approximation weist mit einem Fehler in der L^1 -Norm von 0.4122 bereits eine deutliche Verbesserung gegenüber der Polynominterpolation auf. Durch die Wahl des Shape Parameters ε wird die Approximation beträchtlich beeinflusst, wie man in Tabelle 1 erkennt.

Optimiert man ε , sodass der Fehler in der L^1 -Norm minimiert wird, so erhält man für $\varepsilon = 0.022$ einen Wert von 0.2851. Außerdem ist zu beobachten, dass die MQ-Methode durch die Verwendung der euklidischen Norm analog auf Interpolationen im mehrdimensionalen Fall $d \geq 2$ übertragen werden kann.

1.3 RBF-Methode

Nachdem Hardy die MQ-Methode veröffentlicht hatte, folgten viele weitere ähnliche Verfahren zur Interpolation verstreuter Daten. Diese Verfahren unterschieden sich dabei hauptsächlich in der Wahl von den Basisfunktionen B_k . Schagen veröffentlichte 1979 beispielsweise eine Methode, in der er die Basisfunktionen ebenfalls in Abhängigkeit von den Datenpunkten \mathcal{X} und

mithilfe der euklidischen Norm definierte. Dazu wählte er die Basisfunktionen $B_k(\mathbf{x}) = e^{-\varepsilon\|\mathbf{x}-\mathbf{x}_k\|_2}$, wobei ε wiederum den Shape Parameter bezeichnet (vgl. [45], S. 55). Darüber hinaus veröffentlichte Duchon 1977 weitere Verfahren, bei denen die Basisfunktionen $B_k(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2$, $B_k(\mathbf{x}) = \log \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2$ oder $B_k(\mathbf{x})\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^3$ genutzt werden (vgl. [12], S. 95). Damit im Folgenden die Eigenschaften dieser Methoden untersucht werden können, werden die Verfahren von Hardy, Duchon und Schagen verallgemeinert.

Definition 1.4 (Einfache RBF-Methode)

- Seien $d \in \mathbb{N}$, $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\} \subset \mathbb{R}^d$ eine Menge von paarweise verschiedenen Datenpunkten und $\mathcal{Y} = \{y_1, y_2, \dots, y_n\} \subset \mathbb{R}$ die zugehörigen Datenwerte.
- Sei $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ eine radiale Basisfunktion, d.h. es existiert eine Funktion $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$ für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$.

Als Basisfunktionen für die Interpolation wähle man nun für $k = 1, 2, \dots, n$ und $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$

$$B_k(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2).$$

Die Interpolante $\mathcal{P}_f = \sum_{k=1}^n c_k B_k$ ergibt sich dann direkt aus der Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|_2) & \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2) & \cdots & \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_n\|_2) \\ \phi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|_2) & \phi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_2\|_2) & \cdots & \phi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_n\|_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1\|_2) & \phi(\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_2\|_2) & \cdots & \phi(\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n\|_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Die RBF-Methode wird maßgeblich durch die Wahl der Radialen Basisfunktion bestimmt. Man sieht leicht ein, dass die RBF-Methode mit

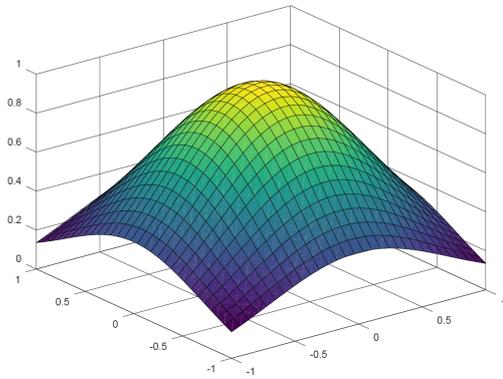
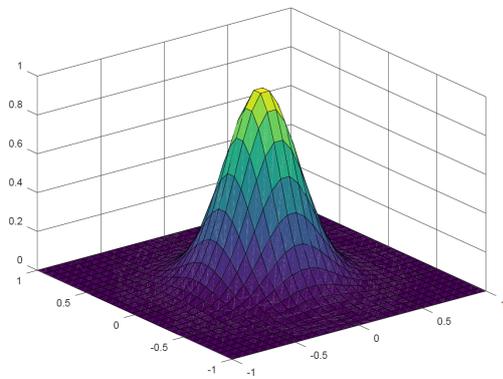
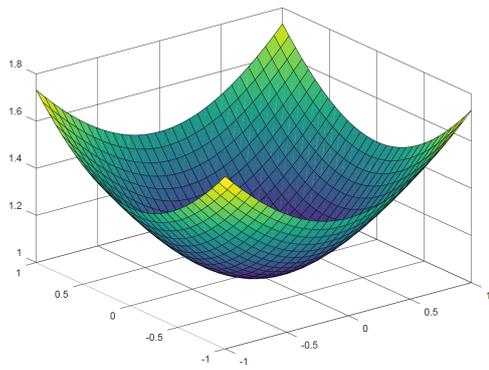
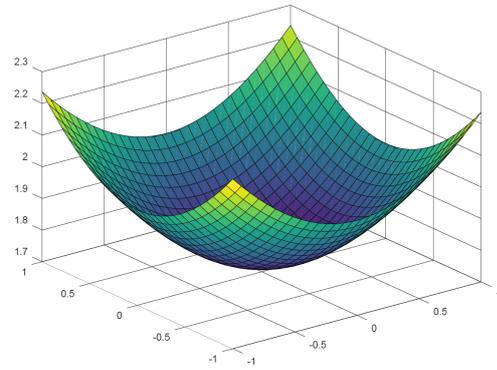
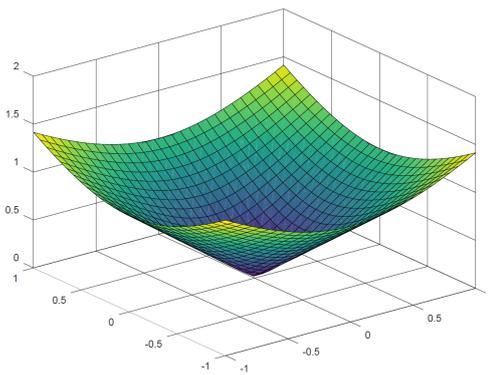
$\phi(x) = \sqrt{\varepsilon + x^2}$ exakt der MQ-Methode entspricht. Analog kann man auch die Verfahren von Schagen und Duchon darstellen. Über die genannten Radialen Basisfunktionen hinaus gibt es noch eine Reihe weiterer Radialer Basisfunktionen die für die RBF-Methode verwendet werden. Eine Auswahl der wichtigsten Basisfunktionen ist in Tabelle 2 aufgelistet.

Art der Basisfunktion	$\phi(x), (x \geq 0)$
Unendlich glatte RBFs	
<i>Gaussian (GA)</i>	$e^{-(\varepsilon x)^2}$
<i>Inverse Quadratics (IQ)</i>	$\frac{1}{\varepsilon + x^2}$
<i>Inverse Multiquadrics (IMQ)</i>	$\frac{1}{\sqrt{\varepsilon + x^2}}$
<i>Multiquadrics (MQ)</i>	$\sqrt{\varepsilon + x^2}$
Stückweise glatte RBFs	
<i>Linear</i>	x
<i>Thin Plate Spline (TPS)</i>	$x^2 \log(x)$

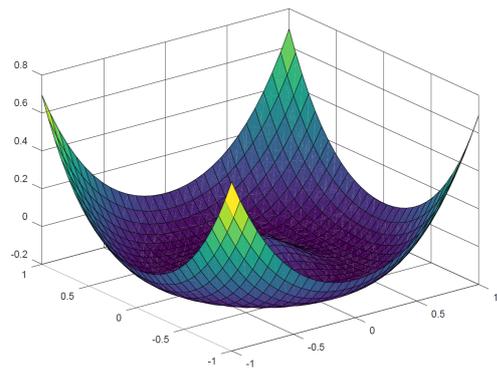
Tabelle 2: Auflistung von Radialen Basisfunktionen

In der Abbildung 4 sind die Radialen Basisfunktionen $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$ für Gaussian, Multiquadrics, Linear und Thin Plate Spline in der Dimension $d = 2$ dargestellt. Bei allen Basisfunktionen ist die radialsymmetrische Eigenschaft um das Zentrum $(0, 0)$ zu erkennen. Außerdem ist der Einfluss des Shape Parameters bei Gaussian und Multiquadrics deutlich zu sehen. Umso größer der Shape Parameter ε ist, desto spitzer erscheint der Graph. Bei den stückweise glatten RBFs Linear und Thin Plate Spline existiert kein Shape Parameter.

Betrachtet man die RBF-Methode, so ist wie bei der MQ-Methode offensichtlich, dass die Methode durch die euklidische Norm in beliebiger Dimension $d \geq 1$ anwendbar ist. Bisher wurde allerdings nicht behandelt, ob die RBF-Methode das in Abschnitt 1.1 vorgestellte Problem der Interpolation

(a) GA für $\varepsilon = 1$ (b) GA für $\varepsilon = 1$ (c) MQ für $\varepsilon = 1$ (d) MQ für $\varepsilon = 3$ 

(e) Linear



(f) TPS

Abbildung 4: Darstellung einiger Radialer Basisfunktion $\Phi(x) = \phi(\|x\|_2)$ für $d = 2$ auf $[-1, 1]^2$

verstreuter Daten löst. Also ob stets eine eindeutige Interpolante unabhängig von den gewählten Datenpunkten gegeben ist. Genauer werden in den folgenden Kapiteln diese Fragen geklärt:

- Kann die RBF-Methode die Existenz und Eindeutigkeit einer Interpolante garantieren?
- Funktioniert dies unabhängig von der Dimension $d \in \mathbb{N}$?
- Welche Eigenschaften muss die Matrix A beziehungsweise die Radialen Basisfunktionen dafür erfüllen?
- Welcher Zusammenhang besteht zwischen Splines und der RBF-Methode?

Der Beantwortung dieser Fragen widmet sich das Kapitel 2 in diesem Buch. Dafür werden insbesondere die Begriffe positive Definitheit und vollständige Monotonie eine hohe Bedeutung haben. Weitere Fragen sind:

- Wie „gut“ lässt sich eine Funktion mithilfe der RBF-Methode approximieren?
- Existiert eine (punktweise) Fehlerabschätzung?
- Wie muss der Shape Parameter ε optimalerweise gewählt werden?

Diese Fragen werden in Kapitel 3 beantwortet, wozu der Native Space sowie die Power Function eingeführt werden.

1.4 RBF-FD

Über die Anwendung zur Interpolation verstreuter Daten hinaus können Radiale Basisfunktionen zur numerischen Lösung von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen eingesetzt werden. Zur Lösung von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen existieren bereits einige Verfahren wie

die Finite Elementen, Finite Differenzen und Finite Volumen Methoden. Die Finite Differenzen Methode wurde bereits zu Beginn des 20. Jahrhunderts von Lewis Fry Richardson eingeführt und studiert (vgl. [2], S.10).

Dabei besteht die Grundidee der Finiten Differenzen Methode darin, dass die Ableitungen in Differentialgleichungen durch finite Differenzen ersetzt werden. Im eindimensionalen Fall kann beispielsweise mithilfe des zentralen Differenzenquotienten mit $h \in \mathbb{R}$ die erste Ableitung angenähert werden.

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Eine Voraussetzung für den Einsatz der Finiten Differenzen Methode ist hingegen, dass das Gebiet der Differentialgleichung mit einem (äquidistanten) Gitter diskretisiert werden muss. Dieses Verfahren führt durch einsetzen der Gitterpunkte und finiten Differenzen zu einem linearen Gleichungssystem, welches mit bekannten Methoden gelöst werden kann. Die Finite Differenzenmethode bietet die Vorteile, dass das Verfahren in der Regel einfach zu implementieren ist und theoretisch eine beliebige Genauigkeit der Näherungslösung erzielt werden kann, wenn der Gitterabstand h gegen 0 geht. Auf der anderen Seite hat das Verfahren auch einige Nachteile. Es ist unflexibel gegenüber Verfeinerungen aufgrund des Gitters, das unter Umständen sehr aufwendig zu erzeugen ist (vgl. [2], S.10). Außerdem geht beim Gleichungssystem die Dimension der Definitionsmenge als Potenz in die Anzahl der Unbekannten ein.

Aufgrund der gegebenen Nachteile werden im 4. Kapitel dieses Buches alternative Ansätze zur Lösung partieller Differentialgleichungen vorgestellt. Das ist zum einen die Kollokationsmethode und zum anderen die RBF-FD Methode. Für die numerische Lösung einer partiellen Differentialgleichung nutzen diese Methoden Radiale Basisfunktionen. Dabei muss bei der Diskretisierung des Gebiets Ω der Differentialgleichung keine Rücksicht auf die

Struktur genommen werden. Das bedeutet, dass kein Gitter oder ähnliches erforderlich ist, weshalb die Methoden auch als „meshless“ bezeichnet werden. Mithilfe der Kollokationsmethode kann beispielsweise eine numerische Lösung der Strahlungstransportgleichung

$$\left[\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{n} \cdot \nabla) \right] I = -(\kappa + \sigma)I + \rho$$

bestimmt werden. Die Intensität I wird dabei durch die Darstellung

$$I(x) = \sum_{j=1}^N \lambda_j(\mathbf{n}, t) \Phi(x - x_j)$$

approximiert. Als Radiale Basisfunktion wird die Multiquadric gewählt, d.h.

$$\Phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \sqrt{\varepsilon + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|_2^2}.$$

Für eine genauere Betrachtung sei auf [28] verwiesen. Im vierten Kapitel wird die RBF-FD Methode vorgestellt. Diese Methode ist ebenfalls „meshless“ und hat eine hohe Genauigkeit bei wenigen Datenpunkten \mathcal{X} (vgl. [50], S.1 und [28], S. 1906), wobei die RBF-FD Methode im Vergleich zu der Kollokationsmethode zu einem geringeren Rechenaufwand führt. Zum Schluss des vierten Kapitels werden die Kollokationsmethode und RBF-FD Methode anhand eines Beispiels verifiziert. Insbesondere wird der Einfluss des Shape Parameters auf den maximalen Fehler untersucht. Durch die Anwendung auf gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen eröffnen sich viele Anwendungsmöglichkeiten für Radiale Basisfunktionen wie in Tabelle 3 zu sehen.

Anwendungsgebiet	Verweis
Finanzmathematik	
<i>Bewertung europäischer Optionen</i>	[25]
<i>Bewertung amerikanischer Optionen</i>	[26]
Thermodynamik	
<i>Wärmeleitungs-/Diffusionsgleichung</i>	[4]
Fluiddynamik	
<i>Navier-Stocks equation</i>	[49]

Tabelle 3: Anwendungsgebiete von Radialen Basisfunktionen

2 Scattered Data Interpolation Problem

Im vorangegangenen Kapitel wurde bereits das Scattered Data Interpolation Problem, welches kurz gefasst das Finden einer unbekanntenen Funktion anhand gegebener, verstreuter Datenpunkte beschreibt, vorgestellt. Dieses Kapitel soll nun diese Problemstellung im Hinblick auf die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen des selbigen genauer untersuchen.

Zunächst wird dazu die Spline-Interpolation eingeführt. Diese bietet einen einfachen Ansatz ein Interpolationsproblem mit verstreuten Daten zu lösen. Viel wichtiger ist aber, dass dem Leser mit diesem Verfahren ein weiterer, intuitiver Zugang zur Methode der Radialen Basisfunktionen geboten wird. Es wird gezeigt, dass die RBF-Interpolation letztlich als eine Verallgemeinerung der Spline-Interpolation aufgefasst werden kann. Aus der Interpolation mit kubischen Splines lassen sich die einfache und die erweiterte RBF-Methode gewinnen, welche in den nachfolgenden Unterkapiteln 2.2 und 2.3 dann genauer untersucht werden.

2.1 RBFs und kubische Splines

In Kapitel 1 wurde dem Scattered Data Interpolation Problem bereits mit der Polynominterpolation begegnet. Wie in Abschnitt 1.1 beschrieben wurde, gewährleistet diese Methode jedoch nicht in jedem Fall die eindeutige Existenz einer Lösung. Nur in der Raumdimension $d = 1$ existiert in jedem Fall eine von den Datenpunkten \mathcal{X} unabhängige, eindeutige Lösung der Interpolationsaufgabe. Dieser Umstand ist neben dem hohen Rechenaufwands und der gegebenenfalls schlechten Approximationsgüte ein Grund, nach einer geeigneteren Lösungsidee zu suchen. Splines bieten hierzu einen ersten Ansatz, da sie eine Interpolante in Abhängigkeit der Stützstellen konstruieren.

Für den eindimensionalen Fall lässt sich wie auch bei der Polynominterpolation zeigen, dass mit Hilfe von Splines eine eindeutige Interpolante gefunden werden kann. Darüber hinaus vermeidet die Spline-Interpolation aber auch die mitunter starken Oszillationen der Polynominterpolation bei steigender Stützstellenzahl und garantiert die Differenzierbarkeit an den Intervallgrenzen (vgl. [48], S.106 und [8], S.10). Die Güte der Interpolation ist unabhängig von der Zahl der Stützstellen beziehungsweise von dem Polynomgrad, was einen entscheidenden Vorteil liefert (vgl. [43], S.179). Des Weiteren liefern Splines ein Konzept, welches sich auch auf höhere Raumdimensionen übertragen lässt. Dazu wird das betrachtete Gebiet, welches eine Teilmenge des \mathbb{R}^d darstellt, trianguliert. Auf den so erhaltenen „Dreiecken“ können dann gewisse Basissplines angewendet werden. Problematisch sind hier jedoch auch Dimensionen $d > 2$ und insbesondere verstreute Stützstellen. Es gibt mittlerweile eine Vielzahl weiterer Ansätze zur Verwendung von Splines in höheren Raumordnungen. Jedoch ist die Forschung in diesem Bereich noch nicht abgeschlossen und in der Praxis wird die Spline-Interpolation häufig nur bis zur Raumdimension $d = 3$ verwendet (vgl. [54], S.9). Für einen Überblick zu multivariaten Splines empfiehlt sich der Vortrag von de Boor [6]. Entscheidend für die vorliegende Arbeit ist allerdings der Umstand, dass wir Splines als einen Spezialfall Radialen Basisfunktionen auffassen können und dadurch einen leichten Zugang zu dieser Interpolationsmethode erhalten.

2.1.1 Interpolation mit Splines

Die Idee zur Spline-Interpolation ist von ganz praktischer Natur. Bereits zu Beginn des 20. Jahrhunderts wurde dieses Prinzip im Schiffsbau verwendet. Statt Kurvenlinealen nutzte man biegsame Holzstäbe, sogenannte Straklatten (engl.: Splines), um glatte Flächen für Schiffe und später auch für Flugzeuge zu konstruieren. An vorgegebenen Punkten, den Stützstellen, fixierte

man die Straklatten und zeichnete entlang dieser die Flächen. Aufgrund der Materialbeschaffenheit krümmten sich die Holzstäbe zwischen den Stützstellen derart, dass sie eine glatte Verbindungslinie ergaben. Darüber hinaus waren die so entstandenen Verbindungslinien quasi identisch mit den Kurven der kleinsten Krümmung, die die Stützwerte interpolierten, was auf das physikalische Prinzip der Energieminimierung zurückzuführen ist (vgl. [43], S.179 und [48], S.107).

Erst später wurde dieses frühe Konzept der Spline-Interpolation mathematisch formalisiert. Vereinfacht gesagt, handelt es sich bei Splines um Funktionen, die stückweise definiert sind. Sie bestehen aus Polynomen niedrigen Grades, welche an den Stützstellen gewissen Glattheitsanforderungen genügen müssen, um sich letztlich zu einem stetigen Spline zusammzusetzen. Je nachdem, von welchem Grad die verwendeten Polynome sind, lassen sich die Splines kategorisieren. Im eindimensionalen Fall lautet die allgemeine Definition einer Splinefunktion wie folgt (vgl. [36], S.21 und [43], S.180):

Definition 2.1 (Univariater Spline)

Es sei $\tilde{\mathcal{X}} = \{x_0 < x_1 < \dots < x_{n+1}\}$ eine gegebene Menge an Stützstellen. Dann ist ein zu $\tilde{\mathcal{X}}$ gehörender Spline vom Grad k eine reelle Funktion

$$s : [x_0, x_{n+1}] \rightarrow \mathbb{R}$$

für die gilt:

(a) $s \in C^{k-1}([x_0, x_{n+1}])$

(b) $s|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathcal{P}_k(\mathbb{R})$, wobei \mathcal{P}_k die Polynome vom Grad k sind.

Für den Raum aller Splines vom Grad k schreiben wir dann

$$\mathcal{S}_k(\tilde{\mathcal{X}}) = \left\{ s \in C^{k-1}([x_0, x_{n+1}]) : s|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathcal{P}_k, i = 0, \dots, n \right\}.$$

In der obigen Definition wurde die Menge der Stützstellen \mathcal{X} aus Kapitel 1 leicht modifiziert. In den nächsten Absätzen betrachten wir nun die Menge $\tilde{\mathcal{X}}$, welche um zwei Punkte x_0 und x_{n+1} am Rand ergänzt wurde. Bei dieser Modifikation handelt es sich nur um eine „kosmetische“ Veränderung der Datenmenge, um das betrachtete Intervall einzugrenzen. Sie dient dazu, den Zusammenhang zu Radialen Basisfunktionen leichter herleiten zu können. Im späteren Verlauf wird deutlich, dass diese zusätzlichen Intervallgrenzen nicht weiter benötigt werden und ausgelassen werden können. Des Weiteren wird hier eine geordnete Menge an Stützstellen betrachtet. Die Formulierung aus Definition 2.1 ist noch sehr allgemein und es kann mit Hilfe des nachfolgenden Theorems noch eine Konkretisierung der Darstellung solcher Splinefunktionen erreicht werden (vgl. [51], S.279 und [5], S.325).

Theorem 2.2 (Basis und Dimension univariater Splines)

Jeder Spline $s \in \mathcal{S}_k(\tilde{\mathcal{X}})$ besitzt die Darstellung

$$s(x) = \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+^k + \sum_{i=0}^k b_i x^i, \quad \text{für alle } x \in [x_0, x_{n+1}].$$

Hierbei bezeichnet

$$(x - x_i)_+^k = \begin{cases} (x - x_i)^k & \text{für } x \geq x_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

die abgebrochene Potenzfunktion.

Die Funktionen $1, x, \dots, x^k, (x - x_1)_+^k, \dots, (x - x_n)_+^k$ sind linear unabhängig und bilden somit eine Basis des Splineriums $\mathcal{S}_k(\tilde{\mathcal{X}})$. Daraus ergibt sich die Dimension $\dim(\mathcal{S}_k(\tilde{\mathcal{X}})) = n + k + 1$.

Sowohl Definition 2.1 als auch Theorem 2.2 beziehen sich auf einen allgemeinen Spline vom Grad k . In der Praxis wird häufig mit Splines dritten

Grades gearbeitet. Diese kubischen Splines haben insbesondere eine Anwendung in der graphischen Datenverarbeitung und erscheinen dem menschlichen Auge besonders glatt (vgl. [22], S.364). Sie bieten einen guten Kompromiss zwischen Rechenaufwand und Glattheit (siehe Definition 2.22 zu glatten Funktionen). Im Folgenden werden wir daher noch einmal diese Splintypen näher untersuchen und daraus den Zusammenhang zu Radialen Basisfunktionen herleiten. Die Definition erfolgt analog zur Definition 2.1 (vgl. [52], S.298).

Definition 2.3 (Univariater kubischer Spline)

Für die Menge an Stützstellen $\tilde{\mathcal{X}} = \{x_0 < x_1 < \dots < x_{n+1}\}$ ist der Raum der kubischen Splines

$$\mathcal{S}_3(\tilde{\mathcal{X}}) = \left\{ s \in C^2([x_0, x_{n+1}]) : s|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathcal{P}_3, i = 0, \dots, n \right\} \subset C^2(\mathbb{R}).$$

Es fehlt noch eine elementare Bedingung, um mit Hilfe von Splines eine gesuchte Funktion f zu interpolieren. Für die Funktionswerte $\mathcal{Y} = \{y_i : y_i = f(x_i), i = 1, \dots, n\}$ an den Stützstellen \mathcal{X} muss nämlich gelten:

$$s(x_i) = f(x_i) = y_i \quad \text{für alle } i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

Mit Hilfe dieser Interpolationsbedingung erhält man nun n Bedingungen zum Aufstellen eines Gleichungssystems. Aus Theorem 2.2 ist bekannt, dass der Raum kubischer Splines $\mathcal{S}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ die Dimension $n+3+1 = n+4$ hat. Es handelt sich hier um ein unterbestimmtes Gleichungssystem. Demnach fehlen noch vier zusätzliche Bedingungen, um eine eindeutige Interpolante zu finden. Für dieses Problem werden in der Literatur verschiedene Möglichkeiten zusätzlicher Bedingungen vorgestellt. Da diese sich immer auf die Randintervalle beziehen, spricht man auch von Randbedingungen. Zur weiteren Untersuchung verwenden wir hier die natürliche Randbedingung (auch freie Randbedingung

genannt). Physikalisch entsteht diese aus dem Prinzip der Energieminimierung. Wird eine Straklatte zwischen zwei Punkten eingespannt, so verbraucht diese Energie für die Krümmung, welche für kleine Krümmungen durch das Funktional $J(s) = \int_{x_0}^{x_{n+1}} s''(x)^2 dx$ angenähert werden kann. Da die benötigte Energie für kleine Krümmungen minimal ist, wird auch das Funktional minimiert (vgl. [48], S.108). Aus dem Minimierungsproblem erhält man auf „natürliche“ Art die Randbedingungen

$$s''(x_1) = s^{(3)}(x_1) = 0 \quad \text{und} \quad s''(x_n) = s^{(3)}(x_n) = 0 \quad (2)$$

(für eine ausführliche Herleitung siehe [48]). Dies ist genau dann der Fall, wenn der kubische Spline auf den Teilintervallen des Randes ein Polynom ersten Grades ist. Wendland fasst dies wie folgt zusammen (vgl.[54], S.8):

Definition 2.4 (Natürlicher kubischer Spline (nach Wendland))

Für die Menge an Stützstellen $\tilde{\mathcal{X}} = \{x_0 < x_1 < \dots < x_{n+1}\}$ ist der Raum der natürlichen kubischen Splines definiert als

$$\mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}}) = \left\{ s \in \mathcal{S}_3(\tilde{\mathcal{X}}) : s|_{[x_0, x_1]}, s|_{[x_n, x_{n+1}]} \in \mathcal{P}_1 \right\} \subset \mathcal{S}_3(\tilde{\mathcal{X}}).$$

In der Literatur werden die natürlichen kubischen Splines häufig leicht anders formuliert, was an unserer Modifikation der Stützstellenmenge \mathcal{X} liegt. In Anhang A.1 wird dies zur Vervollständigung neben weiteren Randbedingungen aufgeführt. Es lässt sich nun zeigen, dass natürliche kubische Splines eine eindeutige Interpolante für das Interpolationsproblem im Eindimensionalen liefern. Unter anderem in dem Buch von Plato [36] und bei Schaback und Wendland [43] finden sich hierzu detaillierte Ausführungen. Um die Interpolation mittels natürlicher kubischer Splines zu veranschaulichen, betrachten wir noch zwei Beispiele. Außerdem wird in Anhang A.1 eine Berechnung

des natürlichen kubischen Splines nach Wendland gezeigt.

Beispiel 2.5 (Kubischer Spline für Höhenlinien)

An dieser Stelle wird noch einmal das Beispiel zur Darstellung von Höhenlinien aus Kapitel 1 aufgegriffen. Es soll die Freihandfunktion f , welche als Geländeprofil auf dem Intervall $[0, 3.85]$ zu interpretieren ist, interpoliert werden [Programm: *Splineinterpolation.ggb*].

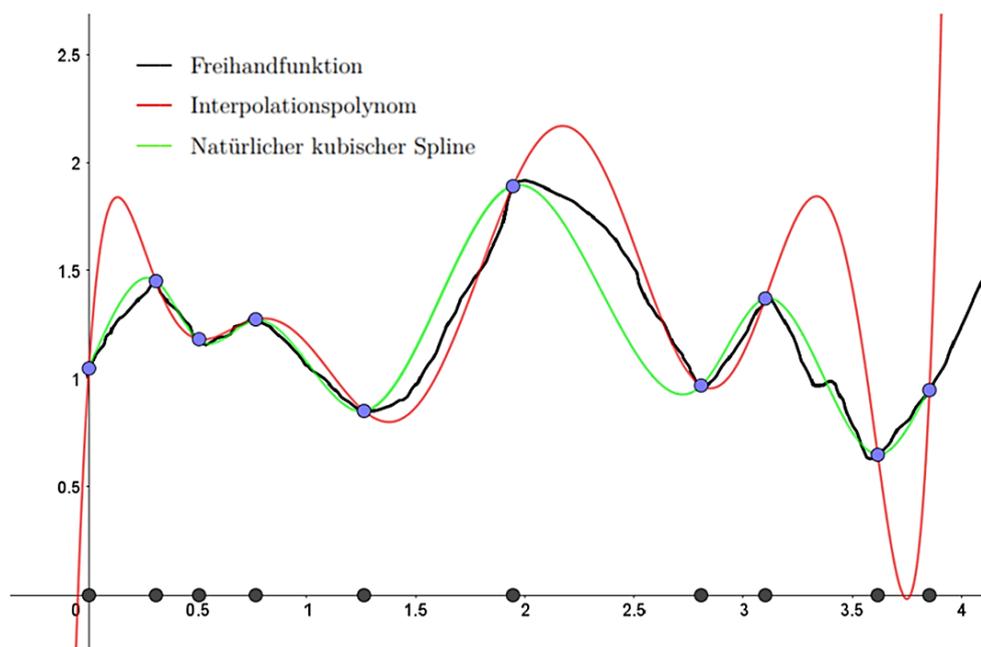


Abbildung 5: Darstellung von Höhenlinien durch kubische Spline-Interpolation auf dem Intervall $[0, 3.85]$.

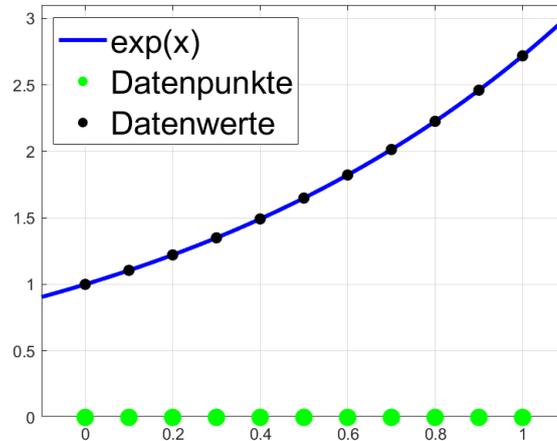
In Abbildung 5 ist f schwarz dargestellt. Es liegen zehn Stützstellen \mathcal{X} vor und entsprechende Stützwerte \mathcal{Y} . In Abbildung 5 ist nun der interpolierende natürliche kubische Spline s in grün dargestellt, während zum Vergleich auch noch einmal das Interpolationspolynom in rot eingezeichnet ist. Man sieht leicht, dass der Spline s insbesondere an den Intervallrändern nicht so stark von der Funktion f abweicht, wie das Interpolationspolynom. Im Gegensatz

zur Polynominterpolation beträgt der Fehler des natürlichen kubischen Splines in der L^1 -Norm 0.3604 statt 0.7661 und ist damit deutlich kleiner.

Beispiel 2.6 (Spline-Interpolation der Exponentialfunktion)

Mit diesem Beispiel soll gezeigt werden, wie genau ein natürlicher kubischer Spline berechnet werden kann. Dazu betrachten wir $f(x) = \exp(x)$ als zu interpolierende Funktion auf dem Intervall $[-0.1, 1.1]$. Es seien hier im Gegensatz zum vorherigen Beispiel äquidistant verteilte Stützstellen gegeben, welche den Abstand $h = x_{i+1} - x_i = 0.1$ haben. Demnach ist $\mathcal{X} = \{0, 0.1, \dots, 1\}$ die Stützstellenmenge, nach Wendland betrachten wir jedoch die erweiterte Menge $\tilde{\mathcal{X}}$. Zur Interpolation stehen die Informationen aus Tabelle (a) der Abbildung 6 zur Verfügung.

$\tilde{\mathcal{X}}$	\mathcal{Y}
x_0	-0.1
x_1	0 $y_1 = \exp(0)$
x_2	0.1 $y_2 = \exp(0.1)$
x_3	0.2 $y_3 = \exp(0.2)$
x_4	0.3 $y_4 = \exp(0.3)$
x_5	0.4 $y_5 = \exp(0.4)$
x_6	0.5 $y_6 = \exp(0.5)$
x_7	0.6 $y_7 = \exp(0.6)$
x_8	0.7 $y_8 = \exp(0.7)$
x_9	0.8 $y_9 = \exp(0.8)$
x_{10}	0.9 $y_{10} = \exp(0.9)$
x_{11}	1.0 $y_{11} = \exp(1.0)$
x_{12}	1.1



(a) Gegebene Daten.

(b) Zu interpolierende Funktion $f(x) = \exp(x)$.

Abbildung 6: Zu interpolierende Funktion und zugehörige Datenwerte.

Gesucht ist nun der natürliche kubische Spline $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$, welcher $f(x) = \exp(x)$ auf $\tilde{\mathcal{X}} = \{-0.1, 0, \dots, 1.1\}$ interpoliert. Die Interpolationsbedingung lautet $s(x_i) = f(x_i) = y_i$ für $i = 1, \dots, 11$. Zusätzlich seien die Randbedingungen $s''(x_1) = s^{(3)}(x_1) = 0$ und $s''(x_{11}) = s^{(3)}(x_{11}) = 0$ gegeben.

Die allgemeine Darstellung eines Splines $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ sowie dessen Ableitungen auf dem Teilintervall $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ werden ausführlich in Anhang A.1 diskutiert. An dieser Stelle soll nur eine verkürzte Berechnungsformel angegeben werden. Da es sich bei $s|_{I_i}$ um ein Polynom dritten Grades handelt, lautet eine allgemeine Darstellung von s für $i = 0, \dots, n$

$$s|_{I_i}(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3.$$

Für die Polynome auf den Teilintervallen I_i zwischen den Stützstellen $\mathcal{X} = \{x_1, \dots, x_{11}\}$ lassen sich die aus der Interpolationsbedingung und der Stetigkeitsanforderung resultierenden Gleichungen zusammenfassen (siehe dazu auch Anhang A.1). Da die Stützstellen äquidistant verteilt sind, lassen sich die Gleichungssysteme mit Hilfe der zweiten Momente in reduzierter Form darstellen. Es bezeichne

$$m_i = s''(x_i)$$

die zweite Ableitung des Splines s ausgewertet an der Stützstelle x_i für $i = 1, \dots, n$. Die zweiten Momente m_i müssen dann das Gleichungssystem

$$m_{i-1} + 4m_i + m_{i+1} = \frac{6}{h^2}(y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}) \quad \text{für } i = 2, \dots, n-1$$

erfüllen. In Matrixnotation

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & & & 0 \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & 1 & 4 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & 1 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_2 \\ m_3 \\ \vdots \\ m_{n-1} \end{pmatrix} = \frac{6}{h^2} \begin{pmatrix} y_1 - 2y_2 + y_3 \\ y_2 - 2y_3 + y_4 \\ \vdots \\ y_{n-2} - 2y_{n-1} + y_n \end{pmatrix}$$

Aus den Randbedingungen ergeben sich die Momente

$$m_0 = m_1 = m_n = m_{n+1} = 0.$$

Für $i = 1, \dots, n-1$ genügen die Koeffizienten $a_i, b_i, c_i, d_i \in \mathbb{R}$ schließlich den Gleichungen

$$a_i = y_i, \quad b_i = \frac{6(f_{i+1} - f_i) - h^2(m_{i+1} - m_i)}{6h}, \quad c_i = \frac{m_i}{2}, \quad d_i = \frac{m_{i+1} - m_i}{6h}.$$

Auf den Randintervallen erhalten wir aus der Randbedingung nach Wendland

$$c_0 = c_n = d_0 = d_n = 0,$$

sowie mit den Glattheitsbedingungen

$$\begin{aligned} b_0 = b_1 \quad \text{und} \quad a_0 = a_1 - b_0(x_1 - x_0) \\ = a_1 - b_1 h \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} b_n &= b_{n-1} + 2c_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + 3d_{n-1}(x_n - x_{n-1})^2 \\ &= b_{n-1} + 2c_{n-1}h + 3d_{n-1}h^2 \\ a_n &= a_{n-1} + b_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + c_{n-1}(x_n - x_{n-1})^2 + d_{n-1}(x_n - x_{n-1})^3 \\ &= a_{n-1} + b_{n-1}h + c_{n-1}h^2 + d_{n-1}h^3. \end{aligned}$$

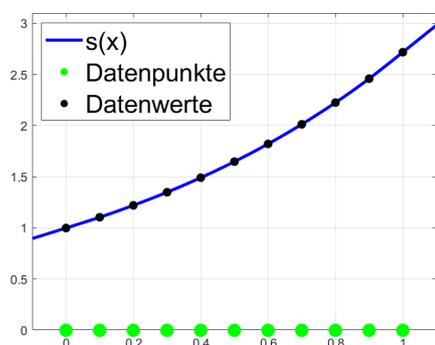
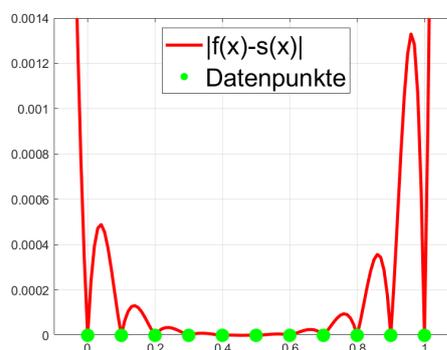
(a) Interpolante $s \in N_3(\tilde{\mathcal{X}})$ (b) „Fehler“ $|f(x) - s(x)|$ von s zu f

Abbildung 7: Der kubische Spline s zur Funktion f und der „Fehler“ $|f(x) - s(x)|$ der Interpolation auf der Menge $\tilde{\mathcal{X}}$. Die Interpolation wurde mit der natürliche Randbedingung nach Wendland durchgeführt.

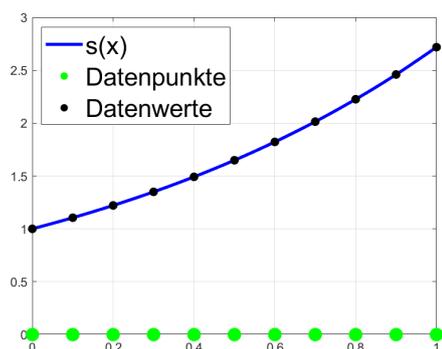
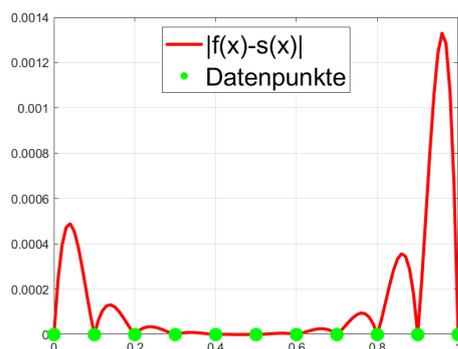
(a) Interpolante $s \in N_3(\mathcal{X})$ (b) „Fehler“ $|f(x) - s(x)|$ von s zu f

Abbildung 8: Der kubische Spline s zur Funktion f und der „Fehler“ $|f(x) - s(x)|$ der Interpolation auf der Menge \mathcal{X} . Die Interpolation wurde mit der natürliche Randbedingung durchgeführt.

Die Gleichungssysteme wurden mit Matlab gelöst [Programm: *Splineinterpolation.m*]. Das Ergebnis für die Randbedingung nach Wendland ist in den Abbildungen 7 dargestellt. Die eigentliche Interpolante für die Stützstellenmenge \mathcal{X} wird in Abbildung 8 gezeigt.

2.1.2 Güte der Spline-Interpolation und Approximation

Abschließend soll noch eine Fehlerbetrachtung für die Interpolation mit natürlichen kubischen Splines erfolgen. In Kapitel 3 wird diese noch einmal aufgegriffen und auf Radiale Basisfunktionen in der Raumdimension d verallgemeinert. Zunächst einmal lässt sich aber festhalten, dass die Interpolante $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ über eine gute Konvergenzeigenschaft verfügt ([55], S.88 und [37], S.83).

Proposition 2.7 (Fehlerabschätzung)

Sei die zu interpolierende Funktion $f \in C^4([x_1, x_n])$. Dann gilt für den natürlichen kubischen Spline $s \in \mathcal{N}_3(\mathcal{X})$ die Fehlerabschätzung

$$\|s - f\|_\infty \leq h^4 \|f^{(4)}\|_\infty.$$

Hierbei beschreibt

$$h = \max_{i=0, \dots, n-1} h_i = \max_{i=0, \dots, n-1} x_{i+1} - x_i$$

die Feinheit der Stützstellen.

Beweis Siehe Anhang A.1. □

Neben der gezeigten Berechnung des Fehlers in der Supremumsnorm, lohnt sich auch eine Beschäftigung mit der L_2 -Norm. Diese steht in direktem Zusammenhang mit der bereits beschriebenen Energieminimierung und liefert eine Verknüpfung mit den Radialen Basisfunktionen, was im nächsten Abschnitt gezeigt werden soll. Halten wir also fest (vgl. [43], S.183 und [54], S.9):

Proposition 2.8 Sei $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ der natürliche kubische Spline, der die Funktion $f \in C^2([x_0, x_{n+1}])$ interpoliert. Es gilt also an den Stützstellen $s(x_i) = f(x_i)$ für alle $i = 1, \dots, n$. Dann minimiert s die Seminorm

$$\|g''\|_{L^2[x_0, x_{n+1}]}^2 = \langle g'', g'' \rangle_{L^2[x_0, x_{n+1}]} = \int_{x_0}^{x_{n+1}} |g''(x)|^2 dx$$

für alle Funktionen $g \in C^2([x_0, x_{n+1}])$, welche die Interpolationsbedingung $g(x_i) = f(x_i)$ erfüllen. Es gilt also

$$\begin{aligned} \|s''\|_{L^2[x_0, x_{n+1}]}^2 &\leq \|g''\|_{L^2[x_0, x_{n+1}]}^2 \\ \text{und damit} \quad \|s'' - f''\|_{L^2[x_0, x_{n+1}]}^2 &\leq \|f''\|_{L^2[x_0, x_{n+1}]}^2. \end{aligned}$$

Beweis Eine ausführliche Darstellung kann in Schaback und Wendland ([43], S.183 ff.) oder Schwarz und Köckler ([48], S.108 ff.) nachgelesen werden. \square

Diese Eigenschaft wird auch Minimale-Norm-Eigenschaft genannt und gilt sogar für Funktionen f aus dem Sobolev-Raum $\mathcal{H}^2[x_0, x_{n+1}]$. Sie bedeutet, dass bei kleinen Krümmungen der natürliche kubische Spline immer die Funktion ist, welche die Biegeenergie minimiert.

Bisher wurde nur der Fall betrachtet, dass eine überschaubare Datenmenge vorliegt. Daher konnten alle Datenpunkte $\tilde{\mathcal{X}}$ als Knoten berücksichtigt werden und die Knoten des Splines entsprachen den Stützstellen (daher wurde bisher auch keine begriffliche Unterscheidung vorgenommen). In realen Anwendungsfällen liegt jedoch häufig eine sehr hohe Anzahl an Messungen und damit verfügbaren Datenpunkten vor. Es ist dann nicht mehr sinnvoll, jeden vorliegenden Datenpunkt als Knoten für den Spline auszuwählen. Vielmehr sollten gezielt einzelne Punkte als Knoten ausgewählt werden, um mit Hilfe dieser eine Approximation statt Interpolation zu erreichen (vgl. [54],

S.13 f. und [5], S.342). Daher stellt sich an dieser Stelle die Frage, welche Datenpunkte als Knoten geeignet sind.

Diese Fragestellung führt zu einem Approximationsproblem, genauer gesagt auf das Konzept des Curve Fitting mit Splines. Vereinfacht lässt sich das Konzept so beschreiben, dass die Abweichung des Splines s von der unterliegenden Funktion f minimiert werden soll. Dies wird durch Least-Squares Kriterium ausgedrückt, es wird also eine quadratische Abweichung betrachtet

$$\sum_{i=0}^{N+1} (\omega_i (y_i - s(x_i)))^2. \quad (3)$$

Hier sind $\omega_i \in \mathbb{R}$ Gewichte, welche beispielsweise die Genauigkeit von y_i im Fall fehlerbehafteter Daten widerspiegeln können. Sind keine Informationen dieser Art bekannt, so werden die Gewichte gleich Eins gesetzt. Die Minimierung des Ausdrucks (3) soll schließlich einen adäquaten approximierenden Spline liefern (vgl. [11], S.45).

Das Minimierungsproblem lässt auch freie Parameter zu. In unserem Fall also freie, nicht festgelegte Knoten. Es ist sowohl die Position als auch die Anzahl der Knoten nicht vorgegeben. Vielmehr soll sie durch die Lösung des Minimierungsproblems so bestimmt werden, dass der entstehende Spline die Daten gut approximiert.

Die Lösung der beschriebenen Minimierungsaufgabe ist alles andere als trivial. Es handelt sich um ein nichtlineares Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen (vgl. [11], S.53). Es gibt keine allgemeingültige Regel, nach der die Knoten auszuwählen sind. Es lässt sich lediglich festhalten, dass mehr Knoten an den Stellen benötigt werden, an denen der Graph der Funktion f schnellen Schwankungen unterliegt oder eine komplexe Form hat (vgl. [11], S.46). Dierckx schlägt in Kapitel 4 seines Buches *Curve and Surface Fitting with Splines* [11] dazu einige Algorithmen vor, welche aufgrund des hohen

Ressourcenverbrauchs jedoch nur für eine geringe Gesamtzahl an Knoten geeignet sind. Ebenso ist es problematisch den richtigen Startwert zu finden.

Daher wird ein weiteres Konzept zum Festlegen der verwendeten Spline-Knoten vorgestellt. Das Konzept der Smoothing Splines. Jene erlauben es nicht mehr, eine optimale Knotenzahl oder -Position zu finden. Vielmehr ist es das Ziel eine ausreichend gute Lösung zu finden. Diese Art von Verfahren sind deutlich effizienter als die Least-Squares Curve Fitting Verfahren (vgl. [11], S. 75). Es sei, wie schon zuvor, eine Menge von geordneten Datenpunkten $\tilde{\mathcal{X}}$ gegeben. Es soll, wie auch bei den Curve Fitting Splines, eine Menge an Knoten $\{\tau_i : i = 1, \dots, l \text{ mit } l \ll N + 1\}$ festgelegt werden, sodass die Summe der quadratischen Abweichungen kleiner als ein Schwellenwert L wird

$$\sum_{i=0}^{N+1} (\omega_i (y_i - s(x_i)))^2 < L. \quad (4)$$

Das zugehörige Minimierungsproblem lautet

$$\min \sum_{i=1}^l \left(s^{(k)}(\tau_{i+}) - s^{(k)}(\tau_{i-}) \right)^2, \quad (5)$$

wobei der Ausdruck in Klammern sich auf die möglichen Sprungstellen an den Knoten bezieht (vgl. [11], S.50). Da eine möglichst glatte Kurve gesucht ist, soll die Summe dieser Sprünge also minimiert werden. Sowohl der Glättungsparameter L muss für die Lösung des Verfahrens bestimmt werden, als auch letztlich die Position der Knoten. In Kapitel 5 seines Buches [11] liefert Dierckx dazu einen geeigneten Algorithmus.

Für eine allgemeine Einordnung von Verfahren zur Knotenwahl sei der Artikel von Cox, Harris und Kenward [7] empfohlen. Die Dissertation von Schütze [47] liefert ebenso wie Dierckx konkrete Algorithmen.

2.1.3 Von kubischen Splines zu Radialen Basisfunktionen

Abschnitt 2.1.1 hat bereits Splines als probates Mittel zur Interpolation verstreuter Daten eingeführt. Ziel der folgenden Ausführung ist es nun, eine Verbindung zur Methode der Radialen Basisfunktionen zu schaffen. Es wird gezeigt werden, auf welche Weise beide Methoden zusammenhängen und dass die RBF-Methode die natürliche kubische Spline-Interpolation verallgemeinert. Die Herleitung folgt der Abhandlung von de Marchi ([8], S.11 ff.) und Wendland ([54], S.10 f.).

Als Ausgangspunkt wählen wir die allgemeine Darstellung kubischer Splines (siehe Theorem 2.2), die selbstverständlich auch für natürliche kubische Splines gilt. Es sei $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ gegeben mit

$$s(x) = \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+^3 + \sum_{i=0}^3 b_i x^i \quad \text{für alle } x \in [x_0, x_{n+1}].$$

Zusätzlich gelten die Randbedingungen (2)

$$s''(x_1) = s^{(3)}(x_1) = 0 \quad (\star)$$

$$\text{und} \quad s''(x_n) = s^{(3)}(x_n) = 0. \quad (\star\star)$$

Ziel ist es nun, die Randbedingungen derart zu nutzen, dass eine alternative Darstellung für den Spline s erreicht wird. Dazu wird die zweite Ableitung von $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$

$$s''(x) = 6 \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+ + b_2 + b_3 x$$

benötigt.

Ausgehend von dieser ergibt sich mit Bedingung (\star) für ein $x \in [x_0, x_1]$ die Charakterisierung

$$s|_{[x_0, x_1]} = \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+^3 + b_0 + b_1 x.$$

Da für alle $x \in [x_0, x_1]$ die Summe der abgebrochenen Potenzfunktionen $\sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+$ Null ergibt, ist die Bedingung (\star) $s''(x_1) = 0$ genau dann erfüllt, wenn $b_2 + b_3 x = 0$ gilt. Demnach also für $b_2 = b_3 = 0$. Zusammengefasst erhält man obige Darstellung.

Analog sieht man leicht, dass Bedingung $(\star\star)$ angewandt auf die zweite Ableitung zur Darstellung

$$s|_{[x_n, x_{n+1}]} = \sum_{l=0}^3 \binom{3}{l} (-1)^{3-l} \left(\sum_{i=1}^n a_i x_i^{3-l} \right) x^l + b_0 + b_1 x$$

führt. Für die Summe der abgebrochenen Potenzfunktionen $\sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+$ gilt in diesem Fall

$$\sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+ = \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i),$$

da $x \in [x_n, x_{n+1}]$. Damit $(\star\star)$ mit $s''(x_n) = 0$ gilt, muss nun wieder für $b_2 = b_3 = 0$ gelten und zusätzlich $\sum_{i=1}^n a_i = \sum_{i=1}^n a_i x_i = 0$. Angewandt auf die Ausgangsgleichung liefert dies zusammen mit dem binomischen Lehrsatz

$$\begin{aligned} s(x) &= \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+^3 + \sum_{i=0}^3 b_i x^i \\ &\stackrel{(\star\star)}{=} \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)^3 + b_0 + b_1 x \\ &= \sum_{l=0}^3 \binom{3}{l} (-1)^{3-l} \left(\sum_{i=1}^n a_i x_i^{3-l} \right) x^l + b_0 + b_1 x. \end{aligned}$$

Die gezeigten Charakterisierungen gelten nun lediglich auf den äußeren Teilintervallen von $[x_0, x_{n+1}]$. Es soll aber eine Formulierung des Splines $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ für alle $x \in [x_0, x_{n+1}]$ gefunden werden, die darüber hinaus eine Verbindung zur RBF-Methode schafft. Die nachfolgende Proposition erreicht dies (vgl. [54], S.10 und [8], S.12).

Proposition 2.9 *Jeder natürliche kubische Spline $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ lässt sich darstellen als*

$$s(x) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|x - x_i\|_2) + q(x) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}, \quad (6)$$

wobei $\phi(x) = x^3$ für $x \in \mathbb{R}_+$ und $q \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ ein Polynom von Grad 1 ist. Die Koeffizienten c_i müssen die Bedingung $\sum_{i=1}^n c_i = \sum_{i=1}^n c_i x_i = 0$ erfüllen.

Beweis Der Beweis verwendet die Erkenntnisse vorbereitenden Charakterisierung und verläuft analog zu [54], S.10 und [8], S.12. Insgesamt ergibt sich für den gesamten Spline $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ mit den Randbedingungen (\star) und $(\star\star)$, dass

$$b_2 = b_3 = 0 \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^n a_i = \sum_{i=1}^n a_i x_i = 0$$

gelten muss.

Unter zusätzlicher Verwendung von $x_+ = \frac{|x|^3+x^3}{2}$ erhält man durch Einsetzen

$$\begin{aligned}
s(x) &= \sum_{i=1}^n a_i (x - x_i)_+^3 + \sum_{i=0}^3 b_i x^i \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{a_i}{2} |x - x_i|^3 + \sum_{i=1}^n \frac{a_i}{2} (x - x_i)^3 + \sum_{i=0}^3 b_i x^i \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{a_i}{2} |x - x_i|^3 + \sum_{i=1}^n \frac{a_i}{2} (x - x_i)^3 + b_0 + b_1 x \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{a_i}{2} |x - x_i|^3 + \sum_{l=0}^3 \frac{1}{2} \binom{3}{l} (-1)^{3-l} \sum_{i=1}^n a_i x_i^{3-l} x^l + b_0 + b_1 x \\
&= \sum_{i=1}^n c_i |x - x_i|^3 + \tilde{b}_0 + \tilde{b}_1 x.
\end{aligned}$$

Hier wurde $c_i = \frac{a_i}{2}$, $\tilde{b}_0 = b_0 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_i x_i^3$ und $\tilde{b}_1 = b_1 + \frac{3}{2} \sum_{i=1}^n a_i x_i^2$ gewählt. Im letzten Schritt wird schließlich die Radiale Basisfunktion Radial Powers $\phi(x) = x^3$ für $x \in \mathbb{R}_+$ in der Darstellung ersetzt und $\tilde{b}_0 + \tilde{b}_1 x = q(x)$ für $q \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ zusammengefasst. Diese liefert die Behauptung

$$s(x) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|x - x_i\|_2) + q(x) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}. \quad \square$$

Bei dieser Darstellung handelt es sich also bis auf ein Polynom von Grad 1 um eine Linearkombination der Radialen Basisfunktionen Radial Powers mit $\beta = 3$. Diese Radiale Basisfunktion wird in Kapitel 2.3 noch einmal ausführlich diskutiert. An dieser Stelle lässt sich festhalten, dass sie von den Stützstellen abhängt und es sich um eine Verschiebung handelt. Hier wurde bewusst die euklidische Norm statt des Betrags gewählt, um den Zusammenhang zur RBF-Methode zu verdeutlichen. Die Umkehrung von Proposition 2.9 gilt ebenso (vgl. [54], S.10 und [8], S.12):

Proposition 2.10 *Umgekehrt existiert für jede Menge an Stützstellen $\mathcal{X} = \{x_1 < x_2 < \dots < x_n\} \subset \mathbb{R}$ und für jede Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eine Interpolante s der Form (6)*

$$s(x) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|x - x_i\|_2) + q(x) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}, q \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R}),$$

welche die Bedingung $\sum_{i=1}^n c_i = \sum_{i=1}^n c_i x_i = 0$ erfüllt, so dass gilt:

$$s(x_i) = f(x_i) = y_i \quad \text{für alle } i = 1, \dots, n.$$

Damit haben wir für den univariaten Fall gezeigt, dass natürliche kubische Splines, bis auf ein Polynom vom Grad 1, der RBF-Methode aus Definition 1.4 gleichen. Was nun noch fehlt, ist eine Verallgemeinerung dieser Erkenntnis auf Raumdimensionen $d \geq 2$. Dazu benötigen wir die schon angesprochene Minimierungseigenschaft kubischer Splines aus Proposition 2.8.

Dieser Abschnitt folgt der Darstellung von Wendland ([54], S.12 f.) und Schaback [41]. Hier wird lediglich eine kurze Zusammenfassung der Resultate der genannten Arbeiten gegeben. Für ausführliche Beweise sei insbesondere auf die Arbeit von Schaback [41] verwiesen.

Mit Hilfe der Seminorm aus Proposition 2.8 kann ein Vektorraum

$$\mathcal{F}_\phi([x_0, x_{n+1}]) = \left\{ \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|x - x_i\|_2) : c_i \in \mathbb{R}, \sum_{i=1}^n c_i q(x_i) = 0 \quad \forall q \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R}) \right\}$$

über einem Gebiet $[x_0, x_{n+1}] \in \mathbb{R}$, welches \mathcal{X} enthält, definiert werden.

Für Funktionale $f, g \in \mathcal{F}_\phi([x_0, x_{n+1}])$ charakterisiert die Seminorm

$$\begin{aligned} \langle f, g \rangle_{L^2[x_0, x_{n+1}]} &= \int_{x_0}^{x_{n+1}} f''(x)g''(x)dx \\ \Rightarrow \quad \langle f, g \rangle_\phi &= \left\langle \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|x - x_i\|_2), \sum_{j=1}^m d_j \phi(\|x - x_i\|_2) \right\rangle_\phi \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m c_i d_j \phi(\|x_i - x_j\|_2) \end{aligned}$$

dann das (semi-)innere Produkt dieses Raumes. Wichtig ist, dass dieser Raum ausgehend von der Funktion $\phi(x) = \|x\|_2^3$ konstruiert wird. Der Abschluss des Raums $\mathcal{F}_\phi([x_0, x_{n+1}])$ bezüglich der Seminorm zusammen mit der Menge der Polynome ersten Grades entspricht genau dem Sobolevraum $\mathcal{H}^2[x_0, x_{n+1}]$

$$\mathcal{N} = \text{clos}_{\|\cdot\|_\phi} \mathcal{F}_\phi([x_0, x_{n+1}]) + \mathcal{P}_1(\mathbb{R}) \simeq \mathcal{H}^2[x_0, x_{n+1}].$$

Das Minimierungsproblem aus Abschnitt 2.1.1 lässt sich nun beschreiben als das Finden einer Funktion $s \in \mathcal{H}^2[x_0, x_{n+1}]$, welche die Seminorm $\langle \cdot, \cdot \rangle_\phi$ minimiert und die Interpolationsbedingung $s(x_i) = f(x_i), i = 1, \dots, n$ erfüllt. Im Fall der natürlichen kubischen Splines und damit einer Raumdimension lässt sich leicht einsehen, dass s aus dem zugehörigen Sobolevraum stammt. Im Fall von höheren Raumdimensionen führt diese Herangehensweise zu den Native Spaces, die in Kapitel 3.2 beschrieben werden. Die Verallgemeinerung des Minimierungsproblems lautet wie folgt:

Ausgehend von einer beliebigen Radialen Basisfunktion $\Phi: \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$ konstruiert man einen Raum $\mathcal{F}_\Phi(\Omega)$. Dieser ist analog zum eindimensionalen Äquivalent aufgebaut, es gilt lediglich die Einschränkung an $\Phi(\cdot)$, dass damit ein inneres Produkt konstruierbar sein muss. Das innere Produkt definiert die Native-Space-Norm und mit ihm lässt sich wieder ein

Abschluss des Raumes erzielen. Der Native Space ergibt sich als Abschluss des Raumes $\mathcal{F}_\Phi(\Omega)$ zusammen mit einem Polynomraum:

$$\mathcal{N} = \text{clos}_{\|\cdot\|_\Phi} \mathcal{F}_\Phi(\Omega) + \mathcal{P}_m(\mathbb{R}^d).$$

Gesucht wird schließlich eine Interpolante \mathcal{P}_f , welche aus dem Native Space stammt und die Seminorm minimiert. Das Ergebnis dieses Minimierungsproblems ist dann im folgenden Theorem festgehalten (vgl. [54], S.11).

Theorem 2.11 (Existenz von \mathcal{P}_f der erweiterten RBF-Methode)

Für eine Menge paarweise verschiedener Stützstellen

$\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_i: i = 1, \dots, n\} \subset \mathbb{R}^d$ und zugehörige reelle Datenwerte $\mathcal{Y} = \{y_i: i = 1, \dots, n\} \subset \mathbb{R}$ gibt es eine Interpolante der Form

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2) + q(\mathbf{x}) \quad \text{für } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d,$$

wobei $\phi: [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ eine univariate, feste Funktion und $q \in \mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ ein d -variates Polynom von niedrigerem Grad ist.

Die Koeffizienten c_i müssen dann die Bedingung $\sum_{i=1}^n c_i p(\mathbf{x}_i) = 0$ für alle $p \in \mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ erfüllen.

Aus diesem Theorem können zwei Versionen der RBF-Methode abgeleitet werden. Zum einen die schon bekannte Variante aus Definition 1.4. Diese nennen wir auch einfache RBF-Methode

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2). \quad (7)$$

In diesem Fall gibt es keine zusätzlichen Polynome niedrigen Grades und die Interpolante kann durch das Gleichungssystem

$$A\mathbf{c} = \mathbf{y} \quad \text{mit} \quad A = (\phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|_2))_{1 \leq i, j \leq n}$$

bestimmt werden.

Die Variante aus Theorem 2.11 nennen wir erweiterte RBF-Methode. Sie liefert eine Interpolante der Form

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2) + q(\mathbf{x}). \quad (8)$$

Zu klären ist nun die Frage, die schon in Kapitel 1 aufgeworfen wurde: In welchen Fällen existiert eine eindeutige Interpolante? Beziehungsweise für welche Radialen Basisfunktionen kann eine eindeutige Interpolante auf diese Weise konstruiert werden? Diese Fragestellung wird zunächst im Hinblick auf die einfache RBF-Methode im Kapitel 2.2 untersucht. In Kapitel 2.3 wird anschließend die erweiterte RBF-Methode betrachtet.

2.2 RBFs und positiv definite Funktionen

Im vorigen Abschnitt 2.1 wurde gezeigt, dass das Problem der Interpolation der verstreuten Daten mit der einfachen RBF-Methode (Definition 1.4) zur Lösung eines linearen Systems der Form

$$A\mathbf{c} = \mathbf{y}$$

führt, wobei $A_{ji} = \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|_2)$ und y_i der i -te Datenwert ist. Um dieses System lösen zu können ist die Nichtsingularität der Matrix A erforderlich. Um die Nichtsingularität der Matrix A garantieren zu können, kann man die positive Definitheit dieser Matrix als Kriterium heranziehen. Der Zusammenhang zwischen der Nichtsingularität einer Matrix und der positiven Definitheit dieser Matrix ist folgender: Ist eine Matrix A positiv definit, so ist diese nichtsingulär. Ziel dieses Kapitels ist es eine Klasse von Funktionen ϕ zu charakterisieren, für welche die Matrix A positiv definit ist. Zudem werden auch explizit Radiale Basisfunktionen aus der folgenden Tabelle 4 un-

tersucht, ob diese zu einer eindeutigen Lösung des Systems in Bezug auf die einfache RBF-Methode führen. Dazu wird ein Zusammenhang zwischen der vollständigen Monotonie und den positiv definiten Radialen Basisfunktionen hergestellt.

Zur Veranschaulichung der Funktionen Gaussian, Inverse Quadratic, Multiquadrics und Inverse Multiquadrics sind die Plots dieser Funktionen in folgender Abbildung 9 zu sehen.

Art der Basisfunktion	$\phi(r), (r \geq 0)$
Unendlich glatte RBFs	
Gaussian (GA)	$e^{-(\varepsilon r)^2}$
Inverse Quadratics (IQ)	$\frac{1}{1 + (\varepsilon r)^2}$
Inverse Multiquadrics (IMQ)	$\frac{1}{\sqrt{1 + (\varepsilon r)^2}}$
Multiquadrics (MQ)	$\sqrt{1 + (\varepsilon r)^2}$
Stückweise glatte RBFs	
Linear	r
Thin Plate Spline (TPS)	$r^2 \log(r)$

Tabelle 4: Häufig verwendete Radiale Basisfunktionen

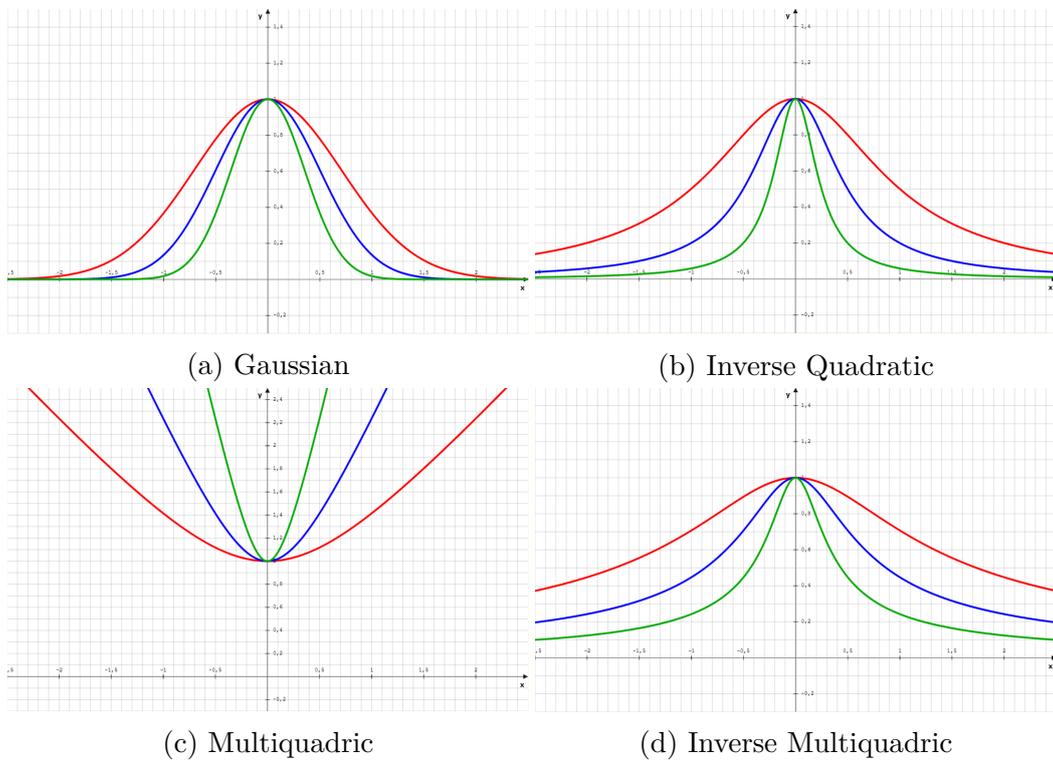


Abbildung 9: RBFs mit $\varepsilon=1$ rot, $\varepsilon=2$ blau, $\varepsilon=4$ grün [Programm: FunktionenPlotCodes.odt]

2.2.1 Positiv definite Matrizen und Funktionen

Wie bereits schon erwähnt, ist die Nichtsingularität der Matrix A Voraussetzung für das eindeutige Lösen des Gleichungssystems $A\mathbf{c} = \mathbf{y}$. Eine Möglichkeit diese Bedingung zu erhalten, ist durch die Erzeugung einer positiv definiten Matrix gegeben. Wann allerdings eine Matrix positiv definit ist, kann aus der folgenden Definition 2.12 entnommen werden (vgl. [8], S.25):

Definition 2.12 (Positiv (semi-)definite Matrix)

Eine reelle symmetrische Matrix A wird als positiv semidefinitiv bezeichnet, falls die zugehörige quadratische Form $\mathbf{c}^T A \mathbf{c} \geq 0$, also dementsprechend

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i c_j A_{ij} \geq 0$$

$\forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^N$. Falls die quadratische Form nur für $\mathbf{c} = 0$ Null ist, wird die Matrix A als positiv definit bezeichnet.

Nehmen wir an, dass die Basisfunktion B_k (Kapitel 1.1) eine positiv definite Interpolationsmatrix erzeugt, so dass man immer ein klar definiertes Interpolationsproblem hat. Um die Eigenschaft der positiv definiten Interpolationsmatrix zu erhalten (in Bezug auf die Basisfunktion B_k), wird nun die Klasse der positiv definiten Funktionen eingeführt (vgl. [8], S.26):

Definition 2.13 (Positiv (semi-)definite Funktion)

Eine stetige, komplexwertige Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ heißt positiv semi-definit, falls für alle paarweise verschiedenen Datenpunkte $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \mathbb{R}^d$ und $\mathbf{c} \in \mathbb{C}^N$ die quadratische Form

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)$$

nichtnegativ ist. Die Funktion ϕ nennt man positiv definit, falls die quadratische Form positiv ist für $\mathbf{c} \in \mathbb{C}^N$, wobei $\mathbf{c} \neq 0$.

Eine Radiale Basisfunktion wird demnach als positiv definit bezeichnet, wenn die zugehörige Interpolationsmatrix $A_{ji} = \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|_2)$ positiv definit ist. Nun folgt ein Beispiel zu einer positiv definiten Funktion (vgl. [8], S.26).

Beispiel 2.14

Zu zeigen gilt, dass $\phi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{x}^T \mathbf{y}}$ für ein festes $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ positiv definit auf \mathbb{R}^d ist. Es gilt per Definition 2.13:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N c_j \bar{c}_i \phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) &= \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N c_j \bar{c}_i e^{i(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)^T \mathbf{y}} \\
&= \left(\sum_{j=1}^N c_j e^{i\mathbf{x}_j^T \mathbf{y}} \right) \left(\sum_{i=1}^N \bar{c}_i e^{-i\mathbf{x}_i^T \mathbf{y}} \right) \\
&= \left| \sum_{j=1}^N c_j e^{i\mathbf{x}_j^T \mathbf{y}} \right|^2 \geq 0.
\end{aligned}$$

Demnach ist die Funktion $\phi(x) = e^{i\mathbf{x}^T \mathbf{y}}$ positiv definit und wird auch als „fundamentale“ positiv definite Funktion bezeichnet (siehe [14]).

Bemerkung 2.15

Aus der Diskussion in Kapitel 1.1 geht hervor, dass man positiv definite Funktionen als Basis verwenden kann um das lineare Gleichungssystem zu lösen. Dies bedeutet, dass $B_i(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ entspricht, wobei dies ein Interpolant der Form $\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N c_i B_i(\mathbf{x})$ ergibt. Darüber hinaus muss \mathcal{P}_f keine radiale Funktion sein, allerdings translationsinvariant. Dementsprechend gilt, dass \mathcal{P}_f dem Translationsinterpolant den originalen Daten gleicht (siehe [8], S.26).

Diese positiv definiten beziehungsweise positiv semidefiniten Funktionen haben einige Eigenschaften, die im folgenden Theorem zusammengefasst sind.

Theorem 2.16 Sei $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ eine positiv definite Funktion, dann gilt:

(a) $\Phi(0) \geq 0$ und $\Phi(0) = 0 \Leftrightarrow \Phi \equiv 0$

(b) $\Phi(-\mathbf{x}) = \overline{\Phi(\mathbf{x})} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$

(c) $|\Phi(\mathbf{x})| \leq \Phi(0) \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$

(d) Falls $\{\Phi_j, j = 1, \dots, m\}$ positiv semidefinite Funktionen sind und $\alpha_j \geq 0$ für $j = 1, \dots, m$, dann ist auch $\Phi = \sum_{j=1}^m \alpha_j \Phi_j$ positiv semidefinit. Falls eines der Φ_j positiv definit ist und der korrespondierende Koeffizient α_j positiv ist, dann ist auch Φ positiv definit.

(e) Das Produkt zweier positiv definiten Funktionen ist positiv definit.

Beweis Siehe hierzu ([54], S.65-66). □

Bemerkung 2.17

Aufgrund von 2.16(b) ist es ersichtlich, dass eine positiv semidefinite Funktion reellwertig ist, falls diese gerade ist. Man kann sich daher in der quadratischen Form auch auf reelle Koeffizientenvektoren $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^d$ beschränken.

Theorem 2.18 Sei $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Dann ist Φ positiv definit genau dann, wenn Φ gerade ist. Dementsprechend gilt $\forall N \in \mathbb{N}$ und $\forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$ und paarweise verschiedene Punkte $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i c_j \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) > 0.$$

Beweis Vergleiche ([8], S.27): Falls ϕ positiv definit und reellwertig ist, dann ist die Funktion auch gerade aufgrund von Theorem 2.16(b).

Sei $c_k = a_k + ib_k$, dann gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) &= \sum_{i,j=1}^N (a_i a_j + b_i b_j) \Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) \\ &\quad + i \sum_{i,j=1}^N a_j b_i [\Phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) - \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)]. \end{aligned}$$

Da Φ gerade ist, ist der zweite Summand auf der rechten Seite Null. Die erste Summe ist nichtnegativ und wird Null, falls $a_i = b_i = 0$. \square

Nun folgt ein weiteres Beispiel zu einer positiv definiten Funktion.

Beispiel 2.19

Die Kosinus-Funktion $\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}$ ist positiv definit auf \mathbb{R} aufgrund von 2.16(b) und der Tatsache, dass die Exponential-Funktion positiv definit ist (vgl. [8], S.27).

Wenn man mit Radialen Basisfunktionen der Form $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$ arbeitet, wird es einfacher sein, die univariate Funktion ϕ als positiv definite Radialfunktion zu bezeichnen. Eine Konsequenz dieser Notationskonvention ist die folgende Proposition (Vgl. [8], S.27):

Proposition 2.20 *Sei $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$ positiv definit (oder positiv semidefinit) und radial auf \mathbb{R}^d , dann ist ϕ auch positiv definit bzw. positiv semidefinit und radial auf \mathbb{R}^δ für jedes $\delta \leq d$.*

Beweis Der Beweis ist hierbei offensichtlich, da \mathbb{R}^δ ein Unterraum von \mathbb{R}^d ist. \square

Die klassische Art, positiv definite Funktionen und Radialfunktionen zu charakterisieren, beruht auf dem Satz von Schoenberg. Es folgt nun ein kurzer Überblick zum Ansatz der Charakterisierung von positiv definiten Funktionen mit Fourier-Transformationen (vgl. [8, S.27]).

Theorem 2.21 *Eine stetige Funktion $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ ist positiv definit und radial auf \mathbb{R}^d genau dann, wenn es sich um die Bessel-Transformation eines endlichen nicht-negativen Borel-Maßes μ auf $[0, \infty)$ handelt.*

Dazu betrachten wir

$$\phi(r) = \int_0^\infty \Omega_d(rt) d\mu(t),$$

wobei

$$\Omega_d(r) = \begin{cases} \cos(r) & \text{für } d = 1 \\ \Gamma(\frac{d}{2}) (\frac{2}{r})^{(d-2)/2} J_{(d-2)/2}(r) & \text{für } d \geq 2. \end{cases}$$

Hierbei ist J_ν die klassische Bessel-Funktion erster Art der Ordnung ν , wobei dies die Lösung der Bessel-Differentialgleichung ist. Für $x = 0$ kann die Funktion per Taylorreihe beschrieben werden:

$$J_\nu(x) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r \left(\frac{x}{2}\right)^{2r+\nu}}{\Gamma(\nu+r+1)r!},$$

wobei $\Gamma(\cdot)$ die Gammafunktion ist mit $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$ für $z \in \mathbb{C} : \operatorname{Re}(z) > 0$. Im Ursprung ($x = 0$) sind diese Funktionen für ganzzahlige ν endlich. Für nicht-ganzzahlige ν sind J_ν und $J_{-\nu}$ linear unabhängige Lösungen. Für ganzzahlige n gilt die Beziehung $J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(x) = J_n(-x)$. Insbesondere, wie schon gesehen, kann $\phi(x) = \cos(x)$ als fundamentale positiv definite und radiale Funktion auf \mathbb{R} gesehen werden.

2.2.2 Vollständig monotone Funktionen

Die positive Definitheit von Radialen Basisfunktionen mit Fourier Transformationen zu charakterisieren hat sich als aufwändig herausgestellt, da Fourier-Transformationen nicht immer leicht zu berechnen sind. Es gibt einen anderen und verständlicheren Ansatz, der auf der Definition von vollständig monotonen Funktionen basiert (vgl. [8], S.28).

Für ein besseres Verständnis wird nun auf die Definition von glatten Funktionen eingegangen (vgl. [19]):

Eine glatte Funktion ist eine mathematische Funktion, die unendlich oft differenzierbar, insbesondere stetig ist. Die Bezeichnung glatt kann durch folgende Anschauung motiviert werden: Der Graph einer glatten Funktion hat keine Ecken, also Stellen, an der sie nicht differenzierbar ist. Damit wirkt der Graph überall „besonders glatt“.

Für eine nichtleere, offene Teilmenge $D \subset \mathbb{R}$ bezeichnet man die Menge der reellwertigen und auf ganz D stetigen Funktionen mit $C(D)$, $C^0(D)$ oder mit $C^0(D, \mathbb{R})$. Entsprechend wird die Menge der einmal beziehungsweise für eine natürliche Zahl n die Menge der n -mal stetig differenzierbaren Funktionen mit $C^1(D)$ beziehungsweise mit $C^n(D)$ bezeichnet. Die Menge der n -mal stetig differenzierbaren Funktionen wird rekursiv durch

$$f \in C^n(D) \Leftrightarrow f \in C^1(D) \text{ und } f' \in C^{n-1}(D)$$

definiert. Es gilt stets

$$C^n(D) \subset C^{n-1}(D) \subset \dots \subset C^1(D) \subset C^0(D).$$

Definition 2.22 (Glatte Funktionen) *Eine Funktion $f: D \rightarrow \mathbb{R}$ heißt unendlich oft (stetig) differenzierbar oder glatt, wenn $f \in C^n(D)$ für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt. Die Menge aller glatten Funktionen auf D wird mit $C^\infty(D)$ notiert und es gilt*

$$C^\infty(D) := \bigcap_{n \in \mathbb{N}} C^n(D).$$

Nun haben wir die Grundlage für das Verständnis der Definition von vollständiger Monotonie geschaffen (vgl. [8], S.28):

Definition 2.23 (Vollständige Monotonie)

Eine stetige Funktion $\psi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ für die gilt

- $\psi \in C[0, \infty) \cap C^\infty(0, \infty)$
- $(-1)^l \psi^{(l)}(r) \geq 0, \forall l \in \mathbb{N}, r > 0,$

nennt man vollständig monoton auf $[0, \infty)$.

Die Definition der vollständigen Monotonie ermöglicht es mithilfe des Satzes von Schoenberg 2.27 zu überprüfen, ob eine Funktion Φ positiv definit und radial für alle Dimensionen d ist.

Derartige Funktionen sind nichtnegativ ($l = 0$), monoton fallend ($l = 1$), konvex ($l = 2$), etc. und alle Ableitungen haben bis auf die Vorzeichen dieselbe Eigenschaft (vgl.[34], S.69).

Die Taylorentwicklung von Gaussian und Inverse Quadratics werden nun aufgrund der wechselnden Vorzeichen bei den Ableitungen (in Bezug auf die Eigenschaften der vollständigen Monotonie) betrachtet (vgl. [19]):

Definition 2.24 Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall, $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ eine glatte Funktion und a ein Element von I . Dann heißt das Taylorpolynom n -ten Grades

$$T_f(x; a) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x - a)^k = f(a) + f'(a)(x - a) + \dots + R_n(x)$$

die Taylorreihe von f mit Entwicklungsstelle a und Restglied

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(a)}{(n+1)!} (x - a)^{n+1}.$$

Inverse Quadratic: $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ mit $a = 0$

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	n
$\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k$	1	0	$-x^2$	0	x^4	0	$-x^6$	0	x^8	\dots	$(-1)^n x^{2n}$

Tabelle 5: n -te Glied der Taylorentwicklung von Inverse Quadratic

Gaussian: $f(x) = e^{-x^2}$ mit $a = 0$

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8	...	n
$\frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k$	1	0	$-x^2$	0	$\frac{x^4}{2}$	0	$-\frac{x^6}{6}$	0	$\frac{x^8}{24}$	\dots	$(-1)^n \frac{x^{2n}}{n!}$

Tabelle 6: n -te Glied der Taylorentwicklung von Inverse Quadratic

Nun folgen einige der wichtigsten positiv definiten Funktionen, an denen gezeigt wird, dass diese vollständig monoton sind:

1. Die Funktion $\psi(r) = c$, $c \geq 0$ ist vollständig monoton auf $[0, \infty)$.
2. Die Funktion $\psi(r) = e^{-cr}$, $c \geq 0$ ist vollständig monoton auf $[0, \infty)$, da

$$(-1)^k \psi^{(k)}(r) = c^k e^{-cr} \geq 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

3. Die Funktion $\psi(r) = \frac{1}{(1+r)^\beta}$, $\beta \geq 0$ ist vollständig monoton auf $[0, \infty)$, da

$$(-1)^k \psi^{(k)}(r) = (-1)^{2k} \beta(\beta-1)\dots(\beta+k-1)(1+r)^{-(\beta+k)} \geq 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Die wesentlichsten Eigenschaften von vollständig monotonen Funktionen sind im folgendem Theorem 2.25 zusammengefasst (vgl. [14]):

Theorem 2.25 *Eigenschaften vollständig monotoner Funktionen*

- Eine nicht negative endliche Linearkombination vollständig monotoner Funktionen ist vollständig monoton.
- Das Produkt von zwei vollständig monotonen Funktionen ist vollständig monoton.
- Falls φ vollständig monoton ist und falls für ψ gilt, dass $\psi^{(l)} \geq 0$ für alle $l \geq 0$, dann ist $\psi \circ \varphi$ VM.
- Falls φ vollständig monoton und ψ eine positive Funktion ist, so dass ihre Ableitung vollständig monoton ist, dann ist $\varphi \circ \psi$ vollständig monoton.

Als „fundamentale“ vollständig monotone Funktion wird die Funktion Gaussian aufgrund ihrer Eigenschaften bezeichnet, was im Theorem 2.26 deutlicher wird. Dazu wird in der folgenden Abbildung 10 die Oberfläche dieser Funktion betrachtet, um sich einen Einblick in die Visualisierung von vollständig monotonen Funktionen zu verschaffen.

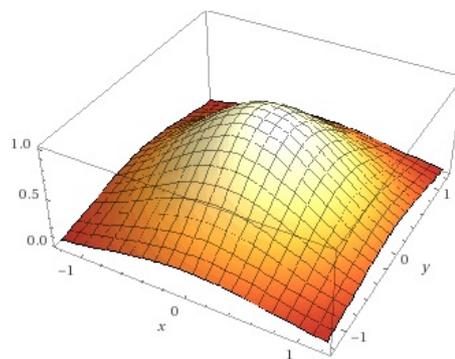


Abbildung 10: Gaussian mit $\varepsilon = 1$ („fundamentale“ VM-Funktion) [Programm: GaussianOberfläche.odt]

Man kann sich nun die Frage stellen, ob ein Zusammenhang zwischen vollständig monotonen Funktionen und positiv definiten Radialen Basisfunktionen existiert. Eine potentielle Antwort hierzu wäre das Finden einer Charakterisierung von vollständig monotonen Funktionen mit Hilfe eines Integrals.

Im Folgenden wird die Laplace-Transformation betrachtet, um mithilfe des Theorems von Hausdorff-Bernstein-Widder einen der zentralen Sätze dieses Kapitels beweisen zu können, nämlich den Satz von Schoenberg.

Sei f eine stückweise stetige Funktion, welche die Bedingung $|f(t)| \leq Me^{at}$ für die Konstanten a und M erfüllt. Dann ist die Laplace Transformation von f gegeben durch (vgl. [14]):

$$\mathcal{L}f(s) = \int_0^\infty f(t)e^{-st}dt, s > a.$$

Die Laplace Transformation eines Borel Maßes μ auf $[0, \infty)$ ist gegeben durch

$$\mathcal{L}\mu(s) = \int_0^\infty e^{-st}d\mu(t), s > a.$$

Die Laplacetransformation einer nichtnegativen Funktion $f \geq 0$ hat eine interessante Eigenschaft. Bildet man nur für reelle Werte $s \geq 0$ die Ableitungen, so ergibt sich:

$$\frac{d^k}{ds^k} \int_0^\infty f(t)e^{-st}dt = \int_0^\infty f(t)(-t)^k e^{-st}dt = (-1)^k \int_0^\infty f(t)t^k e^{-st}dt,$$

(wobei $f(t)t^k e^{-st} \geq 0$). Die Ableitungen sind also wechselweise positiv und negativ.

Mit Hilfe des folgenden Theorems 2.26 wird im Anschluss der Satz von Schoenberg bewiesen (vgl. [54], S.92):

Theorem 2.26 (Hausdorff-Bernstein-Widder)

Eine Funktion $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ ist vollständig monoton auf $[0, \infty)$ genau dann, wenn die Laplace Transformation eines endlichen, nicht negativen Borel Maßes μ auf $[0, \infty)$ der Form

$$\phi(r) = \mathcal{L}\mu(r) = \int_0^\infty e^{-rt} d\mu(t)$$

entspricht.

Beweis Siehe hierzu ([54], S.92). □

Durch dieses Theorem ist es nun ersichtlich, dass Gaussian als „fundamentale“ vollständig monotone Funktion betrachtet werden kann. Der Zusammenhang zwischen positiv definiten radialen und vollständig monotonen Funktionen wurde erstmals von Schoenberg im Jahre 1938 hervorgehoben (vgl. [56], S.9):

Theorem 2.27 (Schoenberg)

Ist $\psi(r) = \phi(\sqrt{r})$ vollständig monoton aber nicht konstant auf $[0, \infty)$, dann ist die $n \times n$ Matrix A mit den Einträgen $A_{ji} = \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|)$ für jede beliebige Menge von n eindeutigen Punkten $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n$ positiv definit und damit nichtsingulär.

Beweis (Vgl. [54], S.95):

Das Hausdorff-Bernstein-Widder Theorem impliziert

$$\phi(r) = \int_0^\infty e^{-rt} d\mu(t)$$

mit einem endlichen nichtnegativen Borel-Maß μ . Da nun $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2^2)$ gilt:

$$\Phi(\mathbf{x}) = \int_0^\infty e^{-\|\mathbf{x}\|^2 t} d\mu(t).$$

In Bezug auf die quadratische Form ergibt sich:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i c_j \phi(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i) = \int_0^\infty \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i c_j e^{-\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^2 t} d\mu(t).$$

Da die Gaußsche Familie positiv definit und radial auf \mathbb{R}^d für beliebige d ist, folgt, dass die quadratische Form nichtnegativ ist und deshalb ist ϕ positiv definit auf \mathbb{R}^d für beliebige d . Für die Rückrichtung des Beweises sei auf ([54], S.95) verwiesen. \square

Durch diese Bedingungen lässt sich die eindeutige Lösbarkeit der einfachen RBF-Methode für Gaussian, Inverse Quadratics und die Inverse Multiquadrics zeigen. Dabei gilt es zu zeigen, dass $\phi(\sqrt{r})$ vollständig monoton ist.

Da die ersten beiden Bedingungen der vollständigen Monotonie trivial sind, wird für diese Funktionen nur das Erfüllen der letzten Bedingung gezeigt (vgl. [56], S.9):

Gaussian:

$$\psi(r) = \phi(\sqrt{r}) = e^{-(\epsilon r)^2} \Rightarrow (-1)^l \psi^{(l)}(r) = \epsilon^{2l} e^{-\epsilon^2 r} > 0$$

Inverse Quadratics:

$$\psi(r) = \phi(\sqrt{r}) = \frac{1}{1+\epsilon^2 r} \Rightarrow (-1)^l \psi^{(l)}(r) = \frac{l! \epsilon^{2l}}{(1+\epsilon^2 r)^{l+1}} > 0$$

Inverse-Multiquadrics:

$$\psi(r) = \phi(\sqrt{r}) = \frac{1}{\sqrt{1+\epsilon^2 r}} \Rightarrow (-1)^l \psi^{(l)}(r) = \frac{\Gamma(l + \frac{1}{2}) \epsilon^{2l}}{\sqrt{\pi} (1 + \epsilon^2 r)^{l + \frac{1}{2}}} > 0,$$

wobei $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$ für $z \in \mathbb{C} : \text{Re}(z) > 0$.

Diese Aussagen kann man jedoch nicht für die Multiquadrics und die Linear Radiale Basisfunktion übertragen, da in beiden Fällen die Bedingungen $\phi(r) > 0$ und $\phi'(r) > 0$ nur für $r \geq 0$ erfüllt sind (vgl. [56], S.10). Jedoch kann durch eine Erweiterung des Satzes von Micchelli (vgl. [31], S.11–22) die eindeutige Lösbarkeit des Verfahrens für diese Funktionstypen gezeigt werden (vgl. [56], S.10):

Theorem 2.28 (Micchelli I)

Sei $\psi(r) = \phi(\sqrt{r}) \in C^0[0, \infty)$, $\psi(r) > 0$ und $\psi'(r)$ Vollständig Monoton aber nicht konstant auf $(0, \infty)$. Dann ist für eine beliebige Menge von n Punkten $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^n$ die $n \times n$ Matrix A mit den Einträgen $A_{ji} = \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|)$ nichtsingulär.

Die Multiquadrics und die Linear Radiale Basisfunktionen erfüllen demnach die Positivitäts- und Stetigkeitseigenschaft. Zusätzlich ist die erste Ableitung ihrer entsprechenden Funktion $\psi(r)$ vollständig monoton und nicht konstant auf $(0, \infty)$, denn es gilt für $r > 0$ und $\forall l \in \mathbb{N}$:

Multiquadrics:

$$\psi(r) = \phi(\sqrt{r}) = \sqrt{1 + \varepsilon^2 r} \Rightarrow (-1)^l \psi^{(l-1)}(r) = \frac{\Gamma(l - \frac{1}{2}) \varepsilon^{2l}}{2\sqrt{\pi}(1 + \varepsilon^2 r)^{l-\frac{1}{2}}} > 0$$

Linear:

$$\psi(r) = \phi(\sqrt{r}) = r^{\frac{1}{2}} \Rightarrow (-1)^l \psi^{(l-1)}(r) = \frac{\Gamma(l - \frac{1}{2})}{2\sqrt{\pi} r^{l-\frac{1}{2}}} > 0$$

wobei $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$ für $z \in \mathbb{C} : \text{Re}(z) > 0$.

Demnach ist die einfache RBF-Methode auch für die Multiquadrics und Linear Radiale Basisfunktionen eindeutig lösbar.

Zusammengefasst wurden Bedingungen für Radiale Basisfunktionen beschrieben, welche die Existenz der Koeffizienten zur Lösung des Interpolationsproblems liefern. Für die Interpolation verstreuter Daten werden häufig die Radialen Basisfunktionen Thin-Plate-Spline und Generalized Multiquadrics verwendet, welche allerdings nur bedingt positiv definit sind, weshalb es einen Anlass zu einer Verallgemeinerung der Charakterisierung der positiv definiten Funktionen und der Erweiterung der einfachen RBF-Methode eröffnet (siehe folgendes Kapitel 2.3).

2.3 Bedingt positiv definite Radiale Basisfunktionen und die erweiterte RBF-Methode

Im vorigen Abschnitt 2.2 wird mithilfe von Theorem 2.27 gezeigt, dass für positiv definite Radiale Basisfunktionen Φ in der einfachen RBF-Methode eine eindeutige Interpolation \mathcal{P}_f für eine gegebene Funktion f existiert. Offensichtlich sind jedoch nicht alle Radialen Basisfunktionen Φ positiv definit. Das Ziel in diesem Abschnitt 2.3 wird es nun sein Mengen von Radialen Basisfunktionen zu identifizieren, welche nicht zwingend positiv definite Funktionen enthalten, aber die Funktionen der Mengen trotzdem zur Verwendung der Interpolation verstreuter Daten genutzt werden können. Von besonderem Interesse wird, wie zuvor, die Konstruktion einer eindeutigen Interpolanten sein. Insgesamt wird in diesem Abschnitt eine Verallgemeinerung der einfachen RBF-Methode aus Definition 1.4 hergeleitet, welche als erweiterte RBF-Methode bezeichnet wird.

2.3.1 Motivation der erweiterten RBF-Methode

In diesem Abschnitt werden repräsentativ folgende, häufig verwendete, Radiale Basisfunktionen, welche nicht positiv definit sind, betrachtet (vgl. [15], Kapitel 9):

Definition 2.29 (Nicht positiv definite RBFs)

(a) Die Radiale Basisfunktion Generalized Multiquadrics (GMQ) ist definiert als

$$\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{\lceil \beta \rceil} (1 + \|\mathbf{x}\|_2^2)^\beta, \quad \beta > 0, \beta \notin \mathbb{N}.$$

(b) Die Radiale Basisfunktion Radial Powers (RP) ist definiert als

$$\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{\lceil \frac{\beta}{2} \rceil} \|\mathbf{x}\|^\beta, \quad \beta > 0, \beta \notin 2\mathbb{N}.$$

(c) Die Radiale Basisfunktion Thin Plate Spline (TPS) ist, mit $\beta \in \mathbb{N}_{>0}$, definiert als

$$\Phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} (-1)^{\beta+1} \|\mathbf{x}\|_2^{2\beta} \log \|\mathbf{x}\|_2, & \text{falls } \mathbf{x} \neq 0 \\ 0, & \text{falls } \mathbf{x} = 0 \end{cases}$$

Die in Definition 2.29 vorgestellten Radialen Basisfunktionen sind in folgender Abbildung 11 für verschiedene Parameter veranschaulicht.

Es lässt sich einfach zeigen, dass beispielsweise die Radialen Basisfunktionen $\Phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_2$ (Linear) und $\Phi(\mathbf{x}) = (1 + \epsilon^2 \|\mathbf{x}\|_2^2)^{\frac{1}{2}}$ (Multiquadrics mit $\epsilon > 0$) aus vorigem Abschnitt 2.2 nicht positiv definit sind. In Theorem 2.28 aus dem vorigen Abschnitt 2.2 wird jedoch gezeigt, dass sogar für die Radialen Basisfunktionen Linear und Multiquadrics in der einfachen RBF-Methode eine eindeutige Interpolation \mathcal{P}_f für eine gegebene Funktion f existiert. Dass

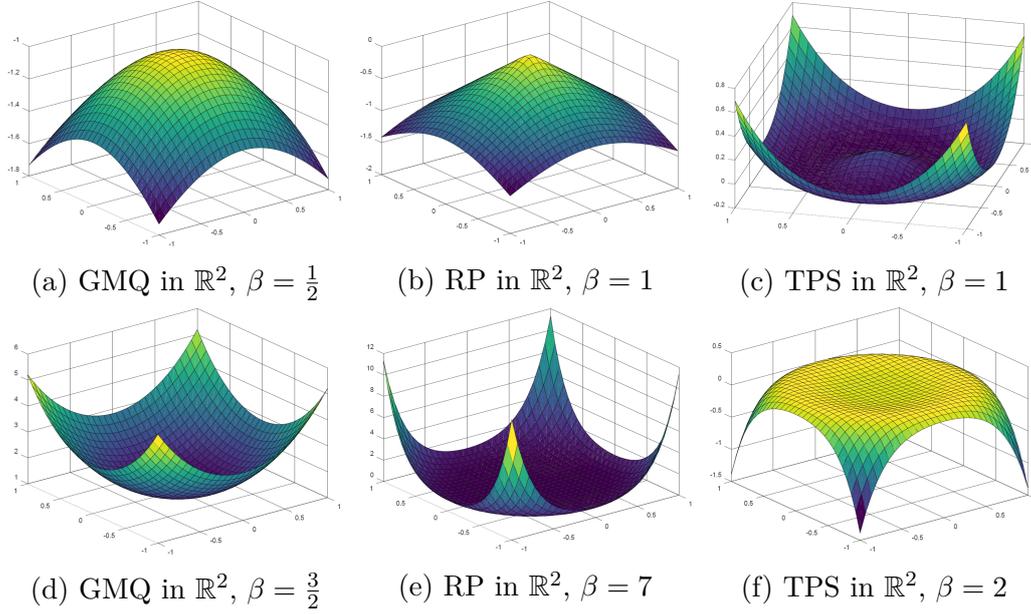


Abbildung 11: Beispiele bedingt positiv definiter Radialer Basisfunktionen [Programm: *BedingtPositivDefiniteRBFs.m*].

man sich allerdings für bestimmte Radiale Basisfunktionen, welche nicht positiv definit sind, triviale Mengen an Datenpunkten $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ konstruieren kann, sodass mittels der einfachen RBF-Methode keine eindeutige Interpolation \mathcal{P}_f für eine gegebene Funktion f gefunden wird, zeigt das folgende Theorem am Beispiel der Radialen Basisfunktion Thin Plate Spline (TPS) aus Definition 2.29(c).

Theorem 2.30 *Es sei eine beliebige Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und eine zugehörige Menge $\{y_1, \dots, y_n\} \subset \mathbb{R}$ an Datenwerten gegeben. Die Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \mid \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1\|_2 = 1 \forall i = 2, \dots, n\} \subset \mathbb{R}^d$ sei die Menge der Datenpunkte. Dann gilt: Zu der Radiale Basisfunktion Thin Plate Spline (TPS) aus Definition 2.29(c) existiert, mittels der einfachen RBF-Methode aus Definition 1.4, keine eindeutige Interpolation $\mathcal{P}_f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.*

Beweis Damit eine eindeutige Interpolation $\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2)$ mit der einfachen RBF-Methode aus Definition 1.4 existiert, muss das lineare Gleichungssystem $A\mathbf{c} = \mathbf{y}$ eindeutig lösbar sein (siehe Definition 1.4). Dabei ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, sodass $A := (\Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j))_{1 \leq i, j \leq n}$ und $\mathbf{y} := (y_i)_{1 \leq i \leq n}$ gilt. Aufgrund der Definition der Menge an Datenpunkten \mathcal{X} gilt für alle $i, j \in \{2, \dots, n\}$:

$$A_{1j} = \Phi(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_j) = (-1)^{\beta+1} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_j\|_2^{2\beta} \underbrace{\log \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_j\|_2}_{=1} = 0$$

$$A_{i1} = \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1) = (-1)^{\beta+1} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1\|_2^{2\beta} \underbrace{\log \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_1\|_2}_{=1} = 0$$

Zudem gilt: $A_{11} = \Phi(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1) = \Phi(0) = 0$ nach Definition 2.29(c). Also ist jede Komponente der ersten Zeile und Spalte identisch Null. Damit ist $\text{rang}(A) < n$ und somit das lineare Gleichungssystem $A\mathbf{c} = \mathbf{y}$ nicht eindeutig lösbar. \square

Da, wie in Theorem 2.30 beispielhaft gezeigt, die einfache RBF-Methode in vielen Fällen keine eindeutige Interpolation \mathcal{P}_f für eine gegebene Funktion f bezüglich nicht positiv definiten Radialer Basisfunktionen liefert, ist die Motivation groß eine andere RBF-Methode zu betrachten. Wünschenswert ist eine RBF-Methode, welche unter gewissen Voraussetzungen eine, unter anderem bezüglich Radialer Basisfunktionen aus Definition 2.29, eindeutige Interpolation \mathcal{P}_f für eine gegebene Funktion f liefert. Um eine neue RBF-Methode zu motivieren, wird im Folgenden an die kubische Spline-Interpolation aus Abschnitt 2.1.3 erinnert. Sei $\phi(x) = x^3$ für $x \in \mathbb{R}_+$. Dann gilt nach Proposition 2.9 aus Abschnitt 2.1.3: Es existiert ein Polynom $q \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ von

Grad 1 und $c_i \in \mathbb{R}$ für alle $i \in \{1, \dots, n\}$, sodass sich die Interpolante s (kubischer Spline) darstellen lässt als:

$$s(x) = \underbrace{\sum_{i=1}^n c_i \phi(|x - x_i|)}_{M_I} + q(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (9)$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{M_{II}}$$

Jeder natürliche kubische Spline s lässt sich demnach als die Summe einer Linearkombination von Radialen Basisfunktionen $\phi(|\cdot|)$ und einem Polynom q darstellen. Die Linearkombination von Radialen Basisfunktionen $\phi(|\cdot|)$ in (9) entspricht exakt der Form der einfachen RBF-Methode, welche in (9) und im Folgenden mit M_I abgekürzt wird. Eine Interpolante $\mathcal{P}_f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ als die Summe einer Linearkombination von Radialen Basisfunktionen und einem Polynom entspricht exakt der Form der weiter unten eingeführten erweiterten RBF-Methode, welche in (9) und im Folgenden mit M_{II} abgekürzt wird. Dies bedeutet, dass die kubische Spline-Interpolation, wie weiter unten genauer dargelegt ist, ein Spezialfall der erweiterten RBF-Methode darstellt.

Die Idee der erweiterten RBF-Methode ist es, die Darstellung aus Proposition 2.9 der kubischen Splines auf allgemeine Klassen von Radialen Basisfunktionen Φ und Polynomen q zu adaptieren. In Proposition 2.9 aus Abschnitt 2.1.3 ist die Dimension des Definitionsbereiches der Interpolante $s : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ eindimensional, das Polynom $q \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ von Grad 1 und die Radiale Basisfunktion von der Form $\Phi(x) := \phi(|x|) = |x|^3$. In der erweiterten RBF-Methode ist das Ziel die Konstruktion einer Interpolanten $\mathcal{P}_f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ als die Summe einer Linearkombination von Radialen Basisfunktionen und einem Polynom für allgemeine Dimension $d \in \mathbb{N}_{>0}$ des Definitionsbereiches der Interpolante $\mathcal{P}_f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, allgemeinem (totalem) Grad $\deg q \in \mathbb{N}_0$ von Polynom $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ und allgemeiner Radialer Basisfunktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$.

Dieser Abschnitt 2.3 wird die folgende Frage beantworten: Unter welchen Umständen ist die Existenz und Eindeutigkeit einer Interpolation mit der erweiterten RBF-Methode gesichert? Es sei bereits jetzt schon erwähnt, dass die Form der Menge der Datenpunkte \mathcal{X} in der erweiterten RBF-Methode für die Eindeutigkeit der Interpolation \mathcal{P}_f eine entscheidende Rolle spielt. Man beachte, dass die Form der Menge der Datenpunkte in der einfachen RBF-Methode bezüglich positiv definiten Radialen Basisfunktionen in Abschnitt 2.2 keine Rolle für die Eindeutigkeit der Interpolation \mathcal{P}_f spielt. Die Existenz und Eindeutigkeit einer Interpolation mit der erweiterten RBF-Methode wird vom Zusammenspiel von d , $\deg q$, \mathcal{X} und Φ abhängen.

2.3.2 Die erweiterte RBF-Methode

Da in der erweiterten RBF-Methode, wie weiter oben bereits angedeutet, ein Polynom Bestandteil der Interpolante ist und sich diese Arbeit nicht auf univariate Interpolation beschränkt, wird im Folgenden die Definition multivariater Polynome gegeben (vgl. [16], S.194 ff.).

Definition 2.31 (Polynome in mehreren Veränderlichen)

Ein multivariates Polynom $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{K}$, mit $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$, ist definiert als

$$q(X_1, \dots, X_d) = \sum_{(k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{N}^d} a_{k_1, \dots, k_d} \cdot X_1^{k_1} \cdot \dots \cdot X_d^{k_d},$$

wobei $(X_1, \dots, X_d) \in \mathbb{R}^d$ und nur höchstens endlich viele Koeffizienten $a_{k_1, \dots, k_d} \in \mathbb{K}$, mit Multiindex k_1, \dots, k_d , von Null verschieden sind. Dabei ist $\deg q := \max\{k_1 + \dots + k_d \mid a_{k_1, \dots, k_d} \neq 0 \wedge (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{N}^d\}$ als der (totale) Grad des multivariaten Polynoms q benannt.

Man bezeichnet $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ als komplexwertiges Polynom, $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

als reellwertiges Polynom und $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ als den Raum aller reellwertigen d -variater Polynome mit (totalem) Grad $m - 1$.

Beispiel 2.32

Für das Polynom $q : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ mit $q(X_1, X_2) := X_1^2 \cdot X_2^3 + 2 \cdot X_1^4 \cdot X_2^5$, gilt:

$$\deg q = \max\{2 + 3, 4 + 5\} = 9 \Rightarrow q \in \mathcal{P}_9(\mathbb{R}^2).$$

Nach der formal erforderlichen Definition 2.31 über multivariate Polynome, wird sich im Folgenden erneut, aber nun genauer, mit der Motivation der erweiterten RBF Methode über die kubische Spline-Interpolation aus Proposition 2.9 beschäftigt. Die Proposition 2.9 aus Abschnitt 2.1.3 besagt, dass sich jeder natürliche kubische Spline $s : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ als

$$s(x) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|x - x_i\|_2) + q(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (10)$$

darstellen lässt. Dabei ist $\phi(x) = x^3$ für $x \in \mathbb{R}_+$, $q \in \mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ ein Polynom von Grad 1 und $\tilde{\mathcal{X}} = \{x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}\}$. Die Koeffizienten c_i müssen die Bedingung $\sum_{i=1}^n c_i = \sum_{i=1}^n c_i x_i = 0$ erfüllen.

Um nun einzusehen, dass man die kubische Spline-Interpolation als Motivation für die weiter unten eingeführte erweiterte RBF-Methode betrachten kann, beachte man folgende Tatsache. Die Menge $\{x^0, x^1\}$ stellt eine Basis von $\mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ dar. Man definiere die zwei Basiselemente als $p_1(x) := x^0$ und $p_2(x) := x^1$. Aus diesem Grund ist die Bedingung $\sum_{i=1}^n c_i = \sum_{i=1}^n c_i x_i = 0$ an die Koeffizienten c_i aus Proposition 2.9 äquivalent zu:

$$\sum_{i=1}^n c_i x_i^0 = \sum_{i=1}^n c_i x_i^1 = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^n c_i p_k(x_i) = 0 \text{ für alle } k \in \{1, 2\} \quad (11)$$

Sei $m \in \mathbb{N}$ und $M \in \mathbb{N}$. In der erweiterten RBF-Methode soll eine Interpolante $\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) := \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2) + q(\mathbf{x})$ zu gegebenen Datenpunkten

$\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ und Datenwerten $\{y_1, \dots, y_n\}$, wie in (10), gefunden werden. Dabei ist $q \in \mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ und $\{p_1, \dots, p_M\}$ sei eine Basis von $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$. Zudem muss in der erweiterten RBF-Methode, wie in (11), $\sum_{i=1}^n c_i p_k(\mathbf{x}_i) = 0$ für alle $k \in \{1, \dots, M\}$ gelten. Die erweiterte RBF-Methode legt sich allerdings nicht, im Gegensatz zur kubischen Spline-Interpolation in (10), auf die Radiale Basisfunktion $\Phi(x) := \phi(|x|) = |x|^3$, auf $\deg q = m - 1 = 1$, auf Dimension des Definitionsbereiches der Interpolanten $d = 1$ und auf die daraus resultierende Dimension $M = 2$ von $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d) = \mathcal{P}_1(\mathbb{R}^1)$ fest.

Nach einer relativ langen Motivation ist die erweiterte RBF-Methode in der folgenden Definition 2.33 formuliert (vgl. [8], S.39).

Definition 2.33 (Erweiterte RBF-Methode)

Sei $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \subset \mathbb{R}^d$ eine Menge paarweise verschiedener Datenpunkte und $\{y_1, \dots, y_n\} \subset \mathbb{R}$ die zugehörigen reellen Datenwerte. Die Interpolation mittels der erweiterten RBF-Methode ist definiert als

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2) + \underbrace{\sum_{k=1}^M \gamma_k p_k(\mathbf{x})}_{q(\mathbf{x}) :=}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d,$$

wobei $\phi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetige Funktion, $c_i \in \mathbb{R}$, $\gamma_i \in \mathbb{R}$, $m \in \mathbb{N}$, $M \in \mathbb{N}$ und $\{p_1, \dots, p_M\}$ eine Basis von $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ ist.

Die Koeffizienten c_1, \dots, c_n müssen die Bedingung $\sum_{i=1}^n c_i p_k(\mathbf{x}_i) = 0$ für alle $k \in \{1, \dots, M\}$ erfüllen.

Zudem gilt: $\mathcal{P}_f(\mathbf{x}_i) = y_i$ für alle $i \in \{1, \dots, n\}$.

Die Festlegung auf einen Polynomraum $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ legt $m \in \mathbb{N}$ und $M \in \mathbb{N}$ eindeutig fest. Um die Interpolante \mathcal{P}_f aus Definition 2.33 zu bestimmen, müssen die Koeffizienten c_1, \dots, c_n und $\gamma_1, \dots, \gamma_M$ berechnet werden. Diese Berechnung der Koeffizienten kann, wie man leicht direkt aus der Definition

2.33 nachvollzieht, durch die Lösung des folgenden linearen Gleichungssystems, mit $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$, erfolgen:

$$\begin{pmatrix} \Phi(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1) & \dots & \Phi(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_n) & p_1(\mathbf{x}_1) & \dots & p_M(\mathbf{x}_1) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Phi(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1) & \dots & \Phi(\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_n) & p_1(\mathbf{x}_n) & \dots & p_M(\mathbf{x}_n) \\ p_1(\mathbf{x}_1) & \dots & p_1(\mathbf{x}_n) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ p_M(\mathbf{x}_1) & \dots & p_M(\mathbf{x}_n) & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Damit im Folgenden die Notation vereinfacht dargestellt ist, definiere man $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $P \in \mathbb{R}^{n \times M}$, sodass:

$$A := (\Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j))_{1 \leq i, j \leq n} \text{ und } P := (p_k(\mathbf{x}_l))_{1 \leq l \leq n, 1 \leq k \leq M}$$

Zudem definiere man $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{\gamma} \in \mathbb{R}^M$, sodass:

$$\mathbf{c} := (c_i)_{1 \leq i \leq n}, \mathbf{y} := (y_i)_{1 \leq i \leq n} \text{ und } \boldsymbol{\gamma} := (\gamma_k)_{1 \leq k \leq M}$$

Das obige lineare Gleichungssystem zur Ermittlung der Interpolation \mathcal{P}_f in der erweiterten RBF-Methode aus (12) stellt sich somit wie folgt dar (vgl. [8], S.39):

$$\begin{pmatrix} A & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ \boldsymbol{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (13)$$

Um nochmals zu verdeutlichen, dass die kubische Spline-Interpolation als Spezialfall der erweiterten RBF-Methode angesehen werden kann, betrachte man folgendes Beispiel.

Beispiel 2.34

Man betrachte das identische Interpolationsproblem wie in Beispiel 2.6 aus Abschnitt 2.1. Es ist eine Interpolante $\mathcal{P}_f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ zur Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = \exp(x)$ gesucht. Die Datenpunkte $\mathcal{X} = \{\frac{0}{10}, \frac{1}{10}, \dots, \frac{9}{10}, \frac{10}{10}\}$ und die Datenwerte $\{\exp(\frac{0}{10}), \exp(\frac{1}{10}), \dots, \exp(\frac{9}{10}), \exp(\frac{10}{10})\}$ werden zur Interpolation betrachtet. In diesem Beispiel wird die Interpolation allerdings mit der erweiterten RBF-Methode durchgeführt, anstatt, wie in Beispiel 2.6, mit einer kubischen Spline-Interpolation. Die Radiale Basisfunktion in der erweiterten RBF-Methode sei $\Phi(x) := \phi(|x|) = |x|^3$ und der (totale) Grad der Polynome des betrachteten Polynomraumes $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R})$ sei $m - 1 = 1$. In diesem Fall ist, unabhängig von der gewählten Funktion f , durch den Vergleich von Proposition 2.9 und Definition 2.33 klar, dass die Interpolation s als kubischer Spline aus Beispiel 2.6 mit der Interpolation mittels der erweiterten RBF-Methode aus diesem Beispiel auf dem Intervall $[0, 1]$ übereinstimmen muss. Dennoch, beziehungsweise gerade aus diesem Grund, wird dieses Beispiel mit der erweiterten RBF-Methode im Folgenden vorgestellt.

Das lineare Gleichungssystem (12) zur Berechnung der Koeffizienten in der erweiterten RBF-Methode stellt sich in diesem Beispiel wie folgt dar:

$$\begin{pmatrix} \Phi(0) & \Phi(-0.1) & \dots & \Phi(-1) & p_1(0) & p_2(0) \\ \Phi(0.1) & \Phi(0) & \dots & \Phi(-0.9) & p_1(0.1) & p_2(0.1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Phi(1) & \Phi(0.9) & \dots & \Phi(0) & p_1(1) & p_2(1) \\ p_1(0) & p_1(0.1) & \dots & p_1(1) & 0 & 0 \\ p_2(0) & p_2(0.1) & \dots & p_2(1) & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{11} \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{11} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Mit dem Einsetzen von $\Phi(x) := \phi(|x|) = |x|^3$, $p_1(x) = x^0$, $p_2(x) = x^1$ und $y_i = \exp(x_i)$ für alle $i \in \{1, \dots, 11\}$ stellt sich das lineare Gleichungssystem aus (14) wie folgt dar:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0.001 & \dots & 1 & 1 & 0 \\ 0.001 & 0 & \dots & 0.729 & 1 & 0.1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0.729 & \dots & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.1 & \dots & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{11} \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(0) \\ \exp(0.1) \\ \vdots \\ \exp(1) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wurde dieses Beispiel in *Octave* berechnet [Programm: *PlotPf.m* und *Fehler.m*], sodass mithilfe des linearen Gleichungssystems (15) die Interpolante \mathcal{P}_f und der Interpolationsfehler $|\mathcal{P}_f(x) - f(x)|$ bestimmt wird. Die Interpolation \mathcal{P}_f und der Interpolationsfehler $|\mathcal{P}_f(x) - f(x)|$ sind in folgender Abbildung 12 dargestellt.

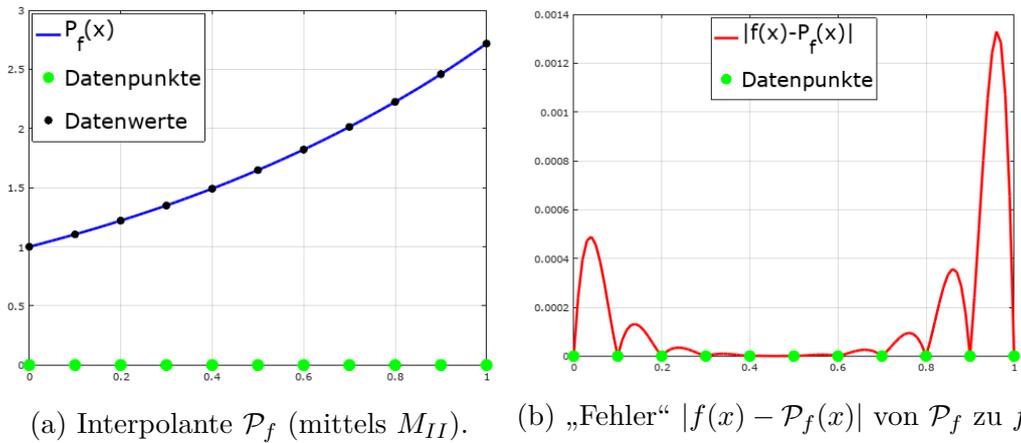


Abbildung 12: Die Interpolante \mathcal{P}_f zur Funktion $f(x) = \exp(x)$ und der „Fehler“ $|f(x) - \mathcal{P}_f(x)|$ der Interpolation. Die Menge $\mathcal{X} = \{\frac{0}{10}, \frac{1}{10}, \dots, \frac{9}{10}, \frac{10}{10}\}$ ist die Menge der Datenpunkte und $\{\exp(\frac{0}{10}), \exp(\frac{1}{10}), \dots, \exp(\frac{9}{10}), \exp(\frac{10}{10})\}$ ist die Menge der Datenwerte. Die Interpolation ist mittels der erweiterten RBF-Methode (M_{II}) bezüglich des Polynomraumes $\mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ durchgeführt [Programm: *PlotPf.m* und *Fehler.m*].

Beim Vergleich von Abbildung 8 aus Beispiel 2.6 mit Abbildung 12 wird nun auch anhand dieses praktischen Beispiels ersichtlich, dass die Interpolation s aus Beispiel 2.6 mittels der kubischen Splines-Interpolation mit der Interpolation \mathcal{P}_f aus diesem Beispiel auf dem Intervall $[0, 1]$ identisch ist. Dass die Gleichheit der Interpolationen mit den Annahmen aus diesem Beispiel 2.34 gelten muss, wird, wie weiter oben bereits erwähnt, mit Vergleich von Proposition 2.9 und Definition 2.33 klar.

Bei der Betrachtung des linearen Gleichungssystems (13) stellt sich noch eine bedeutende Frage: Wann ist das lineare Gleichungssystem eindeutig lösbar und liefert damit eine eindeutige Interpolante \mathcal{P}_f ? Um die Frage der eindeutigen Lösbarkeit von (13) nachzugehen wird folgendes, in diesem gesamten Abschnitt 2.3 wichtigste, Theorem 2.35 betrachtet (vgl. [54], S.117):

Theorem 2.35 (Eindeutiges \mathcal{P}_f der erweiterten RBF-Methode)

Sei $m \in \mathbb{N}_0$ und $d \in \mathbb{N}_{>0}$. Eine Radiale Basisfunktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ sei bedingt positiv definit von Ordnung m in \mathbb{R}^d und $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \subseteq \mathbb{R}^d$ sei eine $(m - 1)$ -unisolvante Menge von Datenpunkten. Dann gilt:

Das lineare Gleichungssystem (13)

$$\begin{pmatrix} A & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ \boldsymbol{\gamma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

ist eindeutig lösbar.

Bemerkung 2.36

Die Existenz einer Interpolante in der erweiterten RBF-Methode, und damit einer Lösung von (13), ist, wie in Theorem 2.11 gesehen, für jede Menge an paarweise verschiedenen Datenpunkten $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ gesichert. Die Forderung $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ aus vorigem Theorem 2.35 ist nur für die Eindeutigkeit und nicht für die Existenz der Lösung $(\mathbf{c}, \boldsymbol{\gamma})^T$ von (13) erforderlich (vgl. [54], S.117).

Das Theorem 2.35 liefert nun also eine hinreichende Bedingung für die eindeutige Lösbarkeit der erweiterten RBF-Methode. Falls eine Radiale Basisfunktion nun also in einer gewissen Weise bedingt positiv definit ist und die Menge der Datenpunkte in einer gewissen Weise eine unisolvente Menge bilden, liefert die erweiterte RBF-Methode eine eindeutige Interpolante.

Im nächsten Abschnitt 2.3.3 wird sich mit dem Begriff der bedingten positiven Definitheit und im darauf folgenden Abschnitt 2.3.4 mit dem Begriff der unisolventen Menge beschäftigt, damit die Bedeutung von Theorem 2.35 klar wird.

2.3.3 Bedingt positiv definite Radiale Basisfunktionen

Da das Interesse an einer eindeutigen Interpolation in der erweiterten RBF-Methode sehr groß ist, ist das Theorem 2.35 von großer Bedeutung. In dem Theorem 2.35 wird das Konzept der bedingten positiven Definitheit benutzt. Aus diesem Grund wird sich in diesem Abschnitt 2.3.3 zunächst grundlegend mit dem Begriff der bedingten positiven Definitheit beschäftigt. Anschließend wird sich in Unterabschnitt 2.3.3.1 mit, für den Kontext dieser Arbeit, interessanten Eigenschaften von bedingt positiv definiten Funktionen beschäftigt und in Unterabschnitt 2.3.3.2 ein praktisch relativ leicht umzusetzendes Kriterium zur Identifizierung bedingt positiv definiter Radialer Basisfunktionen vorgestellt.

Die Definition von bedingt positiv (semi)definiten Funktionen ist wie folgt gegeben (vgl. [15], Kapitel 7):

Definition 2.37 (Bedingt positiv (semi)definite Funktionen)

(a) Eine stetige Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ heißt bedingt positiv semidefinit von Ordnung $m \in \mathbb{N}$ in \mathbb{R}^d , falls

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \geq 0 \quad (16)$$

für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{C}^N$, sodass

$$\sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0 \quad (17)$$

für alle Polynome $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ mit (totalem) Grad $\deg q \leq m - 1$, gilt.

(b) Eine stetige Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ heißt bedingt positiv definit von Ordnung $m \in \mathbb{N}$ in \mathbb{R}^d , falls

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) > 0$$

für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$, sodass

$$\sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0$$

für alle Polynome $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ mit (totalem) Grad $\deg q \leq m - 1$, gilt.

Aufgrund Theorem 2.35 liegt das Interesse der Untersuchung von bedingter positiver Definitheit in dieser Arbeit ausschließlich auf Radialen Basis-

funktionen. Radiale Basisfunktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$ sind nach Definition reellwertige und gerade Funktionen. Das folgende Theorem 2.38 besagt, dass sich die Definition von bedingt positiv (semi)definiten Funktionen auf reelle Koeffizienten und Polynome reduziert, wenn die Funktion reellwertig und gerade ist (vgl. [15] Kapitel 7).

Theorem 2.38 (Bedingt positiv (semi)definite RBFs)

(a) Eine stetige, gerade Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ist bedingt positiv semi-definit von Ordnung $m \in \mathbb{N}$ in \mathbb{R}^d , genau dann wenn

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i c_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \geq 0$$

für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{R}^N$, sodass

$$\sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0$$

für alle Polynome $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit (totalem) Grad $\deg q \leq m - 1$, gilt.

(b) Eine stetige, gerade Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ ist bedingt positiv definit von Ordnung $m \in \mathbb{N}$ in \mathbb{R}^d , genau dann wenn

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i c_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) > 0$$

für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$, sodass

$$\sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0$$

für alle Polynome $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit (totalem) Grad $\deg q \leq m - 1$, gilt.

Um die Begrifflichkeiten klar voneinander abzugrenzen sei folgende Definition gegeben (vgl. [27], S.6):

Definition 2.39 (Klassen der positiven Definitheit)

- (a) Die Menge $\text{bpsd}(m, d)$ sei die Menge aller bedingt positiv semidefiniten Funktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ von Ordnung m in \mathbb{R}^d .
- (b) Die Menge $\text{bpd}(m, d)$ sei die Menge aller bedingt positiv definiten Funktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ von Ordnung m in \mathbb{R}^d .
- (c) Die Menge $\text{psd}(d)$ sei die Menge aller positiv semidefiniten Funktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$.
- (d) Die Menge $\text{pd}(d)$ sei die Menge aller positiv definiten Funktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$.

2.3.3.1 Eigenschaften bedingt positiv definiter RBFs

Damit der Zusammenhang der bedingten positiven Definitheit und der positiven Definitheit ersichtlich und damit die Namensgebung bedingt positiv definiter Funktionen plausibel wird, betrachte man folgendes Theorem:

Theorem 2.40 (Die Mengen $bpd(m, d)$ vs. $pd(d)$)

Die Definition einer bedingt positiv (semi)definiten Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ der Ordnung $m = 0$, ist äquivalent zur Definition einer positiv (semi)definiten Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$.

Beweis

\Rightarrow : Man betrachte die bedingt positiv semidefinite Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ der Ordnung $m = 0$. Nach Definition 2.37 gilt Folgendes:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \geq 0 \quad (18)$$

für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{C}^N$, sodass

$$\sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0 \text{ für alle Polynome } q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C} \text{ mit } \deg q \leq -1. \quad (19)$$

Da es nach Definition 2.31 keine Polynome $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ mit (totalem) Grad $\deg q \leq -1$ gibt, ist (19) äquivalent zu:

$$\sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0 \text{ für alle Polynome } q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C} \text{ mit } q \in \emptyset. \quad (20)$$

Weil jede Aussage über alle Elemente der leeren Menge wahr ist, gilt (20) für alle Koeffizienten $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{C}^N$ und alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$.

Insgesamt gilt deshalb (18) für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und für alle $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{C}^N$. Dies entspricht der Definition der positiven Semidefinitheit von Funktion Φ .

\Leftarrow : Man betrachte die positiv semidefinite Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$. Für die Funktion Φ gilt, wegen der positiven Semidefinitheit, (16) aus Defini-

tion 2.37 für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und für alle $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{C}^N$. Demnach gilt (16) ebenfalls für alle paarweise verschiedenen $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ und für alle $(c_1, \dots, c_N)^T \in \mathbb{C}^N$, welche (17) aus Definition 2.37 für alle Polynome $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ mit $\deg q \leq -1$ erfüllen. Damit ist die Funktion Φ bedingt positiv semidefinit von Ordnung $m = 0$.

Mit Hinzunahme der Definition 2.37(b) und der Definition der positiven Definitheit zu obigen Beweis, folgt unmittelbar die Äquivalenz der Definitionen für bedingt positiv definite Funktionen von Ordnung $m = 0$ und positiv definite Funktionen. \square

Dementsprechend ist nach Theorem 2.40 die bedingte positive Definitheit eine Verallgemeinerung der positiven Definitheit.

Bei Ordnung m der Radialen Basisfunktion Φ in Theorem 2.35 muss die Menge an Datenpunkten $(m - 1)$ -unisolvant sein, damit eine eindeutige Interpolante \mathcal{P}_f in der erweiterten RBF-Methode generiert wird. Aus diesem Grund ist die Bedeutung der Ordnung m von bedingt positiv definiten Radialen Basisfunktionen wichtig, weil diese in Theorem 2.35 somit einen Einfluss auf die Restriktion der Menge an Datenpunkten hat. Deshalb wird sich in folgendem Theorem 2.41 mit der Rolle der Ordnung von bedingt positiv (semi)definiten Funktionen beschäftigt (vgl. [8], S.40).

Theorem 2.41 (Ordnung bedingt positiv definiten Funktionen)

Sei $m, l \in \mathbb{N}$. Eine bedingt positiv (semi)definite Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ von Ordnung m in \mathbb{R}^d , ist ebenfalls bedingt positiv (semi)definit von Ordnung $l \geq m$ in \mathbb{R}^d .

Beweis Seien $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^d$ paarweise verschieden und beliebig, $l \geq m$ und $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ ein Polynom.

Dann gilt:

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{c} \in \mathbb{C}^N : \sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0, \forall q \text{ mit } \deg q \leq l-1 \\ \Rightarrow \sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0, \forall q \text{ mit } \deg q \leq m-1. \end{aligned} \quad (21)$$

Mit Definition von $\mathcal{Z}_l := \{\mathbf{c} \in \mathbb{C}^N \mid \sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0 \wedge \deg q \leq l-1\}$ und $\mathcal{Z}_m := \{\mathbf{c} \in \mathbb{C}^N \mid \sum_{i=1}^N c_i q(\mathbf{x}_i) = 0 \wedge \deg q \leq m-1\}$, gilt mit (21):

$$\mathcal{Z}_l \subseteq \mathcal{Z}_m. \quad (22)$$

Sei die Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ bedingt positiv semidefinit von Ordnung m . Dann gilt nach Definition 2.37(a) und Definition von \mathcal{Z}_m :

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \geq 0 \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{Z}_m. \quad (23)$$

Aufgrund von (22) folgt aus (23):

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \geq 0 \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{Z}_l. \quad (24)$$

Die Ungleichungen aus (24) entsprechen der Definition 2.37(a) der bedingten positiven Semidefinitheit. Aus diesem Grund ist die Funktion Φ bedingt positiv semidefinit von Ordnung l .

Dass eine bedingt positiv definite Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ von Ordnung m ebenfalls bedingt positiv definit von Ordnung l ist, zeigt man analog. Es muss dafür anstatt (23) Folgendes betrachtet werden:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) > 0 \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{Z}_m \setminus \{0\}.$$

Zudem muss anstatt (24) Folgendes betrachtet werden:

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_i \bar{c}_j \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) > 0 \quad \forall \mathbf{c} \in \mathcal{Z}_l \setminus \{0\}. \quad \square$$

Eine direkte Folgerung aus den Theoremen 2.40 und 2.41 ist, dass jede positiv (semi)definite Funktion bedingt positiv (semi)definit von beliebiger Ordnung ist. Außerdem wird durch Theorem 2.41 klar, dass ausschließlich Interesse an der Ermittlung der kleinsten Ordnung, für welche eine Funktion bedingt positiv (semi)definit ist, besteht. Insgesamt gelten folgende Teilmengenbeziehungen, welche in (25) und (26) festgehalten sind.

$$psd(d) = bpsd(0, d) \subseteq bpsd(1, d) \subseteq \dots \subseteq bpsd(m, d) \quad (25)$$

$$pd(d) = bpd(0, d) \subseteq bpd(1, d) \subseteq \dots \subseteq bpd(m, d) \quad (26)$$

Die Teilmengenbeziehungen aus (25) und (26) sind beispielhaft in Abbildung 13 als Venn-Diagramm dargestellt.

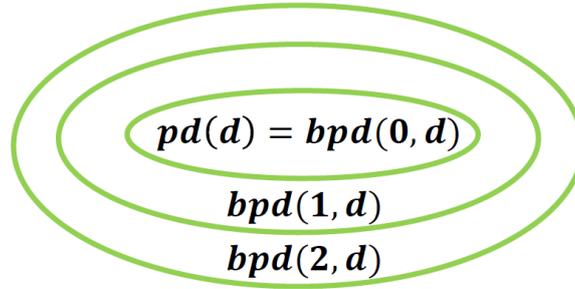


Abbildung 13: Eine Veranschaulichung der Teilmengenbeziehung als Venn-Diagramm von bedingt positiv definiten Funktionenklassen für $m \in \{0, 1, 2\}$ und $d \in \mathbb{N}_{>0}$.

Zudem gilt Folgendes (vgl. [8], S.40):

Theorem 2.42 (Rolle der Dimension des Definitionsbereiches)

Sei $m, k \in \mathbb{N}$. Eine bedingt positiv (semi)definite Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}$ von Ordnung m in \mathbb{R}^d , ist ebenfalls bedingt positiv (semi)definit von Ordnung m in \mathbb{R}^k mit $k \leq d$.

Aus Theorem 2.42 ergeben sich unmittelbar folgende Teilmengenbeziehungen, welche in (27) und (28) festgehalten sind.

$$bpsd(m, d+1) \subseteq bpsd(m, d) \subseteq \dots \subseteq bpsd(m, 1) \quad (27)$$

$$bpd(m, d+1) \subseteq bpd(m, d) \subseteq \dots \subseteq bpd(m, 1) \quad (28)$$

Die Teilmengenbeziehungen aus (27) und (28) sind beispielhaft in Abbildung 14 als Venn-Diagramm dargestellt.

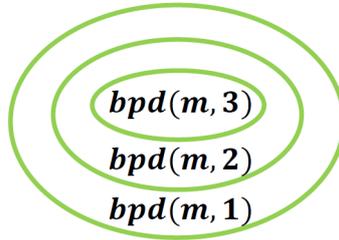


Abbildung 14: Eine Veranschaulichung der Teilmengenbeziehung als Venn-Diagramm von bedingt positiv definiten Funktionenklassen für $d \in \{1, 2, 3\}$ und $m \in \mathbb{N}$.

2.3.3.2 Identifizierung über vollständige Monotonie

Um bedingt positiv definite Radiale Basisfunktionen von Ordnung m zu identifizieren kann man, wie im positiv definiten Fall, eine Charakterisierung über die Verallgemeinerte Fouriertransformation oder eine Verbindung zwischen Vollständiger Monotonie und bedingt positiv definiten Radialen Basisfunktionen nutzen. Da die Nutzung der Verallgemeinerten Fouriertransformation

zur Verifizierung der bedingten positiven Definitheit im Allgemeinen deutlich aufwendiger ist und die Identifizierung der bedingten positiven Definitheit über die vollständige Monotonie beispielsweise für die repräsentativen Radialen Basisfunktionen aus Definition 2.29 funktioniert, wird sich auf den Ansatz der Vollständigen Monotonie beschränkt (vgl. [15], Kapitel 9).

Das folgende Theorem 2.43 ist ein, in vielen Fällen, „leicht“ zu handhabendes Werkzeug, um die bedingt positive Definitheit von Ordnung m in \mathbb{R}^d einer gegebenen Radialen Basisfunktion festzustellen (vgl. [54], S.113 ff. und [15], Kapitel 9).

Theorem 2.43 (Satz von Micchelli II)

Sei $\varphi \in C[0, \infty) \cap C^\infty(0, \infty)$, die Funktion $(-1)^m \varphi^{(m)}$ sei vollständig monoton auf $(0, \infty)$ und φ kein Polynom von höchstens Grad m .

Dann gilt: Die Funktion $\Phi := \varphi(\|\cdot\|_2^2)$ ist bedingt positiv definit von Ordnung $m \in \mathbb{N}_0$ in \mathbb{R}^d für alle $d \in \mathbb{N}_{>0}$ und radial.

In folgendem Theorem 2.44 wird das Theorem 2.43 am Beispiel der Funktion Generalized Multiquadrics angewandt (vgl. [15], Kapitel 9).

Theorem 2.44 (Bedingte positive Definitheit von GMQ)

Die Funktion Generalized Multiquadrics (GMQ)

$$\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{\lceil \beta \rceil} (1 + \|\mathbf{x}\|_2^2)^\beta, \quad \beta > 0, \beta \notin \mathbb{N},$$

ist bedingt positiv definit von Ordnung $m \geq \lceil \beta \rceil$ in \mathbb{R}^d für alle $d \in \mathbb{N}_{>0}$ und radial.

Beweis Man betrachte $\varphi(r) := (-1)^{\lceil\beta\rceil}(1+r)^\beta$, $0 < \beta \notin \mathbb{N}$. Um Theorem 2.43 für $m = \lceil\beta\rceil$ anzuwenden zeige man im Folgenden, dass $\psi(r) := (-1)^{\lceil\beta\rceil}\varphi(r)^{(\lceil\beta\rceil)}$ vollständig monoton auf $(0, \infty)$ ist. Es gilt:

$$\psi(r) := (-1)^{\lceil\beta\rceil}\varphi(r)^{(\lceil\beta\rceil)} = \beta(\beta-1) \cdot \dots \cdot (\beta - \lceil\beta\rceil + 1)(1+r)^{\beta-\lceil\beta\rceil}. \quad (29)$$

Sei $l \in \mathbb{N}_0$ beliebig. Mit Betrachtung von (29) gilt:

$$\begin{aligned} & (-1)^l \psi(r)^{(l)} = \\ & (-1)^l \prod_{i=1}^{\lceil\beta\rceil} \underbrace{(\beta - i + 1)}_{>0} \prod_{k=1}^l \underbrace{(\beta - \lceil\beta\rceil - k + 1)}_{<0} \underbrace{(1+r)^{\beta-\lceil\beta\rceil-l}}_{>0}. \end{aligned} \quad (30)$$

Für gerades und ungerades $l \in \mathbb{N}_0$ gilt:

$$(-1)^l \prod_{k=1}^l \underbrace{(\beta - \lceil\beta\rceil - k + 1)}_{<0} > 0. \quad (31)$$

Aufgrund von (30) und (31) gilt:

$$(-1)^l \psi(r)^{(l)} > 0 \quad \forall l \in \mathbb{N}_0. \quad (32)$$

Die Ungleichungen aus (32) liefern, mit Definition 2.23 aus Abschnitt 2.2, die vollständige Monotonie auf $(0, \infty)$ von $\psi(r) := (-1)^{\lceil\beta\rceil}\varphi(r)^{(\lceil\beta\rceil)}$.

Da $\beta \notin \mathbb{N}$, ist φ kein Polynom. Außerdem ist $\varphi \in C[0, \infty) \cap C^\infty(0, \infty)$. Insgesamt gilt mit Theorem 2.43: Die Funktion

$$\Phi = \varphi(\|\cdot\|_2^2) = (-1)^{\lceil\beta\rceil}(1 + \|\cdot\|_2^2)^\beta, \quad 0 < \beta \notin \mathbb{N}$$

ist bedingt positiv definit von Ordnung $\lceil\beta\rceil$ und radial in \mathbb{R}^d für alle $d \in \mathbb{N}_{>0}$.

Mit Theorem 2.41 folgt die Aussage. \square

Bemerkung 2.45

Es kann sogar gezeigt werden, dass $m = \lceil \beta \rceil$ das kleinst mögliche m ist, sodass $(-1)^m \varphi^{(m)}$ aus dem Beweis von Theorem 2.44 vollständig monoton ist (vgl. [15], Kapitel 9).

Auf analoge Weise kann man, wie im folgenden Theorem 2.46 festgehalten, für die übrigen repräsentativen Radialen Basisfunktionen aus Definition 2.29 die bedingte positive Definitheit nachweisen (vgl. [15], Kapitel 9).

Theorem 2.46 (Weitere Anwendung von Theorem 2.43)

(a) Die Funktion Radial Powers (RP)

$$\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{\lceil \frac{\beta}{2} \rceil} \|\mathbf{x}\|^\beta, \quad \beta > 0, \beta \notin 2\mathbb{N},$$

ist bedingt positiv definit von Ordnung $m \geq \lceil \frac{\beta}{2} \rceil$ in \mathbb{R}^d für alle $d \in \mathbb{N}_{>0}$ und radial.

(b) Die Funktion Thin Plate Spline (TPS)

$$\Phi(\mathbf{x}) = \begin{cases} (-1)^{\beta+1} \|\mathbf{x}\|_2^{2\beta} \log \|\mathbf{x}\|_2, & \text{falls } \mathbf{x} \neq 0 \\ 0, & \text{falls } \mathbf{x} = 0 \end{cases}$$

mit $\beta \in \mathbb{N}_{>0}$, ist bedingt positiv definit von Ordnung $m \geq \beta + 1$ in \mathbb{R}^d für alle $d \in \mathbb{N}_{>0}$ und radial.

2.3.4 Unisolvente Mengen

Man betrachte nun eine Radiale Basisfunktion Φ von Ordnung m in \mathbb{R}^d . Um die Eindeutigkeit der Interplante \mathcal{P}_f in der erweiterten RBF-Methode, nach Theorem 2.35, zu gewährleisten, muss die Menge der Datenpunkte $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ eine $(m-1)$ -unisolvente Menge sein. Um diese, in Theorem

2.35, beschriebene Restriktion an die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} besser zu verstehen, betrachte man folgende Definition 2.47 (vgl. [8], S.37).

Definition 2.47 (Unisolvente Menge)

Sei $m \in \mathbb{N}$ und $n \in \mathbb{N}_{>0}$. Eine Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \subset \mathbb{R}^d$ heißt $(m-1)$ -unisolvent, falls für eine Basis $\{p_1, \dots, p_M\}$ von $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ und für alle $i \in \{1, \dots, n\}$ gilt:

$$\sum_{k=1}^M \lambda_k p_k(\mathbf{x}_i) = 0 \Rightarrow \lambda_k = 0 \quad \forall k \in \{1, \dots, M\} \quad (33)$$

$\mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ bezeichnet die Menge aller $(m-1)$ -unisolventen Mengen in \mathbb{R}^d .

Nach Definition 2.47 ist eine Menge \mathcal{X} eine $(m-1)$ -unisolvente Menge, wenn das einzige Polynom $q \in \mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ mit einer Nullstelle in allen Punkten der Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, das Nullpolynom $q \equiv 0$ ist (vgl. [8], S.37).

Die Bedingung (33) aus obiger Definition 2.47 ist offensichtlich äquivalent zur linearen Unabhängigkeit von

$$\mathbf{P}_1 := \begin{pmatrix} p_1(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ p_1(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix}, \mathbf{P}_2 := \begin{pmatrix} p_2(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ p_2(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{P}_M := \begin{pmatrix} p_M(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ p_M(\mathbf{x}_n) \end{pmatrix}. \quad (34)$$

Die Untersuchung der Beziehung unisolventer Mengen untereinander ist wichtig, um die Restriktion an die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} in der erweiterten RBF-Methode einschätzen zu können. Aus diesem Grund betrachte man zunächst folgendes Theorem 2.48 (vgl. [9], S.37):

Theorem 2.48 (Dimension der Polynomräume)

Sei $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ der Raum aller reellwertigen d -variater Polynome mit (totalem) Grad $m-1$ und $\mathbb{N} \ni M := \dim \mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$. Dann gilt:

$$M = \binom{m-1+d}{m-1}$$

Mithilfe des vorigen Theorem 2.48 kann man nun folgendes Theorem 2.49 zeigen.

Theorem 2.49 (Beziehung unisolventer Mengen untereinander)

Sei $\mathcal{U}_{0-1}(\mathbb{R}^d) := \{\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d : |\mathcal{X}| < \infty\}$. Dann gilt für beliebiges $m \in \mathbb{N}_{>2}$:

$$\mathcal{U}_{0-1}(\mathbb{R}^d) = \mathcal{U}_{1-1}(\mathbb{R}^d) \supseteq \mathcal{U}_{2-1}(\mathbb{R}^d) \supseteq \cdots \supseteq \mathcal{U}_{m-2}(\mathbb{R}^d) \supseteq \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d).$$

Beweis Es gilt offensichtlich: $\mathcal{U}_{1-1}(\mathbb{R}^d) = \mathcal{U}_0(\mathbb{R}^d)$. Zunächst zeige man:

$$\mathcal{U}_0(\mathbb{R}^d) = \{\tilde{\mathcal{X}} \subseteq \mathbb{R}^d : |\tilde{\mathcal{X}}| < \infty\}.$$

Sei dafür $n \in \mathbb{N}_{>0}$ beliebig und die Menge $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \in \{\tilde{\mathcal{X}} \subseteq \mathbb{R}^d : |\tilde{\mathcal{X}}| < \infty\}$ beliebig. Für die Basis $\{p_1 \equiv 1\}$ von $\mathcal{P}_0(\mathbb{R}^d)$ und $\lambda_1 \in \mathbb{R}$ gilt für alle $i \in \{1, \dots, n\}$:

$$\lambda_1 \underbrace{p_1(\mathbf{x}_i)}_{=1} = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 0. \quad (35)$$

Wegen (35) ist die Bedingung (33) aus Definition 2.47 für die Basis $\{p_1 \equiv 1\}$ von $\mathcal{P}_0(\mathbb{R}^d)$ und für alle $i \in \{1, \dots, n\}$ erfüllt. Also gilt für die Menge $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{1-1}(\mathbb{R}^d)$ und damit $\{\tilde{\mathcal{X}} \subseteq \mathbb{R}^d : |\tilde{\mathcal{X}}| < \infty\} \subseteq \mathcal{U}_{1-1}(\mathbb{R}^d)$. Da die Definition 2.47 nur für Mengen endlicher Mächtigkeit $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ gege-

ben ist, liegt die Inklusion $\{\tilde{\mathcal{X}} \subseteq \mathbb{R}^d : |\tilde{\mathcal{X}}| < \infty\} \supseteq \mathcal{U}_{1-1}(\mathbb{R}^d)$ nach Definition vor. Insgesamt gilt also, wie gewünscht:

$$\{\tilde{\mathcal{X}} \subseteq \mathbb{R}^d : |\tilde{\mathcal{X}}| < \infty\} = \mathcal{U}_{1-1}(\mathbb{R}^d).$$

Nun zeige man induktiv die folgenden Inklusionen:

$$\mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d) \subseteq \mathcal{U}_{m-2}(\mathbb{R}^d) \quad \forall m \in \mathbb{N}_{>1}. \quad (36)$$

Sei $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ beliebig, $m \in \mathbb{N}_{>1}$ beliebig und $M = \dim \mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$. Es gilt mit Definition 2.47 und den, in (34) definierten, Vektoren $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_M$:

$$\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d) \Leftrightarrow \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_M \text{ linear unabhängig.} \quad (37)$$

Nach Theorem 2.48 gilt für die Dimension M von $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$:

$$\begin{aligned} M &= \binom{m-1+d}{m-1} = \frac{(m-1+d)!}{(m-1)! \cdot d!} = \frac{(m-1+d) \cdot \dots \cdot m \cdot (m-1)!}{d! \cdot (m-1)!} \\ &= \frac{(m-1+d) \cdot \dots \cdot m}{d!}. \end{aligned} \quad (38)$$

In (38) ist folgendes zu entnehmen: Je kleiner m , desto kleiner ist M . Aus diesem Grund gilt für $\hat{m} := m - 1$, dass $\hat{M} := \dim \mathcal{P}_{\hat{m}-1}(\mathbb{R}^d) \leq M$. Mit dem Resultat (38), Definition 2.47 und den, in (34) definierten, Vektoren $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_{\hat{M}}$ gilt für $\hat{m} = m - 1$:

$$\hat{\mathcal{X}} \in \mathcal{U}_{\hat{m}-1}(\mathbb{R}^d) = \mathcal{U}_{m-2}(\mathbb{R}^d) \Leftrightarrow \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_{\hat{M}} \text{ linear unabhängig.} \quad (39)$$

Da nun $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ beliebig gewählt ist, sind nach (37) die Vektoren $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_M$ aus (34) linear unabhängig. Weil $\hat{M} \leq M$ gilt, sind damit

insbesondere die Vektoren $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_{\hat{M}}$ linear unabhängig. Mit der linearen Unabhängigkeit von $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_{\hat{M}}$ folgt mit (39):

$$\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-2}(\mathbb{R}^d). \quad (40)$$

Insgesamt folgt mit (40) die Aussage (36), welche das Theorem 2.49 schließlich beweist. \square

Im Folgenden wird eine hinreichende Bedingung an die Menge \mathcal{X} formuliert, welche die m -Unisolvenz der Menge \mathcal{X} im \mathbb{R}^2 sicherstellt (vgl. [9], S.39 und [15], Kapitel 6).

Theorem 2.50 (Konstruktion von m -Unisolvenz in \mathbb{R}^2)

Es sei $\{L_0, \dots, L_m\}$ eine Menge von $m + 1$ paarweise verschiedenen Geraden in \mathbb{R}^2 und $U := \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_N\}$ eine Menge von paarweise verschiedenen Punkten in \mathbb{R}^2 mit $N := \binom{2+m}{2}$. Weiterhin gelte:

- $\mathbf{u}_1 \in L_0$
- $\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3 \in L_1 \cap L_0^C$
- ...
- $\mathbf{u}_{N-m}, \dots, \mathbf{u}_N \in L_m \cap L_0^C \cap \dots \cap L_{m-1}^C$

Sei $n \in \mathbb{N}$. Dann gilt: Jede Menge $\mathcal{X} := \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ mit $\mathcal{X} \supseteq U$ ist eine m -unisolvente Menge in \mathbb{R}^2 .

Mithilfe des vorigen Theorem 2.50 kann man sich relativ einfach unisolvente Mengen im \mathbb{R}^2 graphisch illustrieren. Ein Beispiel für diese graphische Illustration ist im Folgenden gegeben. Dabei ist die Ausführung von folgendem Beispiel 2.51(a) durch [8] (S.38) und Beispiel 2.51(b) durch [9] (S.40) inspiriert.

Beispiel 2.51

(a) Drei Punkte des \mathbb{R}^2 , die nicht kollinear sind, sind 1-unisolvent.

Um zu verifizieren, dass dies gilt betrachte man folgende Argumentation. Nach Voraussetzung sind die drei Punkte \mathbf{u}_1 , \mathbf{u}_2 und \mathbf{u}_3 nicht kollinear. Demnach existieren zwei verschiedene Geraden L_0 und L_1 in \mathbb{R}^2 , sodass $\mathbf{u}_1 \in L_0$ und $\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3 \in L_1 \cap L_0^C$. Da zusätzlich $\binom{2+1}{2} = 3$, gilt nach Theorem 2.50 mit $m = 1$ und $\mathcal{X} = U$ die Aussage des Beispiels 2.51(a).

(b) Jede Menge $\mathcal{X} \supseteq U$ ist 2-unisolvent in \mathbb{R}^2 , mit $U \subset \mathbb{R}^2$ aus Abbildung 15.

Man betrachte drei paarweise verschiedene Geraden L_0 , L_1 und L_2 in \mathbb{R}^2 und eine Menge $U := \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_6\}$ von paarweise verschiedenen Punkten in \mathbb{R}^2 . Es gelte zusätzlich:

- $\mathbf{u}_1 \in L_0$
- $\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3 \in L_1 \cap L_0^C$
- $\mathbf{u}_4, \mathbf{u}_5, \mathbf{u}_6 \in L_2 \cap L_0^C \cap L_1^C$

Da zusätzlich $\binom{2+2}{2} = 6$, gilt nach Theorem 2.50 mit $m = 2$ die Aussage des Beispiels 2.51(b). Ein Beispiel für eine solche Menge $U = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_6\}$ ist in Abbildung 15 veranschaulicht.

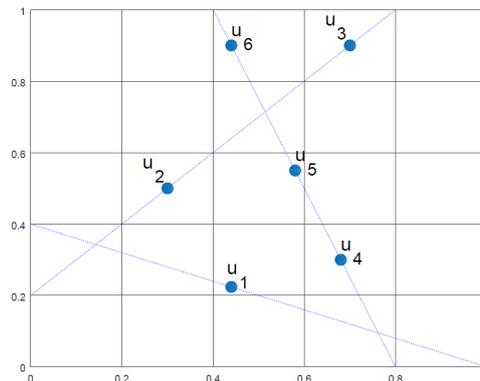


Abbildung 15: Die Menge $U := \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_6\}$ aus Theorem 2.50 für das Beispiel 2.51(b) (vgl. [9], S.40).

2.3.5 Restriktion an die Menge der Datenpunkte in der erweiterten RBF-Methode

Nach Theorem 2.35 existiert für Radiale Basisfunktionen $\Phi \in bpd(m, d)$ und Mengen an Datenpunkten $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ eine eindeutige Interpolation \mathcal{P}_f in der erweiterten RBF-Methode. Da die Restriktion $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ an die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} nach Theorem 2.49 mit Verringerung der Ordnung m kleiner wird, wird sich für die kleinste Ordnung $m^* \in \mathbb{N}_0$ interessiert, sodass die Funktion Φ bedingt positiv definit ist. Diese kleinste Ordnung $m^* \in \mathbb{N}_0$, sodass die Funktion Φ bedingt positiv definit ist, ist für $m \in \mathbb{N}_0$ und $bpd(-1, d) := \emptyset$ wie folgt charakterisiert:

$$\Phi \in bpd(m, d) \setminus bpd(m-1, d) \Leftrightarrow \Phi \in bpd(m, d) \text{ mit } m^* = m. \quad (41)$$

Obige Charakterisierung (41) gilt, da aufgrund von Theorem 2.41 die Beziehung $bpd(m-1, d) \supseteq bpd(\hat{m}, d)$ für alle $0 \leq \hat{m} \leq m-1$ vorliegt.

In der folgenden Abbildung 16 ist ein Venn-Diagramm dargestellt, welches die disjunkten Mengen $bpd(m, d) \setminus bpd(m-1, d)$ für $m \in \{0, 1, 2\}$ darstellt. Je dunkler die Farbe in der Abbildung 16 für die Menge $bpd(m, d) \setminus bpd(m-1, d)$ gewählt ist, desto geringer die Restriktion $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ an die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} .

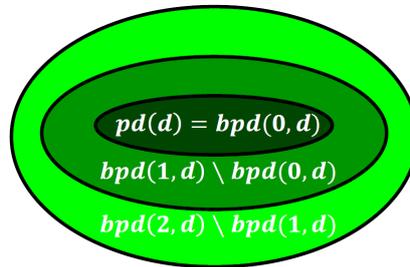


Abbildung 16: Eine Veranschaulichung als Venn-Diagramm von bedingt positiv definiten Funktionenklassen für $m^* \in \{0, 1, 2\}$ und $d \in \mathbb{N}_{>0}$.

Im Folgenden wird die Restriktion an die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} , für die Generierung einer eindeutigen Interpolanten \mathcal{P}_f , in der erweiterten RBF-Methode und der multivariaten Polynominterpolation verglichen. Dazu betrachte man folgendes Theorem 2.52 (vgl. [15], Kapitel 6):

Theorem 2.52 *Sei $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\} \subseteq \mathbb{R}^d$ eine Menge paarweise verschiedener Datenpunkte und $\{y_1, \dots, y_n\}$ die zugehörigen reellen Datenwerte. Damit die Existenz und Eindeutigkeit der multivariaten Polynominterpolation gesichert ist, muss gelten:*

$$\exists m \in \mathbb{N} : \mathcal{X} \in \mathcal{U}_m(\mathbb{R}^d) \text{ und } n = \binom{m+d}{m}.$$

Aus dem Theorem 2.52 können unmittelbar zwei Erkenntnisse abgeleitet werden. Zum einen muss bei großer Anzahl n an Datenpunkten, wegen der Beziehung $n = \binom{m+d}{m}$, für die Eindeutigkeit der Interpolante in der multivariaten Polynominterpolation, m groß gewählt werden. Dies hat mit Theorem 2.49 eine große Restriktion $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_m(\mathbb{R}^d)$ für die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} zur Folge. Zum anderen existiert für viele Möglichkeiten von $n \in \mathbb{N}_{>0}$ und $d \in \mathbb{N}_{>1}$ kein $m \in \mathbb{N}$, sodass $n = \binom{m+d}{m}$ gilt (z.B. $d = 2$ und $n \in \{5, 7, \dots\}$).

Im Vergleich dazu werden bei der erweiterten RBF-Methode üblicherweise Radialen Basisfunktionen $\Phi \in bpd(m, d)$ mit einem relativ kleinen m betrachtet (z.B. $m \in \{0, 1, 2, 3\}$). Aus diesem Grund ist die Restriktion $\mathcal{X} \in \mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$ an die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} , für die Generierung einer eindeutigen Interpolanten \mathcal{P}_f , in der erweiterten RBF-Methode üblicherweise relativ klein (vgl. [15], Kapitel 6).

2.4 Zusammenfassung der bisherigen Resultate der einfachen und erweiterten RBF-Methode

In Abschnitt 2.1 wird die Interpolation mit Radialen Basisfunktionen mit der kubischen Spline-Interpolation motiviert. Schließlich wird in Abschnitt 2.3 die Interpolation mit eindimensionalen kubischen Splines $s : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tatsächlich als Spezialfall (RP, $\beta = 3$) der Interpolation mit Radialen Basisfunktionen in der erweiterten RBF-Methode bezüglich des Polynomraumes $\mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ identifiziert.

In Abschnitt 2.2 werden (hauptsächlich) positiv definite Radiale Basisfunktionen vorgestellt, welche durch Anwendung der einfachen RBF-Methode eine eindeutige Interpolation liefern. Die einfache RBF-Methode wird als Spezialfall der erweiterten RBF-Methode identifiziert, da für $m = 0$ die Definition 1.4 mit der Definition 2.33 übereinstimmt. Um dies einzusehen beachte man auch, dass aufgrund $m = 0$ ebenfalls $M = \dim \mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d) = 0$ aus Definition 2.33 folgt. Aus diesem Grund gilt für die Interpolante \mathcal{P}_f der erweiterten RBF-Methode aus Definition 2.33 in diesem Fall:

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2) + \underbrace{\sum_{k=1}^0 \gamma_k \mathcal{P}_k(\mathbf{x})}_{=0} = \sum_{i=1}^n c_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2).$$

Zudem sind, nach Theorem 2.40, für $m = 0$ die Definition 2.13 der positiven Definitheit und die Definition 2.37 der bedingten positiven Definitheit identisch. Da zusätzlich $\mathcal{U}_{0-1}(\mathbb{R}^d) = \{\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d : |\mathcal{X}| < \infty\}$ gilt, reduzieren sich die Forderungen aus Theorem 2.35 für $m = 0$ auf die Forderung der positiven Definitheit der Radialen Basisfunktion Φ .

In Abschnitt 2.3 werden bedingt positiv definite Radiale Basisfunktionen vorgestellt, welche im Allgemeinen nur unter gewissen Voraussetzungen durch Anwendung der erweiterten RBF-Methode, nach Theorem 2.35, eine

eindeutige Interpolation liefern. Die Voraussetzungen, um die Verwendung von Theorem 2.35 zu gewährleisten, sind in Abschnitt 2.3.5 näher beleuchtet und können für üblich verwendete Radiale Basisfunktionen als relativ gering angesehen werden.

Als üblich verwendete Radiale Basisfunktionen können alle in dieser Arbeit betrachteten Radialen Basisfunktionen angesehen werden. Eine Zusammenfassung der Resultate dieses Kapitels 2 liefert folgende Tabelle 7.

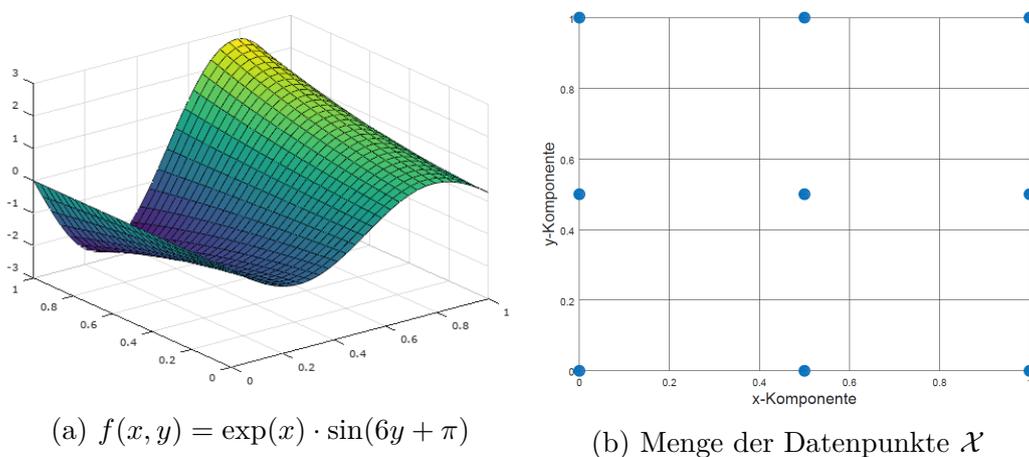
Name	$\Phi(\mathbf{x}) =$	$\Phi \in \mathit{bpd}(m, d)$	M_I/M_{II}
GA	$e^{-\epsilon^2 \ \mathbf{x}\ _2^2}, \epsilon > 0$	für $m \geq 0$	M_I
IQ	$(1 + \epsilon^2 \ \mathbf{x}\ _2^2)^{-1}, \epsilon > 0$	für $m \geq 0$	M_I
IMQ	$(1 + \epsilon^2 \ \mathbf{x}\ _2^2)^{-\frac{1}{2}}, \epsilon > 0$	für $m \geq 0$	M_I
MQ	$(1 + \epsilon^2 \ \mathbf{x}\ _2^2)^{\frac{1}{2}}, \epsilon > 0$	-	M_I
Linear	$\ \mathbf{x}\ _2$	-	M_I
GMQ	$(-1)^{\lceil \beta \rceil} (1 + \ \mathbf{x}\ _2^2)^\beta, 0 < \beta \notin \mathbb{N}$	für $m \geq \lceil \beta \rceil$	M_{II}
RP	$(-1)^{\lceil \frac{\beta}{2} \rceil} \ \mathbf{x}\ _2^\beta, 0 < \beta \notin 2\mathbb{N}$	für $m \geq \lceil \frac{\beta}{2} \rceil$	M_{II}
TPS	$(-1)^{\beta+1} \ \mathbf{x}\ _2^{2\beta} \log \ \mathbf{x}\ _2, \beta \in \mathbb{N}$	für $m \geq \beta + 1$	M_{II}

Tabelle 7: Die Existenz und Eindeutigkeit einer Interpolation \mathcal{P}_f wird in Kapitel 2 für die aufgelisteten Radialen Basisfunktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mittels der einfachen (M_I) oder der erweiterten (M_{II}) RBF-Methode festgestellt.

Abschließend wird noch ein Beispiel für eine Interpolation mit der einfachen und erweiterten RBF-Methode betrachtet.

Beispiel 2.53

Im Folgenden wird die Funktion $f(x, y) := \exp(x) \cdot \sin(6y + \pi)$ betrachtet. Der Funktionsgraph von f ist in Abbildung 17(a) zu sehen. In dieser Arbeit wurde eine Interpolation mittels der einfachen und der erweiterten RBF-Methode in *Octave* realisiert [Programm: *PlotsGA.m* und *PlotsRP.m*]. Die Menge der Datenpunkte \mathcal{X} sind neun äquidistant verteilte Punkte in $[0, 1]^2$ und in Abbildung 17(b) zu sehen.

Abbildung 17: Die Funktion f und die Datenpunkte.

In Abbildung 18(a) ist die Interpolation von f in der einfachen RBF-Methode (M_I) mittels der Gaussian (GA) Basisfunktion $\Phi(\mathbf{x}) = e^{-\epsilon^2 \|\mathbf{x}\|_2^2}$ und dem Shape Parameter $\epsilon = 2$ zu sehen.

In Abbildung 18(b) ist die Interpolation von f mittels der Radial Powers (RP) Basisfunktion $\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{\lceil \frac{\beta}{2} \rceil} \|\mathbf{x}\|_2^\beta$ und Parameter $\beta = 3$ in der erweiterten RBF-Methode (M_{II}) zu sehen.

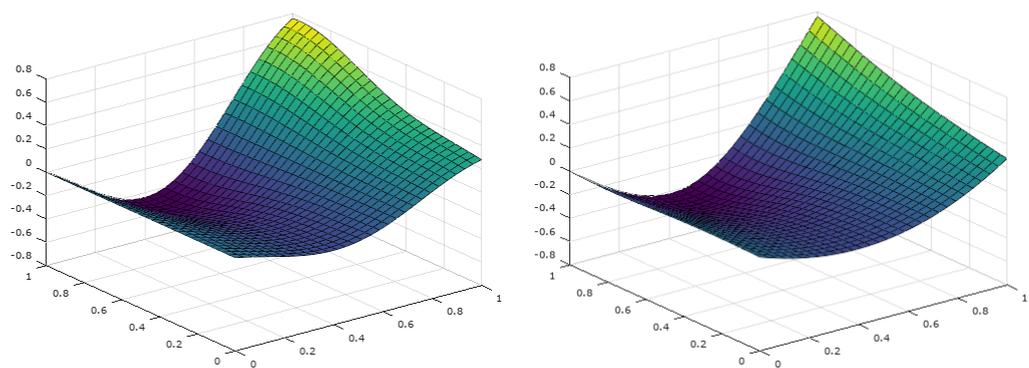
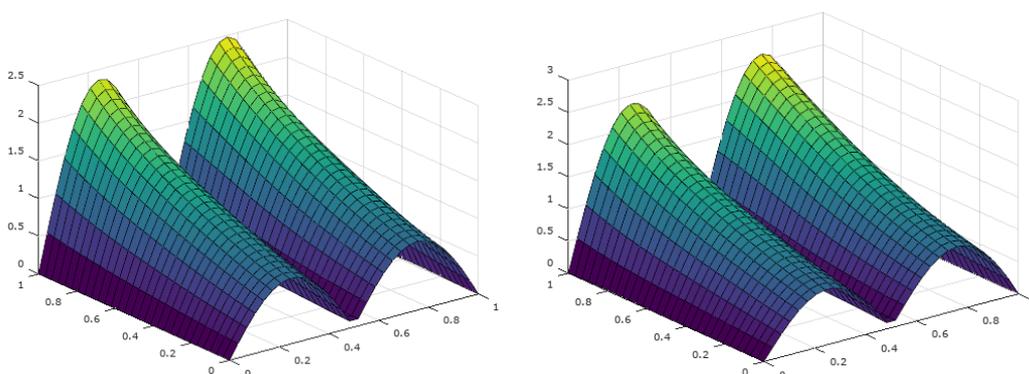


Abbildung 18: Die Interpolationen.

In Abbildung 19(a) ist der Fehler $|f - \mathcal{P}_f|$ der Interpolation \mathcal{P}_f zu f in der einfachen RBF-Methode (M_I) mittels der Gaussian (GA) Basisfunktion $\Phi(\mathbf{x}) = e^{-\epsilon^2 \|\mathbf{x}\|_2^2}$ und dem Shape Parameter $\epsilon = 2$ zu sehen.

In Abbildung 19(b) ist der Fehler $|f - \mathcal{P}_f|$ der Interpolation \mathcal{P}_f zu f in der erweiterten RBF-Methode (M_{II}) mittels der Radial Powers (RP) Basisfunktion $\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{\lceil \frac{\beta}{2} \rceil} \|\mathbf{x}\|_2^\beta$ und Parameter $\beta = 3$ zu sehen.



(a) $|f - \mathcal{P}_f|$ in M_I (RBF: GA, $\epsilon = 2$) (b) $|f - \mathcal{P}_f|$ in M_{II} (RBF: RP, $\beta = 3$)

Abbildung 19: Die „Fehler“ der Interpolationen.

Man vergleiche dieses Beispiel 2.53 mit dem Beispiel 3.14 aus nachfolgendem Kapitel 3, welches die identische Funktion f mittels ebenfalls der Gaussian (GA) Basisfunktion in der einfachen RBF-Methode interpoliert. In dem Beispiel 3.14 wird allerdings im Vergleich zu diesem Beispiel 2.53 eine andere Anzahl der Datenpunkte, eine andere Anordnung der Datenpunkte oder ein anderer Shape Parameter ϵ vorausgesetzt.

In Beispiel 2.53 wird sich in Abbildung 19 mit dem Fehler $|f - \mathcal{P}_f|$ der Interpolation \mathcal{P}_f zu f beschäftigt. Eine genauere Auseinandersetzung mit dem Fehler $|f - \mathcal{P}_f|$ der Interpolation ist das Thema des folgenden Kapitel 3.

3 Error Estimation für RBFs

Das Ziel dieses Kapitels ist es, mögliche Herangehensweisen der Fehlerabschätzung, beziehungsweise -optimierung darzustellen und mit geeigneten *Octave* Programmen zu visualisieren. Die Unterkapitel werden durch einige *Octave* Programmierungen/Beispiele veranschaulicht, die sich zum Teil an einigen *Matlab* Programmen aus [14] orientieren. Die Hauptquellen sind [8], [14], [39] und [54]. Aufbauend auf der Lagrange Form des Interpolanten wird der sogenannte Native Space für Radiale Basisfunktionen erläutert. Mit Hilfe dessen lässt sich die Power Function [Unterkapitel 3.2.2] definieren, die essentiell für die Fehlerabschätzung der Interpolation mit Radialen Basisfunktionen ist. In Kapitel 3.3 wird diese Fehlerabschätzung vorgestellt und bewiesen. Abschließend wird noch ein Blick auf die Stabilität und Kondition des Verfahrens, sowie auf mögliche Fehleroptimierung geworfen [Kapitel 3.4 und 3.5].

3.1 Lagrange Form des Interpolanten

In diesem Abschnitt werden kardinale Basisfunktionen eingeführt, die eine besondere Eigenschaft für die Stützstellen $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ haben. Dabei basiert dieser Abschnitt primär auf [8] und [14]. Mit Hilfe der kardinalen Basisfunktionen lässt sich der Interpolant durch eine alternative Schreibweise darstellen, die sofort die Exaktheit an den Stützstellen garantiert. Außerdem werden die kardinalen Basisfunktionen für die Power Function benötigt, die im nächsten Abschnitt definiert wird.

Aus Kapitel 2 ist bekannt, dass für beliebige positiv definite Funktionen Φ das Gleichungssystem

$$A\mathbf{c} = \mathbf{y}$$

mit $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\}$ und $\mathbf{y} = [f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n)]^T$ eine eindeutige Lösung $\mathbf{c} = [c_1, \dots, c_n]^T$ besitzt. Die Eindeutigkeit der Lösung des Gleichungssystem gilt auch für den Fall, dass Φ ein positiv definiten Kern ist, das heißt die Einträge von A lassen sich über $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ bestimmen. Diese Eigenschaft wird im Folgenden ausgenutzt, sodass das Gleichungssystem

$$A\mathbf{u}^*(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x}) \quad (42)$$

für $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ (A ist invertierbar) und $\mathbf{b} = [\Phi(\cdot, \mathbf{x}_1), \dots, \Phi(\cdot, \mathbf{x}_n)]^T$ mit der eindeutigen Lösung $\mathbf{u}^* = [u_1^*, \dots, u_n^*]^T$ gelöst werden kann. Die Funktionen $u_j^*, \forall j \in \{1, \dots, n\}$ der eindeutigen Lösung \mathbf{u}^* werden kardinale Basisfunktionen genannt und erfüllen die Bedingung $u_j^*(\mathbf{x}_i) = \delta_{ij}$, das heißt

$$u_j^*(\mathbf{x}_i) = \begin{cases} 1, & \text{falls } i = j, \\ 0, & \text{falls } i \neq j. \end{cases}$$

Die Eindeutigkeit wird durch folgendes Theorem garantiert (vgl. [8], S. 47).

Theorem 3.1 Falls Φ ein positiv definiten Kern auf \mathbb{R}^d ist, dann existieren für verschiedene Punkte $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ Funktionen $u_j^* \in \text{span}\{\Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) : j = 1, \dots, n\}$, sodass $u_j^*(\mathbf{x}_i) = \delta_{ij}$ gilt.

Um das Verständnis für kardinale Basisfunktionen zu stärken, wird das folgende Beispiel (Beispiel 3.2) betrachtet.

Beispiel 3.2 (Kardinale Basisfunktionen)

Seien zwei Stützstellen $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^d$ gegeben. Dann sieht das obige Gleichungssystem (1) für die Stützstelle \mathbf{x}_1 wie folgt aus:

$$\begin{pmatrix} \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \\ \Phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & \Phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^*(\mathbf{x}_1) \\ u_2^*(\mathbf{x}_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) \\ \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \end{pmatrix}$$

Dann folgt mit der Eigenschaft der kardinalen Basisfunktionen

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) \underbrace{u_1^*(\mathbf{x}_1)}_{=1} + \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \underbrace{u_2^*(\mathbf{x}_1)}_{=0} &= \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) \\ \Phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) \underbrace{u_1^*(\mathbf{x}_1)}_{=1} + \Phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) \underbrace{u_2^*(\mathbf{x}_1)}_{=0} &= \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2). \end{aligned}$$

Wird in der zweiten Gleichung die Symmetrie ausgenutzt (das heißt $\Phi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) = \Phi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$), lösen die kardinalen Basisfunktionen sofort das Gleichungssystem und sind damit die eindeutige Lösung.

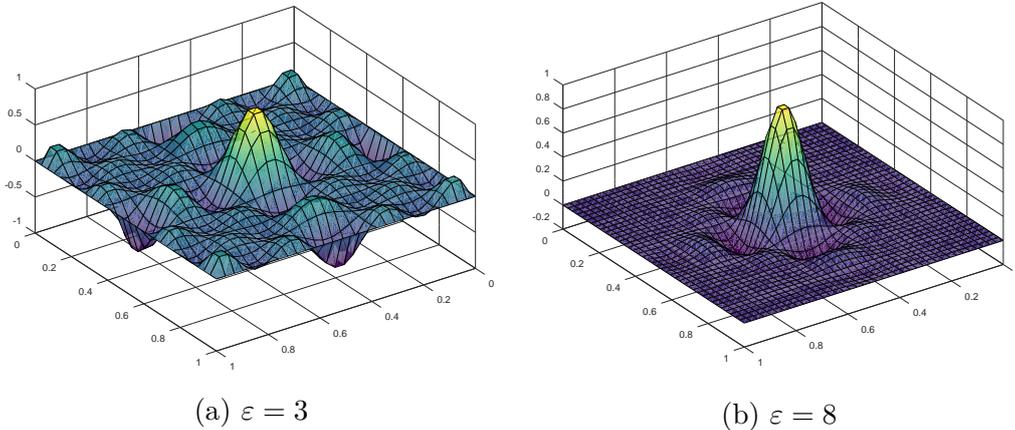


Abbildung 20: Beispiel Kardinalen Basisfunktionen

Abbildung 20 zeigt zwei Plots von Kardinalen Basisfunktionen für eine Gaußsche Basisfunktion mit unterschiedlichem Shape Parameter ε auf 81 gleichverteilten Punkten in $[0, 1]^2$ für den Punkt $\mathbf{x} = [0.5, 0.5]^T$ [Programm: *Kardinal-*

Funktionen.m, Vorlage Fasshauer [14] *RBFCardinalFunction*]. Es ist gut zu erkennen, dass die kardinalen Basisfunktionen den Wert eins für den Punkt $\mathbf{x} = [0.5, 0.5]^T$ annehmen. Außerdem liefern die Radialen Basisfunktionen an allen anderen Stützstellen $\mathcal{X} \setminus \{\mathbf{x}\}$ den Wert null, so wie es die Eigenschaft besagt.

Mit Hilfe dieser Vorarbeiten kann der Interpolant \mathcal{P}_f auf eine analoge Schreibweise zu der aus Kapitel zwei geschrieben werden [[14], S. 112].

Definition 3.3 *Zu gegebenen Stützstellen $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ und einem festen $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ kann der Interpolant \mathcal{P}_f zu der Funktion f in kardinal Form geschrieben werden*

$$\mathcal{P}_f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n f(\mathbf{x}_j) u_j^*(\mathbf{x}).$$

Das Interessante an dieser Darstellung ist die Unabhängigkeit der Funktionen u_j^* von f , das heißt die kardinalen Basisfunktionen hängen nicht von der zu interpolierenden Funktion f ab. Sobald die Stützstellen \mathcal{X} und die Radiale Basisfunktion Φ mit Shape Parameter ε bekannt sind, können die kardinalen Basisfunktionen u_j^* über das Gleichungssystem (42) bestimmt werden. Die $f(\mathbf{x}_j)$ sind an den Stützstellen $\mathbf{x}_j \in \mathcal{X}$ exakt bekannt, weshalb die Interpolierende in kardinal Form nur von der Wahl der obigen drei Punkten abhängt (Stützstellen, Radiale Basisfunktion und Shape Parameter).

Eine einfache Aussage lässt sich über die Wahl der obigen Punkte treffen: Je mehr Stützstellen vorhanden sind, desto besser wird die Interpolierende (wird später in Beispiel 3.14 aufgegriffen). Im Allgemeinen können aber keine Aussagen über die optimale Wahl der Radialen Basisfunktion und des Shape Parameters getroffen werden. Möglichkeiten, wie die Wahl des Shape Parameters zu gegebener Radialen Basisfunktion optimiert werden kann, werden im späteren Abschnitt 3.7 thematisiert.

3.2 Native Space und die Power Function

Im folgenden Kapitel werden benötigte theoretische Grundlagen für Fehlerabschätzungen bzgl. der Interpolation mit Radialen Basisfunktionen präsentiert (vgl. [8] und [14]). Dabei liegt das Augenmerk auf positiv definiten Funktionen (vgl. Kapitel 2). Das Ziel ist es, den Native Space $\mathcal{N}_\Phi(\Omega)$ sowie die Power Function $P_{\Phi, \mathcal{X}}$ zu definieren und damit die Grundlage für mögliche Fehlerabschätzungen darzustellen.

3.2.1 Hilberträume mit reproduzierendem Kern und der Native Space

Um den Native Space $\mathcal{N}_\Phi(\Omega)$ einer Radialen Basisfunktion zu verstehen wird vorab ein Blick auf Hilberträume mit reproduzierendem Kern [RKHS] geworfen (vgl. [54], S. 134). Die Idee der RKHS wird dann genutzt, um den Native Space einer Radialen Basisfunktion zu erläutern.

Definition 3.4 (Hilbertraum mit reproduzierendem Kern)

Sei \mathcal{H} ein reeller Hilbertraum von Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit dem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$. Eine Funktion $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ wird reproduzierender Kern für \mathcal{H} genannt, wenn

$$(a) \quad K(\cdot, \mathbf{x}) \in \mathcal{H} \text{ für alle } \mathbf{x} \in \Omega$$

$$(b) \quad f(\mathbf{x}) = \langle f, K(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} \text{ für alle } f \in \mathcal{H} \text{ und alle } \mathbf{x} \in \Omega$$

Bemerkung 3.5

Der Name reproduzierender Kern leitet sich aus der Eigenschaft (b) her, des Weiteren ist der reproduzierende Kern K eines Hilbertraums eindeutig. Angenommen es gäbe zwei unterschiedliche reproduzierende Kerne $K_1(\cdot, \mathbf{x})$ und $K_2(\cdot, \mathbf{x})$. Dann gilt nach Eigenschaft (b)

$$\langle f, K_1(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} - \langle f, K_2(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} = \langle f, K_1(\cdot, \mathbf{x}) - K_2(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} = 0 \quad \forall f \in \mathcal{H}, \mathbf{x} \in \Omega.$$

Wird nun $f = K_1(\cdot, \mathbf{x}) - K_2(\cdot, \mathbf{x})$ gesetzt, ergibt sich

$$\langle K_1(\cdot, \mathbf{x}) - K_2(\cdot, \mathbf{x}), K_1(\cdot, \mathbf{x}) - K_2(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} = 0$$

und somit nach Axiomen des Skalarproduktes $K_1(\cdot, \mathbf{x}) = K_2(\cdot, \mathbf{x})$. Dementsprechend ist der reproduzierende Kern eindeutig. Die Existenz dieses reproduzierenden Kerns ist [nach [14], S.103] äquivalent dazu, dass eine positive Konstante $M_{\mathbf{x}}$ existiert, so dass

$$|\langle f, K(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}}| = f(\mathbf{x}) \leq M_{\mathbf{x}} \|f\|_{\mathcal{H}} \text{ für alle } f \in \mathcal{H} \text{ und alle } \mathbf{x} \in \Omega.$$

Diese Äquivalenz ist über den Rieszschen Darstellungssatz gegeben (vgl. [21], S. 633).

Beispiel 3.6 (Hilbertraum mit reproduzierendem Kern)

Sei \mathcal{H} ein reeller Hilbertraum von linearen Funktionen $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, wobei die Funktionen die Form

$$f(\mathbf{x}) = ax_1 + bx_2 \quad \text{bzw.} \quad f(\cdot) = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}.$$

haben. Das Skalarprodukt sei

$$\langle f_1, f_2 \rangle_{\mathcal{H}} = \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}.$$

Zum gerade beschriebenen Hilbertraum definiere den Kern $K : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ wie folgt

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = x_1 y_1 + x_2 y_2.$$

Trivialerweise ist $K(\cdot, \mathbf{x}) \in \mathcal{H}$. Des Weiteren gilt

$$\langle f, K(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = ax_1 + bx_2 = f(\mathbf{x}).$$

Dies stellt die reproduzierende Eigenschaft des Kerns dar. Damit wird durch K der zum Hilbertraum H zugehörige reproduzierende Kern dargestellt.

Im Folgenden soll der reproduzierende Kern mit einer Radialen Basisfunktion assoziiert werden. Daher wird überprüft, inwiefern sich Eigenschaften der Kerne und Radiale Basisfunktionen überschneiden (vgl. [14], S. 104).

Korollar 3.7 Sei \mathcal{H} ein Hilbertraum von Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit einem reproduzierenden Kern $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Dann gilt:

- (a) $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle K(\cdot, \mathbf{y}), K(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}}$ für $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega$.
- (b) $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = K(\mathbf{y}, \mathbf{x})$ für $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega$.
- (c) K ist semi-positiv definit.

Beweis Nach Eigenschaft (a) aus Definition 3.4 folgt, dass $K(\cdot, \mathbf{y}) \in \mathcal{H}$ für alle $\mathbf{y} \in \Omega$. Demnach lässt sich auf $K(\cdot, \mathbf{y})$ die reproduzierende Eigenschaft anwenden. Wird diese nun mit $f := K(\cdot, \mathbf{y})$ genutzt folgt Eigenschaft (a) des Korollars. Eigenschaft (b) ist eine direkte Folgerung aus (a) und der Symmetrie des Skalarproduktes des Hilbertraums \mathcal{H} . Da sich auf reelle Kerne beschränkt wird, reicht es für (c) zu zeigen, dass

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \geq 0$$

für $\alpha \in \mathbb{R}^N$ beliebig gilt:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j \langle K(\cdot, \mathbf{y}), K(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \left\langle \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, \mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^N \alpha_j K(\cdot, \mathbf{x}_j) \right\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \left\| \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, \mathbf{x}_i) \right\|_{\mathcal{H}}^2 \\
&\geq 0. \quad \square
\end{aligned}$$

Die Möglichkeit, von einem Hilbertraum eindeutig auf einen reproduzierenden Kern zu schließen, ist somit dargestellt worden, allerdings ist die entgegengesetzte Richtung von großem Interesse. Es soll also ein Hilbertraum zu einem gegebenem Kern gefunden werden, wobei der Kern hierbei der zur Interpolation genutzten Radialen Basisfunktion entspricht. Jener, zu einer positiv definiten Radialen Basisfunktion zuzuordnende Raum, wird als Native Space bezeichnet und im Folgenden genauer untersucht. Wird nun also ein vorgegebener Kern $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ betrachtet, folgt nach Definition 3.4 des reproduzierenden Kerns, dass der zum Kern zugehörige Raum \mathcal{H} alle Funktionen der Form

$$f = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, \mathbf{x}_i)$$

enthalten muss. Dementsprechend ist die Idee, den zu einer Radialen Basisfunktion, beziehungsweise den zu einem Kern zugehörigen Raum mit

$$H_K(\Omega) = \text{span}\{K(\cdot, \mathbf{y}) : \mathbf{y} \in \Omega\}$$

zu assoziieren, welcher genau die obigen Funktionen enthält. Um einen Hilbertraum zu kreieren, fehlt noch ein zugehöriges Skalarprodukt. Mit der Gültigkeit (vgl. Beweis von Korollar 3.7) des Terms

$$\left\langle \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, \mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^N \alpha_j K(\cdot, \mathbf{x}_j) \right\rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j),$$

kann die entsprechende Bilinearform $\langle \cdot, \cdot \rangle$ genutzt werden:

$$\left\langle \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, \mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^M \beta_j K(\cdot, \mathbf{x}_j) \right\rangle_K = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \alpha_i \beta_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

Dies lässt sich zu folgendem Resultat zusammenführen (vgl. [54], S. 137).

Resultat 3.8 Sei $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein symmetrischer, positiv definiten Kern, dann ist die zugehörige Bilinearform $\langle \cdot, \cdot \rangle_K$ ein Skalarprodukt auf $H_K(\Omega) = \text{span}\{K(\cdot, \mathbf{y}) : \mathbf{y} \in \Omega\}$. Des Weiteren ist $H_K(\Omega)$ ein Prähilbertraum mit reproduzierendem Kern K .

Beweis Offensichtlich ist $\langle \cdot, \cdot \rangle_K$ symmetrisch und erfüllt Linearität, da der Kern K diese Eigenschaft erfüllt. Also soll noch gezeigt werden, dass $\langle f, f \rangle_K$ echt positiv für $f = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\cdot, \mathbf{x}_i) \in H_K(\Omega) \setminus \{f \equiv 0\}$ ist. Es gilt

$$\langle f, f \rangle_K = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) > 0,$$

da K positiv definit ist. Abschließend folgt

$$\langle f, K(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_K = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = f(\mathbf{x})$$

und somit auch die reproduzierende Eigenschaft des Kerns. □

Aufbauend auf Resultat 3.8 lässt sich nun der Native Space einer Radialen Basisfunktion definieren (vgl. [14], S. 106).

Definition 3.9 (Native Space $\mathcal{N}_K(\Omega)$)

Der Native Space $\mathcal{N}_K(\Omega)$ eines symmetrisch, positiv definiten Kerns $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ (im Folgenden auch häufig als Φ bezeichnet) wird als Abschluss von $H_K(\Omega) = \text{span}\{K(\cdot, \mathbf{y}) : \mathbf{y} \in \Omega\}$ mit zugehörigem (aus Resultat 3.8 bekanntem) Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_K$, welches nun mit $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{N}_K(\Omega)}$ bezeichnet wird, dargestellt. (Für technische Details kann zum Beispiel Wendland [54], S. 133 ff. betrachtet werden.)

Damit ist der, für die in Abschnitt 3.3 vorgestellte Fehlerabschätzung, notwendige Raum für Radiale Basisfunktionen definiert worden. Darüber hinaus ist für Fehlerabschätzungen eine weitere technische Grundlage essentiell: Die Power Function. Diese wird in der Fehlerabschätzung und in der Fehleroptimierung in Abschnitt 3.5 benötigt. Daher beinhaltet das folgende Unterkapitel die Definition und Veranschaulichungen der Power Function (vgl. [14], S. 115).

3.2.2 Die Power Function

Definition 3.10 (Power Function) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^s$ und $\Phi \in C(\Omega \times \Omega)$ positiv definit auf \mathbb{R}^s . Für gegebene Datenpunkte $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega$ wird die Power Function durch

$$P_{\Phi, \mathcal{X}}(\mathbf{x}) = \sqrt{Q(\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))}$$

definiert, wobei \mathbf{u}^* der Vektor der kardinalen Basisfunktionen aus Theorem 3.1 ist. Des Weiteren ist $Q(\mathbf{u})$ wie folgt definiert:

$$Q(\mathbf{u}) = \left\| \Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^n u_j \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \right\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}^2.$$

Da die Power Function von besonderer Wichtigkeit für die Fehlerabschätzung und -optimierung ist, werden im Folgenden alternative Schreibweisen für die Funktion betrachtet, um sie leichter zu berechnen (vgl. [14], S. 116).

Korollar 3.11 (Alternative Schreibweisen der Power Function)

Mit Hilfe der oben definierten Native Space Norm $\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)$ und der reproduzierenden Eigenschaft gilt

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{u}) &= \left\| \Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^n u_j \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \right\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}^2 \\ &= \langle \Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^n u_j \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j), \Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^n u_j \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \rangle_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)} \\ &= \langle \Phi(\cdot, \mathbf{x}), \Phi(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)} - 2 \sum_{j=1}^n u_j \langle \Phi(\cdot, \mathbf{x}), \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \rangle_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)} \\ &\quad + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n u_i u_j \langle \Phi(\cdot, \mathbf{x}_i), \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \rangle_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)} \\ &= \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2 \sum_{j=1}^N u_j \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u_i u_j \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \end{aligned}$$

Außerdem kann die Power Function mittels der Matrix Notation $A_{i,j} = \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, $i, j = 1, \dots, n$, $\mathbf{u} = [u_1, \dots, u_n]^T$ und $\mathbf{b} = [\Phi(\cdot, \mathbf{x}_1), \dots, \Phi(\cdot, \mathbf{x}_n)]^T$ mit $A\mathbf{u}^*(\mathbf{x}) = \mathbf{b}(\mathbf{x})$ wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned} P_{\Phi, \mathcal{X}}(\mathbf{x}) &= \sqrt{Q(\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))} \\ &= \sqrt{\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2(\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))^T \mathbf{b}(\mathbf{x}) + (\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))^T A \mathbf{u}^*(\mathbf{x})} \\ &\stackrel{A\mathbf{u}^*(\mathbf{x})=\mathbf{b}(\mathbf{x})}{=} \sqrt{\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))^T A \mathbf{u}^*(\mathbf{x})} \\ &= \sqrt{\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (\mathbf{b}(\mathbf{x}))^T A^{-1} \mathbf{b}(\mathbf{x})}. \end{aligned}$$

Die finale Schreibweise

$$P_{\Phi, \mathcal{X}}(\mathbf{x}) = \sqrt{\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (\mathbf{b}(\mathbf{x}))^T A^{-1} \mathbf{b}(\mathbf{x})}$$

wird zur Berechnung der Power Function genutzt, die an folgendem Beispiel verdeutlicht wird.

Beispiel 3.12 (Power Function)

Die Radiale Basisfunktion sei die Gaussian Basisfunktion

$$\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \exp\left(-(\varepsilon \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|)^2\right)$$

mit Shape Parameter $\varepsilon = 2$. Die neun Stützstellen sind als Gitter auf $[0, 1]^2$ verteilt. Die Berechnung werde für den Punkt $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0, 2 \\ 0, 2 \end{bmatrix}$ durchgeführt.

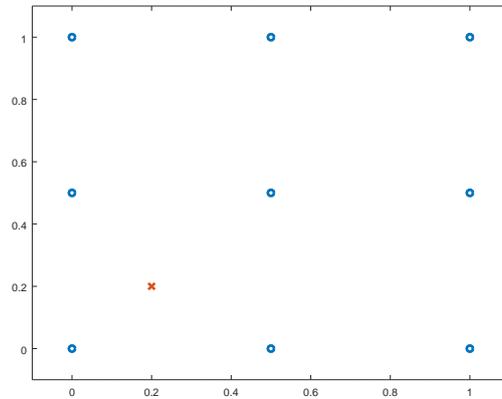


Abbildung 21: Gleichverteilte Stützstellen (blaue Kreise) für Power Function Beispiel I mit (rotem) Auswertungspunkt $\mathbf{x} = [0, 2; 0, 2]^T$

Nachdem die Radiale Basisfunktion, der Shape Parameter und die Anzahl und Verteilung der Stützstellen festgelegt wurde, müssen nun $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x})$, $b(\mathbf{x})$ und A^{-1} bestimmt werden, um die Werte der Power Function berechnen zu können. Explizit für dieses Beispiel ergibt sich:

$$\bullet \mathbf{b}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \\ \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) \\ \dots \\ \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_9) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \exp(-(2 \cdot 0, 28284)^2) \\ \exp(-(2 \cdot 0, 36055)^2) \\ \dots \\ \exp(-(2 \cdot 1, 13137)^2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7261490 \\ 0.5945293 \\ \dots \\ 0.0059761 \end{bmatrix},$$

- $A_{i,j} = \Phi(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$, das heißt

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0,36787 & \dots & 0,00335 \\ 0,36787 & 1 & \dots & \\ \dots & & & \\ 0,00335 & \dots & & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{9 \times 9} \text{ und positiv definit,}$$

- $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1$ und somit insgesamt:

$$\bullet P_{\Phi, \mathbf{x}} \left(\begin{bmatrix} 0, 2 \\ 0, 2 \end{bmatrix} \right) = \sqrt{1 - \left(b \left(\begin{bmatrix} 0, 2 \\ 0, 2 \end{bmatrix} \right) \right)^T A^{-1} b \left(\begin{bmatrix} 0, 2 \\ 0, 2 \end{bmatrix} \right)} = 0,41822.$$

Analog lassen sich alle Werte für $P_{\Phi, \mathcal{X}}(\mathbf{x})$ mit $\mathbf{x} \in [0, 1]^2$ ermitteln, so dass sich folgende Graphik der Power Function ergibt.

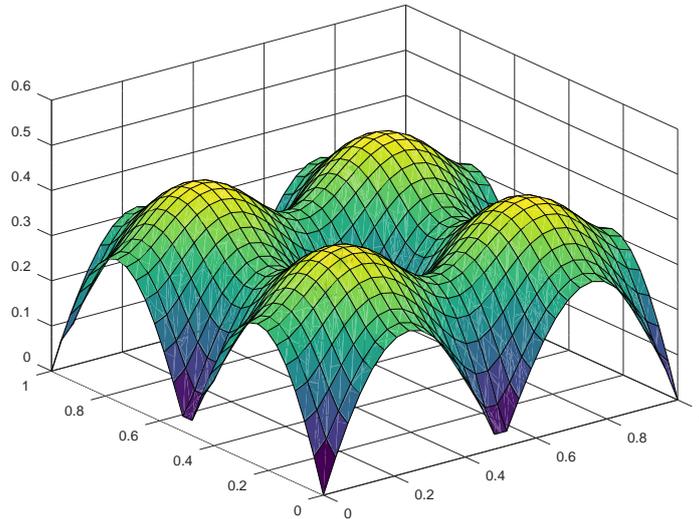


Abbildung 22: Power Function für Gaussian Basisfunktion ($\varepsilon = 2$) auf 9 gleichverteilten Punkten in $[0, 1]^2$ [Programm: *BeispielPowerFunction.m*]

Falls die Stützstellen allerdings nicht gleichmäßig verteilt sind, ergibt sich eine deutlich andere Power Function. Dies ist auch zu erwarten, da die Power Function darstellt, wie gut die Verteilung der gegebenen Stützstellen \mathcal{X} für die feste Radiale Basisfunktion Φ ist. Beispielfhaft wird die Power Function für folgende neun verstreuten Stützstellen betrachtet, die nicht gleichmäßig verteilt sind (vgl. Abb. 23a). Die Power Function nimmt größere Werte an, als noch im vorherigen Beispiel. Dies insbesondere in den Bereichen, die weit von den Stützstellen entfernt sind (vgl. Abb. 23b). Dies passt zur Interpretation der Power Function.

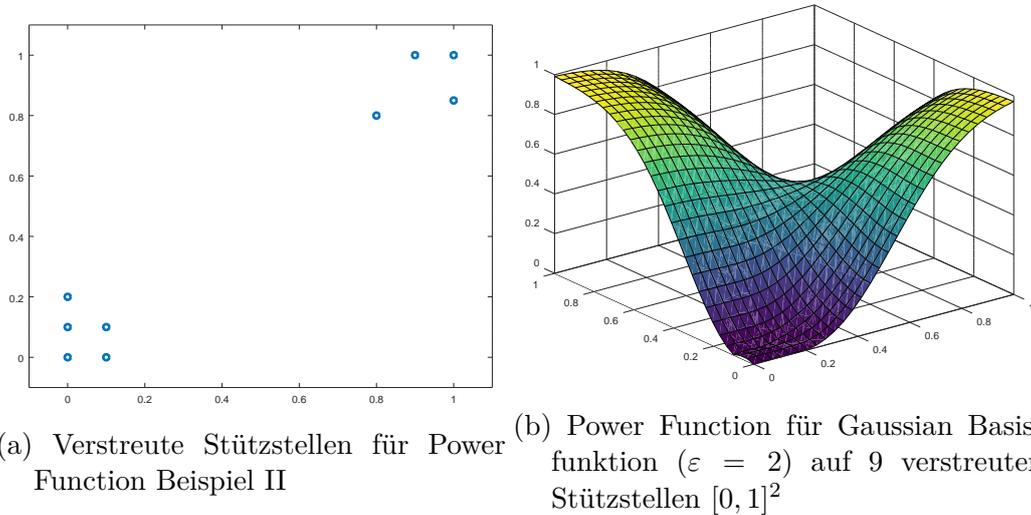


Abbildung 23: Beispiel Power Function II mit verstreuten Stützstellen [Programm: *BeispielPowerFunction.m*]

3.3 Fehlerabschätzung

In diesem Abschnitt wird nun eine Fehlerabschätzung für die Interpolation mit Radialen Basisfunktionen vorgestellt. Um die Abschätzung einzuführen, werden der Native Space und die Power Function, die in Kapitel 3.1 und 3.2 betrachtet wurden, benötigt.

3.3.1 Fehlerabschätzung für Funktionen in der Native Space

Die folgende Fehlerabschätzung (vgl. [8], S. 51) liefert eine punktweise Abschätzung für den Interpolationsfehler, also die Differenz zwischen der zu interpolierenden Funktion f , die an n Stützstellen bekannt ist, und der Interpolierenden \mathcal{P}_f . Die Interpolierende für die Funktion f ist an den n Stützstellen exakt. Für alle anderen Punkte $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \setminus \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ lässt sich im Allgemeinen nichts über das Verhalten der Interpolierenden sagen, da diese von den Stützstellen und dem Shape Parameter abhängt. Da die zu interpolierende Funktion f nur an den Stützstellen bekannt ist, werden Abschätzungen

benötigt, für die f nicht bekannt sein muss. Dies liefert folgendes Theorem (vgl. vgl. [8], S. 51 oder [14], S. 117).

Theorem 3.13 *Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet und $\Phi \in C(\Omega \times \Omega)$ positiv definit auf \mathbb{R}^d . Außerdem seien $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ gegeben Datenpunkte und \mathcal{P}_f bezeichne den Interpolanten der Funktion $f \in \mathcal{N}_\Phi(\Omega)$ auf \mathcal{X} . Dann gilt für jedes $\mathbf{x} \in \Omega$ mit der Native Space Norm von f*

$$|f(\mathbf{x}) - \mathcal{P}_f(\mathbf{x})| \leq P_{\mathcal{X},\Omega}(\mathbf{x}) \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}.$$

Beweis Nach Voraussetzung liegt f in der Native Space von Φ , deshalb gilt die reproduzierende Eigenschaft von Φ aus Definition 3.4

$$f(\mathbf{x}) = \langle f, \Phi(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}.$$

Für den Interpolant \mathcal{P}_f in kardinal Form gilt

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_f(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^n f(\mathbf{x}_i) u_i^*(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{i=1}^n u_i^*(\mathbf{x}) \langle f, \Phi(\cdot, \mathbf{x}_i) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} \\ &= \langle f, \sum_{i=1}^n u_i^*(\mathbf{x}) \Phi(\cdot, \mathbf{x}_i) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}. \end{aligned}$$

Dabei wird in der zweiten Zeile die reproduzierende Eigenschaft (wie oben) ausgenutzt. Die letzte Umformung folgt aus der Linearität bezüglich der Multiplikation eines Skalarprodukts und dass f nicht von der Summe abhängt.

Anschließend wird die Differenz zwischen der Funktion f und dem Interpolanten \mathcal{P}_f mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung abgeschätzt

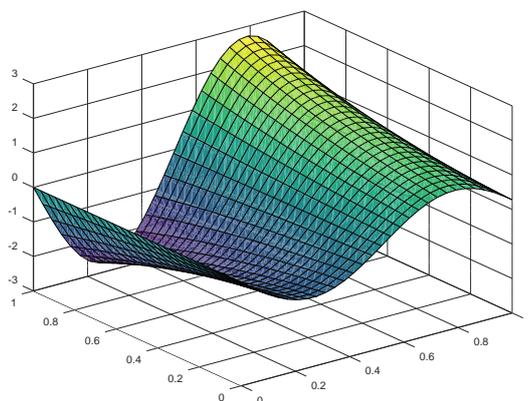
$$\begin{aligned}
|f(\mathbf{x}) - \mathcal{P}_f(\mathbf{x})| &= |\langle f, \Phi(\cdot, \mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} - \langle f, \sum_{i=1}^n u_i^*(\mathbf{x}) \Phi(\cdot, \mathbf{x}_i) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}| \\
&= |\langle f, \Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n u_i^*(\mathbf{x}) \Phi(\cdot, \mathbf{x}_i) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}| \\
&\leq \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} \|\Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{i=1}^n u_i^*(\mathbf{x}) \Phi(\cdot, \mathbf{x}_i)\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} \\
&= \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} P_{\mathcal{X}, \Omega}(\mathbf{x}).
\end{aligned}$$

Hier wird in der zweiten Zeile die Linearität des Skalarprodukts bezüglich der Addition ausgenutzt. Anschließend lässt sich der Interpolationsfehler mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung abschätzen und zum Schluss wird der Ausdruck durch eine Schreibweise der Power Function verkürzt. \square

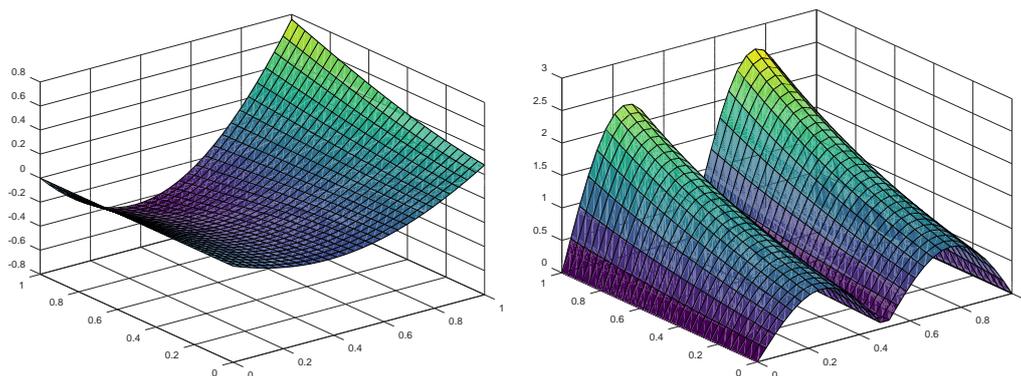
Im Folgenden wird ein Beispiel zur Veranschaulichung des Verhaltens der Interpolierenden und dem damit verbundenen Interpolationsfehler betrachtet. Dazu werden die Stützstellen, der Shape Parameter und die Verteilung der Daten der Interpolation verändert und anschließend wird der Interpolationsfehler analysiert. Der Shape Parameter gibt allgemein an, ob die Interpolierende eher flacher (geringer Shape Parameter) oder spitzer (größerer Shape Parameter) ist (vgl. [32], S. 193). Die Anzahl der Stützstellen ist für eine Interpolation von großer Bedeutung. Für wenige Stützstellen ist die zu interpolierende Funktion f nur an wenigen Punkten exakt bekannt. Aufgrund der wenigen Auswertungen von f kann die Interpolierende \mathcal{P}_f sehr stark von der ursprünglichen Funktion f abweichen. Dies passiert vor allem an den Punkten $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, an denen keine Stützstellen in unmittelbarer Nähe sind, weshalb die Verteilung der Daten auch eine große Rolle spielt. Dementsprechend sollte der Interpolationsfehler $|f - \mathcal{P}_f|$ kleiner werden, wenn mehr Stützstellen vorhanden sind und diese geeignet verteilt sind.

Beispiel 3.14

In diesem Beispiel wird die Funktion $f(x, y) = \exp(x) \cdot \sin(6y + \pi)$ mit Hilfe der Gaussian Basisfunktion $\Phi(\mathbf{x}) = \exp(-\varepsilon^2 \|\mathbf{x}\|^2)$ auf dem Intervall $[0, 1]^2$ interpoliert [Alle Interpolationen und Fehler wurden mit dem Programm *InterpolationGaussianGraph.m* erzeugt]. Die Funktion f ist in Abbildung 24 zu sehen.

Abbildung 24: $f(x, y) = \exp(x) \cdot \sin(6y + \pi)$

Zuerst wird die Funktion f mit der Gaussian Basisfunktion Φ , dem Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$ und 9 gleichverteilten Stützstellen auf $[0, 1]^2$ interpoliert.



(a) Interpolante

(b) Interpolationsfehler

Abbildung 25: Interpolation und Interpolationsfehler von f mit Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$ für Φ auf 9 gleichverteilten Punkten in $[0, 1]^2$

Abbildung 25 gibt die Interpolation (links) und den Interpolationsfehler (rechts), also die Differenz zwischen der exakten Funktion f und der Interpolierenden \mathcal{P}_f , an. Optisch ist sofort ein deutlicher Unterschied zwischen der Funktion f und der Interpolante \mathcal{P}_f zu erkennen. Es ist zu erkennen, dass das Maximum von f ungefähr dem Wert drei entspricht, wohingegen die Interpolante den Wert eins nicht überschreitet. An den neun gleichverteilten Stützstellen ist die Interpolation exakt, aber in den Zwischenräumen ist der Interpolationsfehler vergleichsweise enorm hoch (teilweise ist die Abweichung größer als zwei).

Nun liegt das Interesse in der Verringerung des Interpolationsfehlers und somit in der Verbesserung der Interpolation. Wie oben beschrieben, ist die Anzahl der Stützstellen für den Interpolationsfehler entscheidend, sodass nun die Anzahl der Stützstellen für die Interpolation erhöht wird. Abbildung 26 zeigt die Interpolation mit dem gleichen Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$, aber einer erhöhten Anzahl an Stützstellen.

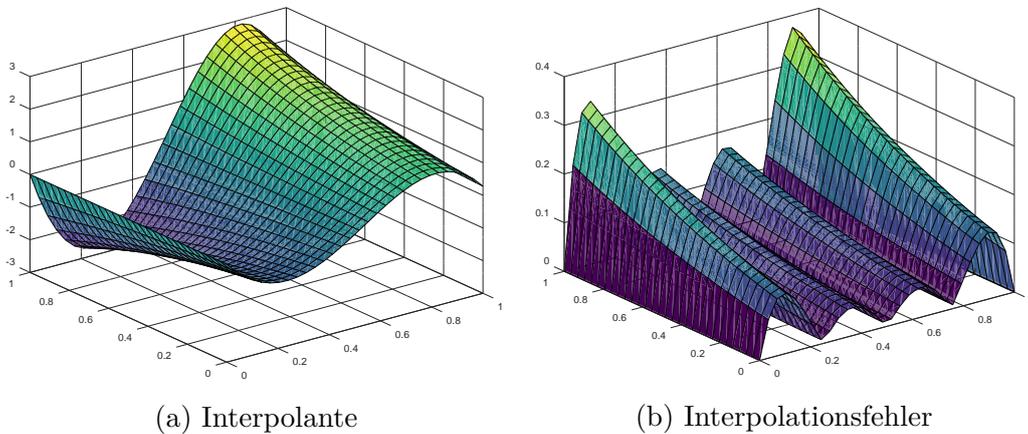


Abbildung 26: Interpolation und Interpolationsfehler von f mit Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$ für Φ auf 25 gleichverteilten Punkten in $[0, 1]^2$

Durch die Erhöhung von neun auf 25 gleichverteilte Stützstellen verbessert sich die Interpolante sichtbar. Die maximalen Werte der Interpolante in Abbildung 26 und der zu interpolierenden Funktion f liegen beide nah am

Wert drei, eine deutliche Verbesserung zu der ersten Interpolanten in Abbildung 25. Die Verbesserung zeigt sich auch in dem Interpolationsfehler. Für diesen gilt

$$|f(\mathbf{x}) - \mathcal{P}_f(\mathbf{x})| \leq 0,4 \quad \forall \mathbf{x} \in [0, 1]^2.$$

Für einen typischerweise kleinen Shape Parameter $\varepsilon < 1$ ist die Interpolation im Allgemeinen flach, wobei für $\varepsilon = 0$ die Interpolation sogar konstant ist ($\Phi(\mathbf{x}) = 1 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, vgl. [32], S. 193). Demzufolge kann auch eine Veränderung des Shape Parameters die Interpolation verbessern. Die 25 gleichverteilten Stützstellen werden beibehalten und der Shape Parameter ε wird von 0,5 auf zwei erhöht.

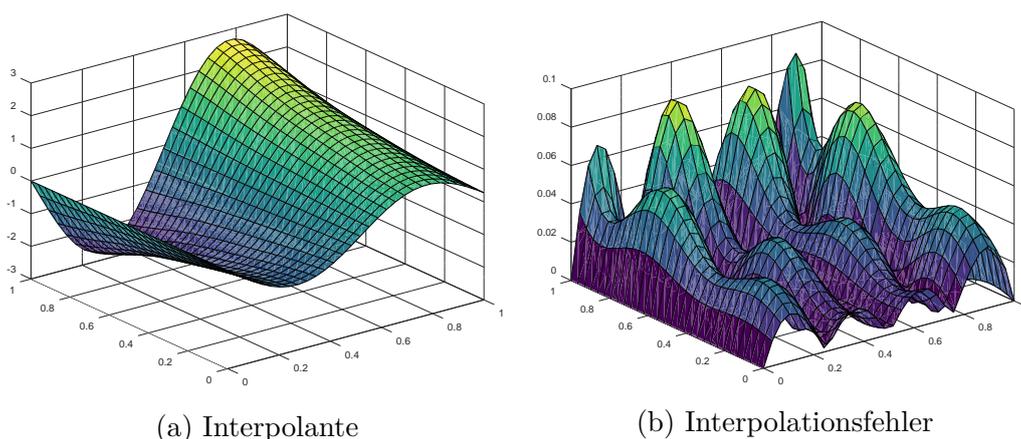


Abbildung 27: Interpolation und Interpolationsfehler von f mit Shape Parameter $\varepsilon = 2$ für Φ auf 25 gleichverteilten Punkten in $[0, 1]^2$

In Abbildung 27 ist, wie in den Graphiken zuvor, links die Interpolante zu sehen und auf der rechten Seite der Interpolationsfehler. Im Vergleich zu Abbildung 26 mit dem Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$ ist eine Verbesserung bezüglich des Interpolationsfehlers gut zu erkennen. Dieser überschreitet den Wert von 0,1 auf dem Gebiet $[0, 1]^2$ nicht und hat sich somit nochmals verringert.

Alternativ kann die Verteilung der Daten variiert werden, um den Interpolationsfehler zu verringern. Dazu wird wie in Abbildung 26 der Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$ der Gaussian Basisfunktion mit 25 Stützstellen betrachtet. Allerdings werden die Stützstellen nicht gleichverteilt, sondern entsprechen der folgenden, verstreuten, Verteilung.

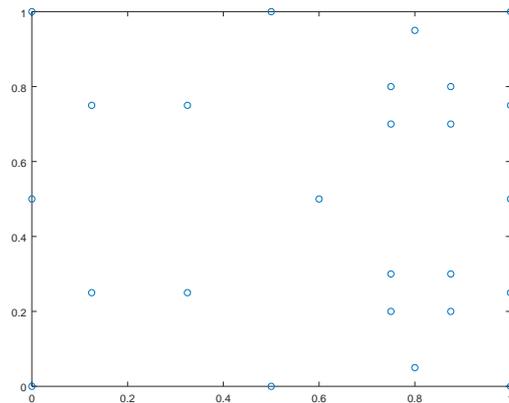


Abbildung 28: 25 Stützstellen in $[0, 1]^2$, die deterministisch nach den An- und Abstiegen der zu interpolierenden Funktion verteilt wurden

Dabei wurden die Stützstellen deterministisch nach dem Schema gewählt, dass sich mehr Stützstellen nah an den stärksten Anstiegen, beziehungsweise Abstiegen der Funktion f befinden und eher weniger Stützstellen in der Region sind, in der sich die zu interpolierende Funktion nur gering ändert. Durch die geänderte Verteilung der Daten ändert sich auch der Interpolationsfehler.

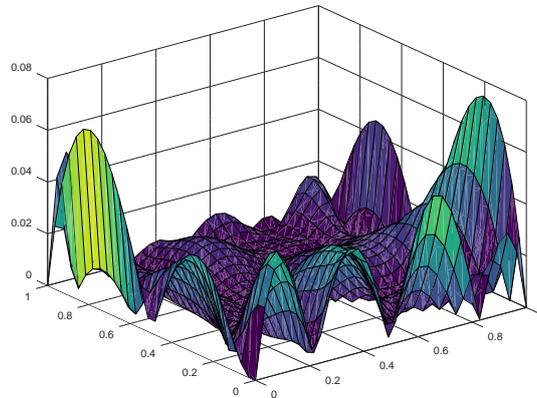


Abbildung 29: Interpolationsfehler von f mit Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$ für Φ auf 25 Stützstellen in $[0, 1]^2$ mit einer verstreuten Verteilung

Durch die Wahl der verstreuten Stützstellen in der Nähe der tendenziell starken An- und Abstiege kann der Interpolationsfehler im Vergleich zu den gleichverteilten Stützstellen aus Abbildung 26, erheblich verbessert werden. Der maximale Fehler der Interpolation konnte auf ein fünftel reduziert werden, sodass der punktweise Interpolationsfehler den Wert 0,08 nicht überschreitet.

Nachdem sowohl die Erhöhung des Shape Parameters von $\varepsilon = 0,5$ auf 2, als auch die geänderte Verteilung der Daten den Interpolationsfehler jeweils stark verringern konnten, liegt es nahe die beiden Methoden zu kombinieren um einen noch geringeren Interpolationsfehler zu erhalten. Dies ist allerdings nicht der Fall.

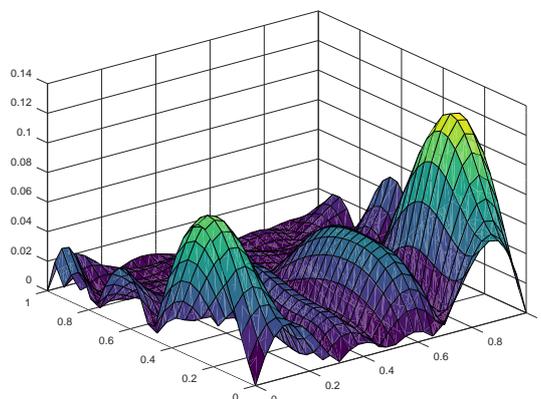


Abbildung 30: Interpolationsfehler von f mit Shape Parameter $\varepsilon = 2$ für Φ auf 25 Stützstellen in $[0, 1]^2$ mit einer verstreuten Verteilung

Der maximale Interpolationsfehler für die 25 deterministisch gewählten Stützstellen und den Shape Parameter $\varepsilon = 2$ beträgt circa 0,13. Damit ist der Fehler sowohl höher als der Fehler mit den 25 gewählten Stützstellen und Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$, als auch höher als der maximale Interpolationsfehler mit 25 gleichverteilten Stützstellen und dem Shape Parameter $\varepsilon = 2$. Zusammenfassen lassen sich die Ergebnisse in folgender Tabelle:

Max. Interpolationsfehler	Shape Par. $\varepsilon = 0.5$	Shape Par. $\varepsilon = 2$
9 gleichverteilte Stützstellen	2,6	2,45
25 gleichverteilte Stützstellen	0,4	0,09
81 gleichverteilte Stützstellen	A nicht invertierbar	0,006
25 verstreute Stützstellen ¹	0,08	0,13

Es ist deutlich zu erkennen, dass sich die Interpolation verbessert, wenn mehr Stützstellen genutzt werden. Zu bemerken ist, dass die Interpolation mit 81 Stützstellen und einem Shape Parameter $\varepsilon = 0,5$ mit *Octave* nicht möglich ist, da die Interpolationsmatrix A dann zu nahe an der Singularität ist und somit nicht invertiert werden kann (vgl. Kapitel 3.4).

¹s. Abbildung 28

Anhand von Beispiel 3.14 ist gut zu erkennen, wie der Shape Parameter, die Anzahl der Stützstellen und die Verteilung der Daten in die Interpolation hineinspielen. Je nachdem wie die zu interpolierende Funktion aussieht, kann es sinnvoll sein, den Shape Parameter höher oder geringer zu wählen (für Beispiel 3.14 mit 25 gleichverteilten Punkten ist der optimale Shape Parameter $\varepsilon^* \approx 1,7$). Außerdem sollte klar sein, dass die Anzahl der Stützstellen und deren Verteilung auch Auswirkung auf die Interpolation hat.

Darauf aufbauend stellt sich die Frage, wieso nicht möglichst viele Stützstellen gewählt werden. Dies lässt sich durch zwei Aussagen beantworten. Zum einen muss an den Stützstellen der Funktionswert der zu interpolierende Funktion exakt bekannt sein, womit typischerweise hoher Aufwand verbunden ist, da die Funktion im Allgemeinen nicht bekannt ist (sonst wäre die Interpolation sinnlos). Auf der anderen Seite spielt die Anzahl der Stützstellen in die Kondition der Interpolationsmatrix A ein und beeinflusst damit auch die Stabilität des Interpolationsproblems. In wie fern dies geschieht, wird in dem folgenden Kapitel thematisiert.

3.4 Stabilität und Kondition

Nachdem die Fehlerabschätzungen eingeführt wurden, stellt sich die Frage, wie sich die Stabilität und Kondition für die Interpolation mithilfe Radialer Basisfunktionen verhält. Eine Möglichkeit um die numerische Stabilität einer Interpolation zu messen, ist die Betrachtung der Konditionszahl. In dieser Arbeit wird dafür die Matrix A der Radialen Basisfunktion mit den Einträgen $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ betrachtet (vgl. [39] und [54]).

Aus Kapitel zwei ist bekannt, dass Radiale Basisfunktionen bedingt positiv semidefinit sind und die zugehörige Interpolationsmatrix A dementsprechend positiv semidefinit ist. Für positiv definite Matrizen A lässt sich die

Konditionszahl über die Eigenwerte berechnen (vgl. [1], S. 80), weshalb im Folgenden das Augenmerk auf positiv definite Radiale Basisfunktionen gelegt wird, wie zum Beispiel die Gaussian, Inverse Quadric oder Inverse Multiquadric RBF (vgl. Kapitel 2).

Definition 3.15 (Konditionszahl) Für eine positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ lässt sich die Konditionszahl über das Verhältnis des größten und kleinsten Eigenwerts berechnen. Es gilt

$$\text{cond}(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}.$$

Im Folgenden sollen Abschätzungen für den größten und kleinsten Eigenwert hergeleitet werden. Dabei ist insbesondere eine Abschätzung für den kleinsten Eigenwert wichtig, denn für $\lambda_{\min} \rightarrow 0$ ist die Interpolationsmatrix A sehr schlecht konditioniert und somit kann das Interpolationsproblem große Fehler aufweisen (vgl. [14], S. 137 und [54], S. 206).

Zuerst wird der größte Eigenwert der Interpolationsmatrix nach oben abgeschätzt, da hierfür die Herleitung auf den bisherigen Resultaten und dem Theorem von Gerschgorin (vgl. [53], S. 719) beruht.

Theorem 3.16 (Gerschgorin) Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine quadratische Matrix. Dann liegen alle Eigenwerte von A in der Vereinigung der Gerschgorin Kreise $\cup_{i=1}^n G_i$, wobei

$$G_i = \left\{ z : |z - A_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |A_{ij}| \right\} \quad \forall 1 \leq i \leq n.$$

Für eine beliebige quadratische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ können die Eigenwert komplexwertig sein. Da in diesem Kapitel allerdings die positiv definite Interpolationsmatrix A mit Einträgen $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ betrachtet wird, gilt für alle Eigenwerte $\lambda_i \in \mathbb{R}_{>0}$ und sind somit reellwertig.

Aus Theorem 3.16 ist bekannt, dass jeder Eigenwert in der Vereinigung der Geschgorin Kreise liegt. Insbesondere gilt dies auch für den größten Eigenwert λ_{\max} . Also folgt für ein $i \in \{1, \dots, n\}$

$$|\lambda_{\max} - A_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |A_{ij}|.$$

Wird der Betrag aufgelöst, lässt sich der größte Eigenwert nach oben abschätzen, denn es gilt für ein $i \in \{1, \dots, n\}$

$$\lambda_{\max} \leq \sum_{j=1}^n |A_{ij}| \leq n \max_{i,j} |A_{ij}| = n \max_{\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathcal{X}} |\Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)|.$$

Mit der aus Kapitel 2 bekannten Ungleichung

$$|\Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)| \leq \Phi(\mathbf{0}) \quad \forall \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \mathcal{X}$$

lässt sich der größte Eigenwert für die Gaussian, Inverse Quadric und Inverse Multiquadric RBF durch die Anzahl der Stützstellen

$$\lambda_{\max} \leq n \underbrace{\Phi(\mathbf{0})}_{=1 \text{ für GA, IQ und IMQ RBF}} = n$$

abschätzen. Für RBFS gilt im Allgemeinen nicht $\Phi(\mathbf{0}) = 1$, sodass der größte Eigenwert durch $n\Phi(\mathbf{0})$ abgeschätzt werden muss. Damit die Interpolationsmatrix typischerweise gut konditioniert ist, ist vor allem die Abschätzung nach unten für den kleinsten Eigenwert von besonderer Bedeutung, denn einige numerische Tests zeigten, dass die Abschätzung für den größten Eigenwert kein Problem hervorruft.

Um den kleinsten Eigenwert der Interpolationsmatrix geeignet abschätzen zu können, wird ein Theorem eingeführt (vgl. [14], S. 136), das den Rayleigh Quotienten benötigt.

Definition 3.17 (Rayleigh Quotient) *Der kleinste Eigenwert einer symmetrischen Matrix kann mittels des Rayleigh Quotienten*

$$\lambda_{\min} = \min_{\mathbf{c} \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}} \frac{\mathbf{c}^T A \mathbf{c}}{\mathbf{c}^T \mathbf{c}}$$

berechnet werden.

Mit dieser Definition lässt sich folgendes Theorem formulieren.

Theorem 3.18 *Seien $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ Punkte in \mathbb{R}^s und $\Phi : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}$ streng positiv definit. Außerdem sei A die Interpolationsmatrix mit Einträgen $A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ und \mathbf{c} der resultierende Vektor des Gleichungssystems $A\mathbf{c} = \mathbf{y}$.*

Vorausgesetzt der Vektor \mathbf{c} erfüllt $\sum_{j=1}^n c_j = 0$ und die Ungleichung

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_i c_j A_{ij} \geq \theta \|\mathbf{c}\|_2^2$$

ist für $\theta \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ erfüllt, dann folgt mit dem Rayleigh Quotient

$$\lambda_{\min} \geq \theta.$$

Mit Hilfe des Theorems lässt sich die folgende Abschätzung für die Konditionszahl treffen:

$$\text{cond}(A) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \leq \frac{n\Phi(0)}{\theta}.$$

Dabei ist anzumerken, dass θ , also die Abschätzung für den kleinsten Eigenwert, im Allgemeinen nicht einfach bestimmt werden kann, sodass weitere mathematische Hilfsmittel benötigt werden.

Bemerkung 3.19 (λ_{\min} bestimmen)

Um auf konkrete Werte für θ zu kommen, bedarf es einer Erweiterung der vorgestellten Abschätzung. Diese Erweiterung stützt sich auf die Fourier Trans-

formation der betrachteten Radialen Basisfunktion Φ . Des Weiteren wird die Separation Distance

$$q_{\mathcal{X}} = \frac{1}{2} \min_{i \neq j} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2$$

benötigt. Eine genaue Darstellung lässt sich in Narcowich und Ward [33], S. 78 ff. finden. Mit dessen Hilfe lässt sich eine untere Grenze für λ_{\min} für die Gaussian Basisfunktion bestimmen:

Lemma 3.20 (Untere Grenze λ_{\min}) *Nach Fasshauer [14], S. 137 und Wendland [54], S. 210 gilt folgende Abschätzungen für λ_{\min} bezüglich der Radialen Basisfunktion $\Phi(\mathbf{x}) = e^{-\varepsilon^2 \|\mathbf{x}\|^2}$:*

$$\lambda_{\min} \geq C_s (\sqrt{2}\varepsilon)^{-s} e^{-\frac{40.71s^2}{(q_{\mathcal{X}}\varepsilon)^2}} q_{\mathcal{X}}^{-s},$$

wobei

$$M_s = 12 \left(\frac{\pi \Gamma^2(\frac{s+2}{2})}{9} \right)^{\left(\frac{1}{s+1}\right)} \leq 6.38s \qquad C_s = \frac{1}{2\Gamma(\frac{s+2}{2})} \left(\frac{M_s}{\sqrt{8}} \right)^s.$$

Für einen fixen Shape Parameter ε geht somit die untere Grenze von λ_{\min} exponentiell gegen Null, wenn die Separation Distance $q_{\mathcal{X}}$ gegen Null geht. Das Wachstum von λ_{\max} ist von Ordnung n , daher wächst die Konditionszahl von A exponentiell mit kleinerer Fill distance. Andererseits entwickelt sich die Konditionszahl ähnlich, wenn der Shape Parameter ε sinkt, während die Stützstellen gleich bleiben. Dies führt dementsprechend zu Problemen, wenn ε klein gewählt wird (vgl. Kapitel 3.5).

3.5 Fehlerminimierung mit Hilfe des Shape Parameters

Zum Abschluss des Themas Error Estimates on RBFs wird nun noch ein Blick auf die Fehlerminimierung mit Hilfe des Shape Parameters geworfen (vgl. [14]). Der Shape Parameter beeinflusst die Form der zugrunde liegenden Radialen Basisfunktion und ist dementsprechend relevant für die Interpolationsfehler. Daher werden im Folgenden Methoden betrachtet, um den Shape Parameter ε der RBF so zu bestimmen, dass der maximale Interpolationsfehler minimiert wird. In der Literatur ist häufig zu finden, dass der Shape Parameter möglichst klein gewählt werden soll (vgl. [14], S. 138). Dabei ist allerdings zu beachten, dass ein Konflikt zwischen theoretischer Genauigkeit und numerischer Stabilität entsteht wenn der Shape Parameter klein gewählt wird (vgl. Kapitel 3.4). Je kleiner der Shape Parameter gewählt wird, desto größer wird im Allgemeinen die Konditionszahl der Matrix A . Dies liegt daran, dass die verschiedenen Zeilen der Interpolationsmatrix immer ähnlicher werden und somit die Matrix fast singular wird (vgl. [39], S. 251). Es gibt verschiedene Methoden um diesem Problem entgegenzuwirken, beispielsweise über Tschebyscheff Polynome ([17] S. 858 ff.). In dieser Projektarbeit liegt das Augenmerk allerdings auf einer Wahl des Shape Parameters, sodass es zu keinen Stabilitätsproblemen kommt. Der hier genutzte Indikator für Stabilitätsprobleme ist die Ausgabe der *Octave* Warnung "matrix singular to machine precision", wenn die Matrix A invertiert wird. Das heißt, die Shape Parameter ε , für die diese Warnung beim Invertieren ausgegeben wird, werden nicht weiter betrachtet.

Die Idee den besten Shape Parameter zu finden beruht darauf, Interpolationen mit unterschiedlichen Shape Parametern durchzuführen und dann den Shape Parameter zu nutzen, mit dem der geringste maximale Interpolationsfehler erzielt wurde. Den expliziten Interpolationsfehler zu berechnen ist

allerdings nur möglich, wenn die zu interpolierende Funktion f bekannt ist. Daher werden im Folgenden zwei Methoden beschrieben, die die Funktion f nicht exakt kennen müssen.

3.5.1 Die Power Function als Indikator

Für diese Methode wird sich die aus Abschnitt 3.3 bekannte Abschätzung

$$|f(\mathbf{x}) - P_f(\mathbf{x})| \leq P_{\Phi, \mathcal{X}}(\mathbf{x}) \|f\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}$$

zu Nutze gemacht. Sinkt der Wert der Power Function $P_{\Phi, \mathcal{X}}(\mathbf{x})$ der rechten Seite, so wird im Allgemeinen auch die linke Seite, aufgrund der gültigen Ungleichung, kleiner. Daher wird für diese Methode der Shape Parameter ε so gewählt, dass die Maximumsnorm der Power Function minimal ist. Die Maximumsnorm wird für gleichmäßige Gitter Punkte auf Ω berechnet.

Die Abbildung 31 stellt die Maximumsnorm der Power Function für die Gaussian Basisfunktion mit unterschiedlichen Shape Parametern ε dar. Die verschiedenen Anzahlen der Stützstellen n betragen 9, 25 und 81. Der optimale Shape Parameter bezüglich der Power Function wird durch das Minimum des jeweiligen Graphen dargestellt. Für 25 Stützstellen wäre dieser beispielsweise bei $\varepsilon = 0,83$. Zu bemerken ist, dass sehr kleine Shape Parameter häufig ausgeschlossen werden müssen, da für diese Parameter die Interpolationsmatrix A nicht mehr numerisch invertierbar ist [Programm: *ShapeParameter-mitPowerfunction.m* in Anlehnung an [14] *Powerfunction2D*].

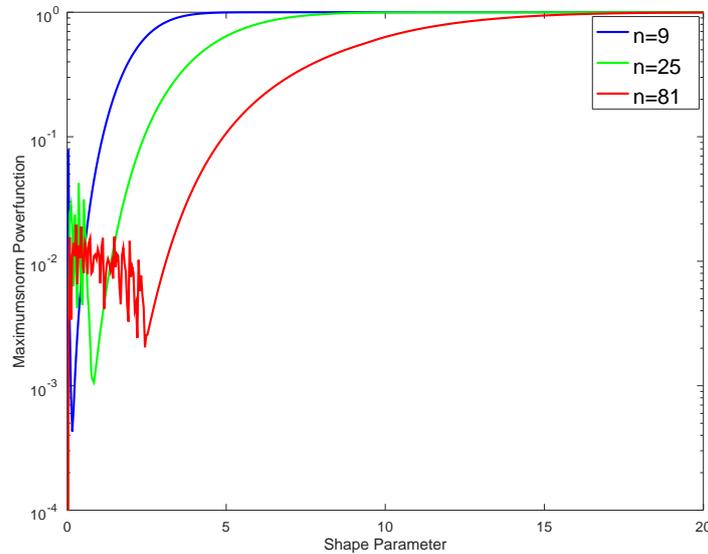


Abbildung 31: Maximumsnorm der Power Function für unterschiedliche Anzahl an Stützstellen n und Shape Parameter ε

Die Power Function als Indikator zur Wahl des optimalen Shape Parameters ε hat allerdings einen großen Nachteil. Zwar lässt sich ein optimaler Shape Parameter für die Power Function bestimmen, allerdings bedeutet dies nicht automatisch, dass dieser auch optimal für den Interpolationsfehler ist. Dies lässt sich leicht an der Fehlerabschätzung

$$|f(\mathbf{x}) - P_f(\mathbf{x})| \leq P_{\Phi, \mathcal{X}}(\mathbf{x}) \|f\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}$$

erkennen. Zwar wird mit dieser Methode die Power Function minimiert, allerdings ist $\|f\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}$ auch von der Wahl des Shape Parameters ε abhängig und somit liefert der optimale Shape Parameter für die Power Function nicht zwangsläufig einen guten Parameter bezüglich des Interpolationsfehlers, da $\|f\|_{\mathcal{N}_{\Phi}(\Omega)}$ für diesen Shape Parameter größer werden kann. Um diesem Problem entgegen zu wirken wird eine zweite Strategie betrachtet.

3.5.2 Leave-One-Out-Kreuzvalidierung

Nutze das aus der Statistik bekannte Leave-One-Out Kreuzvalidierungsverfahren (vgl. [38], S. 201 ff.) um einen guten Shape Parameter zu finden. Dieses Verfahren beruht darauf, dass für jede Stützstelle jeweils eine Interpolation für die $n - 1$ anderen Stützstellen durchgeführt wird. Hierbei wird bei jeder Interpolation eine Stützstelle ausgelassen und der Interpolationsfehler an dieser Stützstelle gemessen. Genauer seien $(\mathbf{x}_k, f(\mathbf{x}_k))$ die Daten der k -ten Stützstelle, die in diesem Durchgang der Kreuzvalidierung ausgelassen werden. Des Weiteren bezeichne $\mathcal{P}_f^{[k]}$ den Interpolanten der Datenmengen $\{f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_{k-1}), f(\mathbf{x}_{k+1}), \dots, f(\mathbf{x}_n)\}$ mit

$$\mathcal{P}_f^{[k]}(\mathbf{x}) = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^n c_i \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i),$$

sodass

$$\mathcal{P}_f^{[k]}(\mathbf{x}_i) = f(\mathbf{x}_i), \quad \forall i = 1, \dots, k-1, k+1, \dots, n,$$

gilt. Der Fehler an Stützstelle \mathbf{x}_k , die nicht in der Interpolationen genutzt wurde, wird durch

$$E_k = f(\mathbf{x}_k) - \mathcal{P}_f^{[k]}(\mathbf{x}_k)$$

definiert, wobei anzumerken ist, dass $f(\mathbf{x}_k)$ bekannt ist (\mathbf{x}_k Stützstelle), obwohl die Funktion f nicht exakt bekannt sein muss.

Die Qualität des Shape Parameters wird anschließend mit der Maximumnorm des Vektors $\mathbf{E} = [E_1, \dots, E_n]^T$ gemessen. Der "beste" Shape Parameter ist dann derjenige mit der geringsten Maximumnorm des Fehlervektors \mathbf{E} . Die Abbildung 32 stellt die Maximumnorm des Interpolationsfehler für die Gaussian Basisfunktion mit unterschiedlichen Shape Parametern ε für

n gleichverteilte Punkte in $[0, 1]^2$, basierend auf der Kreuzvalidierung der Funktion $f(x, y) = (x - 0,5)^2 + (y - 0,5)^2$, das Programm: *LOOKV.m* in Anlehnung an [14] LOOCV2D. Methodik nach Rippa [38] S. 201].

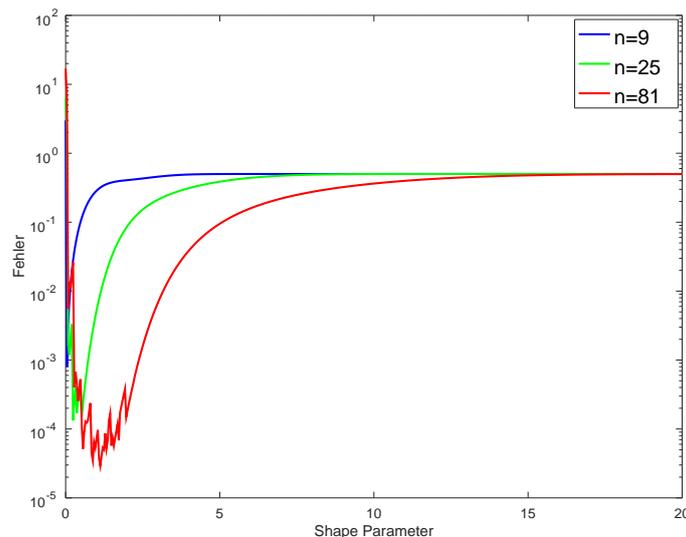


Abbildung 32: Maximumsnorm des Fehlervektors \mathbf{E} für unterschiedliche Shape Parameter und Anzahlen an Stützstellen bezüglich $f(x, y) = (x - 0,5)^2 + (y - 0,5)^2$

Im Gegensatz zu der auf der Power Function beruhenden Methode wird bei der Leave-One-Out-Kreuzvalidierung der exakte Interpolationsfehler an den jeweils ausgelassenen Stützstellen betrachtet und nicht nur der Wert der Power Function. Konkret liefert die Kreuzvalidierung die Wahl des Shape Parameters $\varepsilon = 0.489$ für 25 gleichverteilte Stützstellen. Die Methode mit Hilfe der Power Function lieferte $\varepsilon = 0.83$, daher werden die zugehörigen beiden Interpolationsfehler miteinander und mit dem Fehler einer Interpolation mit Shape Parameter $\varepsilon = 3$ verglichen.

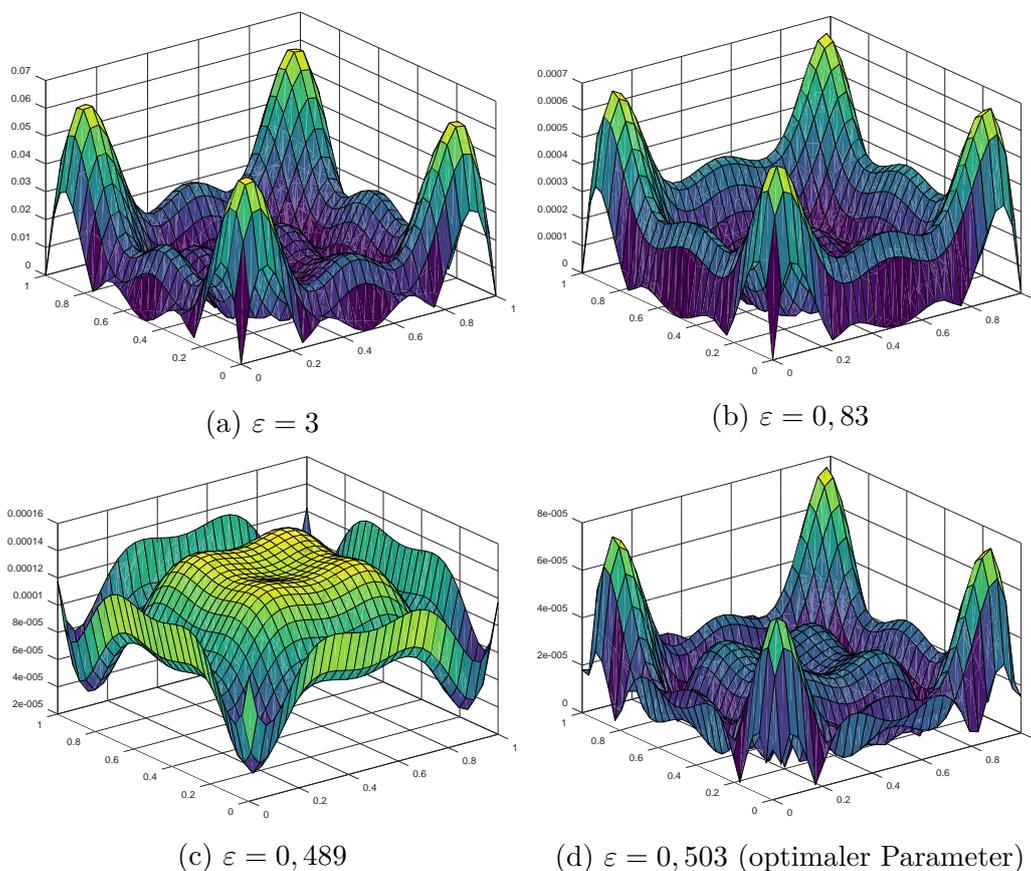


Abbildung 33: Interpolationsfehler von $f(x, y) = (x - 0,5)^2 + (y - 0,5)^2$ mit Gaussian Basisfunktion mit Shape Parameter $\varepsilon = 3$, $\varepsilon = 0,83$, $\varepsilon = 0,489$ und $\varepsilon = 0,503$ auf 25 gleichverteilten Punkten in $[0, 1]^2$

Sofort ist zu erkennen, dass der Interpolationsfehler bei einer Wahl des Shape Parameters mit $\varepsilon = 0,83$ bzw. $\varepsilon = 0,489$ deutlich kleiner ist, als bei einer Interpolation mit dem deterministisch gewählten Shape Parameter $\varepsilon = 3$. Der optimale Parameter ist $\varepsilon^* = 0,503$ für die Interpolation von $f(x, y) = (x - 0,5)^2 + (y - 0,5)^2$ mit der Gaussian Basisfunktionen auf 25 gleichverteilten Punkten auf $[0, 1]^2$. Der durch die Kreuzvalidierung ermittelte Parameter liefert für dieses Beispiel also einen nahezu optimalen Shape Parameter. Auch die erste Methode mit der Power Function liefert einen Shape Parameter ε , dessen Interpolationsfehler sehr gering ist. Dennoch lie-

fert für dieses Beispiel die Leave-One-Out-Kreuzvalidierung einen besseren Shape Parameter als die Methode mit der Power Function. Diese Aussage lässt sich auch generalisieren, denn durch diverse Tests von Fasshauer (vgl. [14], S. 146) lässt sich die allgemeine Aussage aufstellen, dass die Leave-One-Out-Kreuzvalidierung typischerweise bessere Shape Parameter liefert, dessen Interpolationsfehler geringer sind als die zugehörigen Interpolationsfehler mit der Methode der Power Function.

4 RBF-Finite Differenzen

Dieses Kapitel behandelt die RBF-Finite Differenzen Methode. Die RBF-Finite Differenzen Methode ist ein numerisches Verfahren, um mit Hilfe Radialer Basisfunktionen partielle und gewöhnliche Differentialgleichungen zu lösen. Zu Beginn möchten wir die Finite Differenzen Methode, die als numerisches Verfahren zur Lösung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen etabliert ist, einführen und anhand eines Beispiels weiter erläutern. Dieses Verfahren benötigt jedoch ein strukturiertes Gitter, was uns motiviert die Radialen Basisfunktionen zu betrachten. Wir stellen zunächst das Kollokationsverfahren vor und die jeweiligen Methoden, dieses anzuwenden. Da dieses Verfahren jedoch einen sehr hohen Rechenaufwand benötigt, gehen wir dann zur RBF-Finite Differenzen Methode über. Mit Hilfe dieser Methode wollen wir Differentialoperatoren approximieren und dieses anhand eines Beispiels weiter ausführen. Abschließend möchten wir mittels numerischer Simulationen dieses Verfahren verifizieren.

4.1 Einführung Finite Differenzen

In diesem Kapitel möchten wir die Finite Differenzen Methode nach [30] einführen und diese anhand eines Beispiels erläutern. Der Einfachheit halber beschränken wir uns auf den eindimensionalen Fall. Dieses Verfahren zur Lösung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen basiert auf der Idee, die Ableitung entsprechend zu approximieren, so dass

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x} \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

für ausreichend kleines h gilt. Analog lassen sich so auch weitere Ableitungen approximieren.

Dementsprechend möchten wir folgende Definitionen einführen

Definition 4.1 Sei $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und $x, h \in \mathbb{R}$, dann definieren wir:

- Vorwärtsdifferenzenquotient: $\Delta_+ u(x) := \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \approx u'(x)$.
- Rückwärtsdifferenzenquotient: $\Delta_- u(x) := \frac{u(x) - u(x-h)}{h} \approx u'(x)$.
- Zentraler Differenzenquotient:

$$\delta u(x) := \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} \approx u'(x).$$

Mit Hilfe der Taylor-Entwicklung lässt sich die Fehlerordnung bestimmen.

Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x)}{\partial x} &= \Delta_+ u(x) + O(h), \\ \frac{\partial u(x)}{\partial x} &= \Delta_- u(x) + O(h), \\ \frac{\partial u(x)}{\partial x} &= \delta u(x) + O(h^2). \end{aligned}$$

Dementsprechend werden wir im Folgenden den zentralen Differenzenquotienten verwenden.

Wir möchten nun die Methode anhand eines einfachen Beispiels erläutern. Wir betrachten das folgende Problem:

$$u''(x) = f(x), \quad 0 < x < 1, \quad u(0) = u_a, \quad u(1) = u_b.$$

1) Wir zerlegen das zu berechnende Gebiet in äquidistante Punkte (x_0, \dots, x_n) mit

$$x_i = ih \quad \forall i \in \{0, \dots, n\}, \quad h = \frac{1}{n}.$$

2) Wir approximieren durch Finite Differenzen

$$f(x_i) = u''(x_i) \approx \frac{u(x_i - h) - 2u(x_i) + u(x_i + h)}{h^2}.$$

3) Lösen des linearen Gleichungssystems:

$$\begin{bmatrix} -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & \frac{1}{h^2} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{1}{h^2} & -\frac{2}{h^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) - \frac{u_a}{h^2} \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \\ f(x_{n-2}) \\ f(x_{n-1}) - \frac{u_b}{h^2} \end{bmatrix}.$$

Nun möchten wir die Finite Differenzen Methode und ihre Fehlerabschätzung zur analytischen Lösung an einem konkreten Beispiel betrachten.

Beispiel 4.2

Finite Differenzen Verfahren mit 40 Knoten für:

$$f(x) = u''(x) = -\cos(x) \quad u(0) = 1, \quad u(2\pi) = 1 \quad \text{auf } [0, 2\pi]$$

Wir verwenden eine Stencilgröße von 3 und erhalten folgende Approximationen [Programm: *Finite_Differenzen.py*].

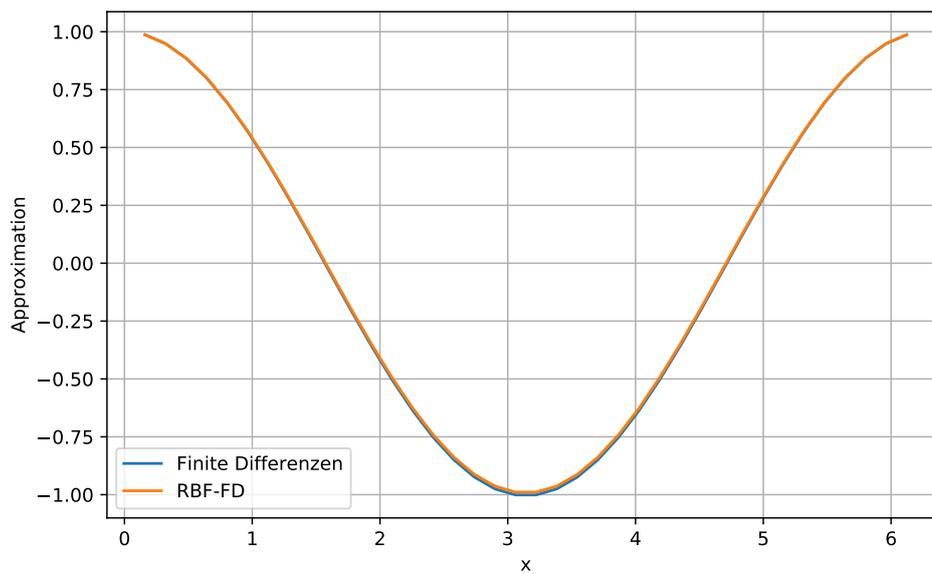


Abbildung 34: Approximation mittels Finite Differenzen und RBF-Finite Differenzen

Wir sehen, dass die Finite Differenzen Methode eine gute Approximation für unsere Differentialgleichung darstellt. Analog dazu verwenden wir für das gleiche Beispiel die RBF-Finite Differenzen Methode mit der Inverse Quadratic RBF-Funktion und sehen, dass auch diese Methode eine gute Approximation liefert. Vergleichen wir nun den Fehler beider Approximationen zur analytischen Lösung $u(x) = \cos(x)$, können wir erkennen, dass sich die Fehler beider Methoden ähnlich verhalten. Jedoch weicht die Finite Differenzen Methode mit einem maximalem Fehler von etwa 0.004325 deutlich geringer von der analytischen Lösung u ab, als die RBF-FD Methode mit einem maximalem Fehler von 0.007941.

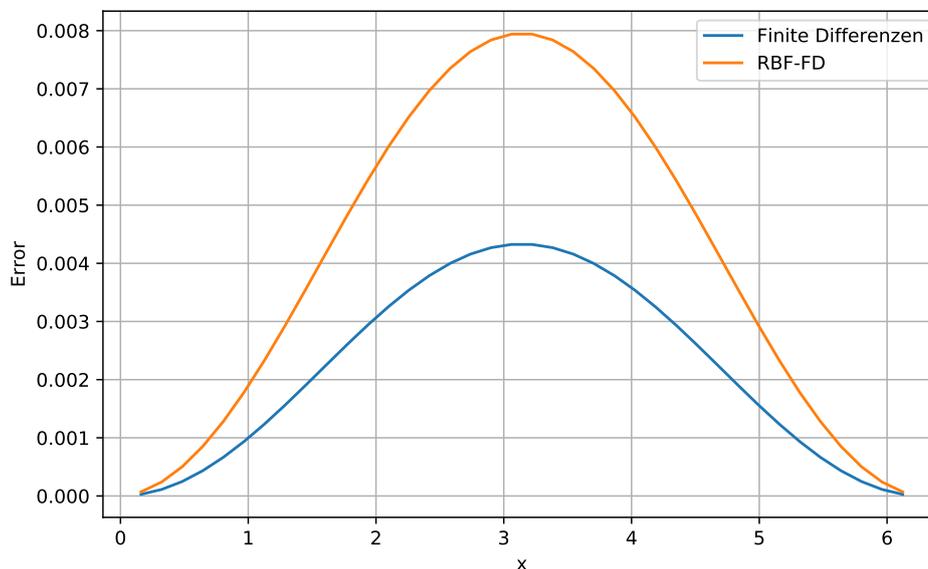


Abbildung 35: Fehler der Approximation mittels Finite Differenzen und RBF-Finite Differenzen

4.2 RBF-Finite Differenzen

Ein großes Problem der Finite Differenzen Methode ist, dass dieses ein strukturiertes Gitter benötigt. Zudem ist der Rechenaufwand sehr hoch für einen geringen Abstand zwischen den Knoten. Außerdem ist das Gleichungssystem zum Lösen der Finite Differenzen nicht immer unbedingt lösbar. Dies motiviert uns im Folgenden verschiedene Verfahren zu betrachten, welche auf den RBFs basieren. Die Kernidee dieser Verfahren ist es, die Lösung durch Linearkombinationen differenzierbarer RBF-Funktionen zu approximieren. Wir betrachten zunächst das Kollokationsverfahren nach [29] und die verschiedenen Methoden für deren Anwendung. Anschließend gehen wir zu der RBF-Finite Differenzen Methode über nach [18], [35] und [58]. Abschließend wollen wir noch die Ghost-Node Strategy nach [58] einführen, welche

Neumann-Randwertproblem mit Hilfe von Knoten außerhalb der gegebenen Menge löst.

4.2.1 Kollokationsverfahren

Das Kollokationsverfahren ist ein numerisches Verfahren zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen, welches keine Einteilung in Elemente oder strukturierte Gitter benötigt. Insgesamt unterscheidet man zwischen drei Methoden, um dieses Verfahren anzuwenden.

Wir betrachten im Folgenden ein Dirichlet-Randwertproblem auf dem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und dem Rand des Gebiets $\partial\Omega$ mit

$$\begin{aligned}\mathcal{L}u(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega, \\ u(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) \quad \text{on } \partial\Omega,\end{aligned}$$

wobei \mathcal{L} ein Differentialoperator und $\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|)$ eine RBF sei.

Wir diskretisieren Ω mittels N Punkte, wobei N_I die Anzahl der inneren Punkte $\{\mathbf{x}_i : i = 1, \dots, N_I\}$ und N_B die Anzahl der Punkte am Rand $\{\mathbf{x}_i : i = N_I + 1, \dots, N_I + N_B = N\}$.

Wie bereits erwähnt existieren drei verschiedene Methoden, um das Kollokationsverfahren anzuwenden:

1) Einfache Methode

Sei die RBF-Approximation von $u(\mathbf{x})$ gegeben durch

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|_2), \quad (43)$$

wobei diese folgende Gleichungen erfüllen soll:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}s(\mathbf{x}_i) &= \sum_{j=1}^N \lambda_j \mathcal{L}\phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2) = f(\mathbf{x}_i) \quad i = 1, \dots, N_I, \\ s(\mathbf{x}_i) &= \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2) = g(\mathbf{x}_i) \quad i = N_I + 1, \dots, N.\end{aligned}$$

Dies liefert folgendes Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}\phi \\ \phi \end{bmatrix} [\boldsymbol{\lambda}] = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix},$$

womit sich die Koeffizienten $\{\boldsymbol{\lambda}\}_{j=1}^N$ berechnen lassen. Diese Matrix ist in seltenen Fällen singular. Deswegen betrachten wir eine weitere Methode.

2) Symmetrische Methode

Diese Methode stellt sicher, dass die Matrix nicht-singular ist. Die RBF Approximation differenziert zwischen der Wahl des zugehörigen Differentialoperators an den jeweiligen Knoten und wir erhalten

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N_I} \lambda_j \mathcal{L}\phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|) + \sum_{j=N_I+1}^N \lambda_j \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|). \quad (44)$$

Die Methode liefert folgende Gleichungen

$$\begin{aligned}\mathcal{L}s(\mathbf{x}_i) &= \sum_{j=1}^{N_I} \lambda_j \mathcal{L}^2\phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) + \sum_{j=N_I+1}^N \lambda_j \mathcal{L}\phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) \\ &= f(\mathbf{x}_i) \quad i = 1, \dots, N_I, \\ s(\mathbf{x}_i) &= \sum_{j=1}^{N_I} \lambda_j \mathcal{L}\phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) + \sum_{j=N_I+1}^N \lambda_j \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|) \\ &= g(\mathbf{x}_i) \quad i = N_I + 1, \dots, N\end{aligned}$$

und somit folgendes Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}^2\phi & \mathcal{L}\phi \\ \mathcal{L}\phi & \phi \end{bmatrix} [\boldsymbol{\lambda}] = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}.$$

3) Einfache Methode mit PDE am Rand

Da viele Interpolationsmethoden besonders schlecht am Rand performen, ist es sinnvoll mehr Informationen über das Verhalten am Rand in die Approximation einfließen zu lassen. Dementsprechend sollen Punkte am Rand die Randbedingung und PDE Bedingung erfüllen. Dafür fügen wir weitere Punkte hinzu die außerhalb von Ω liegen. Wir betrachten somit die Stützstellen

$$\mathbf{z}_i = \begin{cases} \mathbf{x}_i, & i = 1, \dots, N \\ \text{ein Punkt außerhalb von } \Omega, & i = N + 1, \dots, N + N_B \end{cases}.$$

Die Interpolante hat nun die Form

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N+N_B} \lambda_j \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{z}_j\|_2).$$

mit Gleichungen

$$\begin{aligned} \mathcal{L}s(\mathbf{x}_i) &= \sum_{j=1}^N \lambda_j \mathcal{L}\phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{z}_j\|_2) = f(\mathbf{x}_i) \quad i = 1, \dots, N, \\ s(\mathbf{x}_i) &= \sum_{j=1}^N \lambda_j \phi(\|\mathbf{x}_i - \mathbf{z}_j\|_2) = g(\mathbf{x}_i) \quad i = N_I + 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Die Struktur der Matrix ist gleich der Matrix der einfachen Methode, hat aber eine andere Größe

$$\begin{bmatrix} \mathcal{L}\phi \\ \phi \end{bmatrix} [\boldsymbol{\lambda}] = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{g} \end{bmatrix}.$$

Die Matrix zur Bestimmung der Gewichte ist jedoch voll besetzt. Dementsprechend ist ein hoher Rechenaufwand nötig und die Matrix ist eventuell schlecht konditioniert. Dies motiviert uns im nächsten Kapitel die RBF-Finite Differenzen Methode zu betrachten.

4.2.2 RBF-Finite Differenzen

Das RBF-Finite Differenzen Verfahren ist ein weiteres numerisches Verfahren, um auf Basis der RBF gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen zu lösen. Genau wie das Kollokationsverfahren benötigt dies kein strukturiertes Gitter, jedoch wird bei der RBF-FD Methode nur noch eine Umgebung um einen Knoten für die Approximation der Funktion f verwendet.

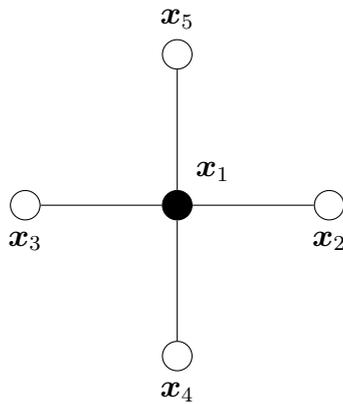


Abbildung 36: FD Stern

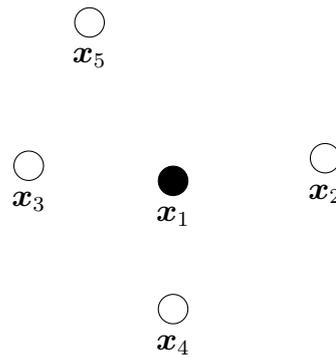


Abbildung 37: RBF-FD Stencil

Dadurch ist das durch RBF-FD generierte Gleichungssystem einfacher zu lösen, was wir im Folgenden weiter erläutern möchten.

Wir betrachten erneut ein Dirichlet Randwertproblem. Hierzu sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet und $\partial\Omega$ der Rand des Gebiets. Betrachte folgende DGL

$$\begin{aligned}\mathcal{L}u(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega, \\ u(\mathbf{x}) &= g(\mathbf{x}) \quad \text{on } \partial\Omega,\end{aligned}$$

wobei \mathcal{L} ein Differentialoperator ist.

Wir betrachten folgende Notation. Es sei

- $\Lambda \subset \bar{\Omega}$ die Menge der Diskretisierungszentren ,
- der Vektor $\tilde{\mathbf{u}} = [u_\xi]_{\xi \in \Lambda}$ die approximierte Lösung in den Punkten $\xi \in \Lambda$,
- $\partial\Lambda = \Lambda \cap \partial\Omega$ die Menge der Diskretisierungszentren am Rand,
- $\Lambda_{int} = \Lambda \setminus \partial\Lambda$ die Menge der Diskretisierungszentren im Inneren mit $\Lambda = \{\zeta_0, \dots, \zeta_{N_I}\}$,
- Λ_ζ die Menge, die das entsprechende Zentrum ζ und ausgewählte benachbarte Punkte $\xi \in \Lambda$,
- $w_{\zeta, \xi} \in \mathbb{R}$ Gewichte ($\sum_{\xi \in \Lambda_\zeta} w_{\zeta, \xi} u(\xi)$ Approximationen von $\mathcal{L}u(\zeta)$).

Entsprechend ergibt eine generalisierte Finite-Differenzen Diskretisierung für unser Dirichlet Randwertproblem das folgende lineare Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}\sum_{\xi \in \Lambda_\zeta} w_{\zeta, \xi} \tilde{u}_\xi &= f(\zeta) \quad \zeta \in \Lambda_{int}, \\ \tilde{u}_\xi &= g(\xi) \quad \xi \in \partial\Lambda.\end{aligned}$$

Das Vorgehen der RBF-FD Methode können wir in drei Schritten beschreiben. Zuerst wird eine Diskretisierung Λ des Gebiets Ω erzeugt, im zweiten

Schritt wird für jeden Knoten ζ das Stencil Λ_ζ ermittelt und anschließend bestimmen wir die Gewichte $w_{\zeta,\xi}$ für die Knoten ξ im Stencil Λ_ζ . Wie diese Gewichte $w_{\zeta,\xi}$ bestimmt werden können, werden wir im Folgenden erläutern. Dazu seien $\zeta \in \Lambda_{int}$ und $\Lambda_\zeta = \{\xi_0, \dots, \xi_k\} \subset \Lambda$ mit $\xi_0 = \zeta$ und $\Phi_i(\mathbf{x}) := \phi(\|\mathbf{x} - \xi_i\|) = e^{-\varepsilon^2 \|\mathbf{x} - \xi_i\|^2}$. Zur Vereinfachung wird die folgende Form für \mathcal{L} angenommen:

$$\mathcal{L}u(\mathbf{x}) = \Delta u(\mathbf{x}).$$

Der Vektor w für die Stützstelle $\zeta = \xi_0$ kann durch Lösen des folgenden, linearen Gleichungssystems berechnet werden:

$$\begin{bmatrix} \phi(\|\xi_0 - \xi_0\|) & \phi(\|\xi_1 - \xi_0\|) & \cdots & \phi(\|\xi_k - \xi_0\|) \\ \phi(\|\xi_0 - \xi_1\|) & \phi(\|\xi_1 - \xi_1\|) & \cdots & \phi(\|\xi_k - \xi_1\|) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(\|\xi_0 - \xi_k\|) & \phi(\|\xi_1 - \xi_k\|) & \cdots & \phi(\|\xi_k - \xi_k\|) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{(0,0)} \\ w_{(0,1)} \\ \vdots \\ w_{(0,k)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta\phi(\|\zeta - \xi_0\|) \\ \Delta\phi(\|\zeta - \xi_1\|) \\ \vdots \\ \Delta\phi(\|\zeta - \xi_k\|) \end{bmatrix}$$

Während die Gewichte der einzelnen Knoten bei der Differenzenmethode über die Taylorentwicklung bestimmt werden, werden diese bei der RBF-FD Methode nur über die radiale Basisfunktion ermittelt. Dadurch benötigen wir keine Gitterstruktur mehr zur Lösung von Differentialgleichungen. Des Weiteren können wir folgende wichtige Eigenschaften anführen:

- die Matrix ist symmetrisch und regulär (s. Kapitel 2)
 - \Rightarrow die Gewichte können fast immer bestimmt werden.
- Einsetzen der Gewichte in die DGL liefert

$$\sum_{i=0}^k w_{(0,i)} \tilde{u}(\xi_i) = f(\xi_0) = f(\zeta)$$

Wiederholen wir dieses Verfahren für alle Stützstellen $\zeta \in \Lambda_{int}$, erhalten wir das folgende, lineare Gleichungssystem:

$$\sum_{j=0}^k w_{i,j} \tilde{u}(\xi_{i,j}) = f(\zeta_i), \quad i = 1, \dots, N_I \quad (45)$$

Wird nun die Randbedingung $\tilde{u}(\zeta_j) = \mathbf{u}_j$ für alle $\zeta_j \in \partial\Lambda$ eingesetzt, erhalten wir ein lineares System der Form

$$B\tilde{\mathbf{u}} = F, \quad \text{wobei} \quad (46)$$

$$B_{i,j} = w_{i,j} \quad i = 1, \dots, N_I \text{ und } j = 1, \dots, N, \quad (47)$$

$$F_i = f(\zeta_i) \quad i = 1, \dots, N_I. \quad (48)$$

B ist eine dünn besetzte Matrix, da $B_{i,j}$ nur dann nicht gleich 0 ist, wenn der j -te Knoten im Stencil von Knoten i ist.

Wir werden im letzten Abschnitt 4.4 sehen, dass die RBF-FD Methode eine valide Möglichkeit ist, partielle beziehungsweise gewöhnliche Differentialgleichungen zu lösen.

4.2.3 Ghost-Knoten Strategie

Abschließend möchten wir in diesem Kapitel die Ghost-Knoten Strategie einführen. Dieses Verfahren wird genutzt um ein Neumann Randwertproblem zu lösen. Es sei Ω ein Gebiet in \mathbb{R}^d und $\partial\Omega$ der Rand von Ω mit

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \frac{\partial u(\mathbf{x})}{\partial n} &= g(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \partial\Omega. \end{aligned}$$

Das Problem hierbei ist, dass nur die Ableitung am Rand von Ω bekannt ist. Dementsprechend erweitert man das Gebiet Ω mittels weiterer sogenannter

Ghost-Knoten, welche außerhalb von Ω liegen. Dazu nutzt man eine Approximation mittels der zentralen Differenzenquotienten. Die genaue Idee möchten wir anhand eines eindimensionalen Beispiels weiter erläutern.

Beispiel 4.3

Gemischtes Randwertproblem in $\Omega = [0, 1]$ mit

$$u''(x) = f(x), \quad 0 < x < 1, \quad u(0) = u_a, \quad u'(1) = u_b, \quad h \in \mathbb{R}$$

hinreichend klein. Somit folgt für die Approximation der inneren Knoten

$$f(x_i) = u''(x_i) = \frac{u(x_i - h) - 2u(x_i) + u(x_i + h)}{h^2} + O(h^2).$$

Aber die Approximation von $u'(1)$ nur mit Knoten aus Ω :

$$u'(1) = \frac{u(1) - u(1 - h)}{h} + O(h)$$

liefert eine Approximation am Rand nur mit Ordnung 1. Daher fügen wir Ghost Knoten $x_{n+1} = 1+h$ ein. Somit erhalten wir

$$u'(1) = \frac{u(1 + h) - u(1 - h)}{2h} + O(h^2),$$

die eine Approximation mit Ordnung 2 liefert.



Ein Beispiel für die Wahl der Knoten könnte wie folgt aussehen:

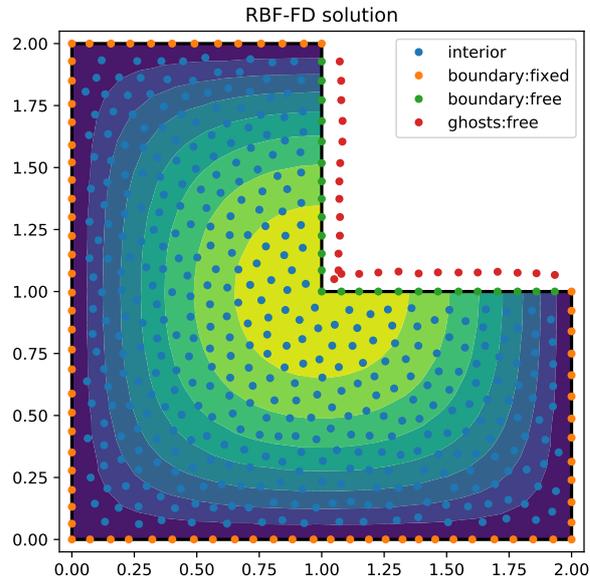


Abbildung 38: Darstellung der Wahl der Knoten nach [7]

4.3 Approximation von Differentialoperatoren mittels RBF-FD

In diesem Kapitel wollen wir Differentialoperatoren mittels RBF-FD Verfahren approximieren. Wir untersuchen hierbei die Wahl der radialen Basisfunktion auf unsere Approximation. Wir folgen hierbei den Überlegungen von [44] und [13].

4.3.1 Bestimmung partieller Ableitungen von radialen Basisfunktionen

Zu Beginn möchten wir die partiellen Ableitungen 1. und 2. Ordnung der radialen Basisfunktionen bestimmen. Hier für seien $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ und wir definieren die Funktion

$$B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := f\left(\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2}{2\varepsilon^2}\right) = f(s),$$

$$s := \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2}{2\varepsilon^2},$$

wobei $\varepsilon \in \mathbb{R}$, B_ε eine beliebige radiale Basisfunktion darstellt und s ein Beispiel für eine Distanzmatrix ist.

Wir können B_ε als verkettete Funktion verstehen.

Bemerkung 4.4 (Ableitung 1. Ordnung)

Es gilt

$$\frac{\partial s}{\partial x_i} = \frac{2(x_i - y_i)}{2\varepsilon^2} = \frac{(x_i - y_i)}{\varepsilon^2},$$

$$\frac{\partial s}{\partial y_i} = \frac{-2(x_i - y_i)}{2\varepsilon^2} = -\frac{(x_i - y_i)}{\varepsilon^2},$$

somit folgt mittels Kettenregel:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f'(s) \frac{\partial s}{\partial x_j} = \frac{f'(s)}{\varepsilon^2} (x_j - y_j),$$

$$\frac{\partial}{\partial y_k} B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = f'(s) \frac{\partial s}{\partial y_k} = -\frac{f'(s)}{\varepsilon^2} (x_k - y_k).$$

Entsprechend lassen sich so auch die Ableitungen 2. Ordnung bestimmen.

Bemerkung 4.5 (Ableitung 2. Ordnung)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{f'(s)}{\varepsilon^2} (x_j - y_j) \right) \\
&= \frac{f'(s)}{\varepsilon^2} \frac{\partial}{\partial x_i} (x_j - y_j) + (x_j - y_j) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{f'(s)}{\varepsilon^2} \right) \\
&= \frac{f'(s)}{\varepsilon^2} \delta_{ij} + \frac{x_j - y_j}{\varepsilon^2} f''(s) \frac{\partial s}{\partial x_i} \\
&= \frac{f'(s)}{\varepsilon^2} \delta_{ij} + f''(s) \frac{x_i - y_i}{\varepsilon^2} \frac{x_j - y_j}{\varepsilon^2},
\end{aligned}$$

wobei $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j, \end{cases}$.

Analog gilt:

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \frac{\partial}{\partial y_j} B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{f'(s)}{\varepsilon^2} \delta_{ij} + f''(s) \frac{(x_i - y_i)}{\varepsilon^2} \frac{(x_j - y_j)}{\varepsilon^2}$$

und

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \frac{\partial}{\partial x_j} B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\frac{f'(s)}{\varepsilon^2} \delta_{ij} - f''(s) \frac{(x_j - y_j)}{\varepsilon^2} \frac{(x_i - y_i)}{\varepsilon^2}.$$

Somit können wir diese Ableitungen nutzen, um den Laplace-Operator darzustellen.

Beispiel 4.6 (Laplace-Operator)

Es gilt

$$\begin{aligned}
(\Delta B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}))_x &= \frac{df'(s)}{\varepsilon^2} + \frac{f''(s)}{\varepsilon^4} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 \\
&= \frac{df'(s)}{\varepsilon^2} + \frac{2s f''(s)}{\varepsilon^2} \\
&= (\Delta B_\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}))_y
\end{aligned}$$

wobei d die Dimension darstellt.

4.3.2 Approximation des Differentialoperators

In diesem Abschnitt werden wir die Vorgehensweise zur Approximation eines Differentialoperators darstellen und anhand des Laplace-Operators weiter erläutern.

Im Folgenden sei \mathcal{L} ein elliptischer Differentialoperator, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ mit zugehörigem Stencil $\Lambda_{\mathbf{x}} = \{\mathbf{x} = \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_K\}$. Zudem folgen wir weiterhin der Notation aus Abschnitt 3. Es gilt:

$$\mathcal{L}u = f, \quad \Omega \subset \mathbb{R}^2.$$

Mit Finiten Differenzen und RBF Interpolation folgt:

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}u)_{\mathbf{x}} &= \sum_{j=0}^K w_j u(\mathbf{x}_j) \Leftrightarrow \mathcal{L}s(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^K w_j u(\mathbf{x}_j) \\ \Leftrightarrow \mathcal{L} \sum_{i=0}^N \lambda_i \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) &= \sum_{i=0}^N \lambda_i \sum_{j=0}^K w_j \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|) \\ \Leftrightarrow \sum_{i=0}^N \lambda_i \mathcal{L}\phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) &= \sum_{i=0}^N \lambda_i \sum_{j=0}^K w_j \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|) \\ \Leftrightarrow \mathcal{L}\phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|) &= \sum_{j=0}^K w_j \phi(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|) \\ \Leftrightarrow \Phi \mathbf{w} &= rhs(\mathcal{L}), \end{aligned}$$

wobei $\Phi \in \mathbb{R}^{(K+1) \times (K+1)}$ die Distanzmatrix, w die entsprechende Gewichte und $rhs(\mathcal{L})$ die rechte Seite der Gleichung.

Somit betrachten wir folgendes Beispiel.

Beispiel 4.7

Es sei $\mathcal{L}\cdot = \Delta\cdot$ und \mathbf{x} Punkt mit zugehörigem Stencil $\Lambda_{\mathbf{x}} = \{\mathbf{x} = \mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_K\}$.

Entsprechend gilt:

$$(\mathcal{L}u)_{\mathbf{x}} = (\Delta u)_{\mathbf{x}} = \sum_{j=0}^K w_j u(\mathbf{x}_j), \quad \text{wobei}$$

$$\Delta_{\mathbf{x}} u = (\Delta u)_{\mathbf{x}}.$$

Analog zu vorher folgt:

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \sum_{i=0}^N \lambda_i \Delta_{\mathbf{x}} \phi \left(\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}{2} \right) &= \sum_{i=0}^N \lambda_i \sum_{j=0}^K w_j \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^2}{2} \right) \\ \Leftrightarrow \Delta_{\mathbf{x}} \phi \left(\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}{2} \right) &= \sum_{j=0}^K w_j \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i\|^2}{2} \right) \end{aligned}$$

Es folgt das lineare Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0\|^2}{2} \right) & \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|^2}{2} \right) & \dots & \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_0\|^2}{2} \right) \\ \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_1\|^2}{2} \right) & \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|^2}{2} \right) & \dots & \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_1\|^2}{2} \right) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_K\|^2}{2} \right) & \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_K\|^2}{2} \right) & \dots & \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_K\|^2}{2} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta_{\mathbf{x}} \phi \left(\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|^2}{2} \right) \\ \Delta_{\mathbf{x}} \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0\|^2}{2} \right) \\ \vdots \\ \Delta_{\mathbf{x}} \phi \left(\frac{\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0\|^2}{2} \right) \end{bmatrix},$$

mit welchem sich die Gewichte der Matrix mittels Invertieren bestimmen lassen.

Im Folgenden möchten wir den Einfluss des Laplace-Operators auf die jeweilige RBF untersuchen. Dafür sei $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x} = (x^1, x^2)^T$ und $\mathbf{x}_i = (x_i^1, x_i^2)^T$.

Für $s = \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}{2}$ gilt:

$$\Delta_{\mathbf{x}} \phi(s) = \phi_{x^1 x^1}(s) + \phi_{x^2 x^2}(s).$$

Weiter gilt:

$$\begin{aligned}\phi_{x^1} &= \phi_s \frac{\partial s}{\partial x^1}, \quad \text{mit} \quad \frac{\partial s}{\partial x^1} = x^1 - x_i^1, \\ \phi_{x^2} &= \phi_s \frac{\partial s}{\partial x^2}, \quad \text{mit} \quad \frac{\partial s}{\partial x^2} = x^2 - x_i^2.\end{aligned}$$

Analog dazu folgt

$$\begin{aligned}\phi_{x^1 x^1} &= \phi_{ss} \frac{\partial s}{\partial x^1} \frac{\partial s}{\partial x^1} + \phi_s \frac{\partial^2 s}{\partial x^1 \partial x^1} \\ &= \phi_{ss} (x^1 - x_i^1)^2 + \phi_s \\ \Rightarrow \phi_{x^1 x^1}(s) + \phi_{x^2 x^2}(s) &= \phi_{ss}(s)(x^1 - x_i^1)^2 + \phi_s(s) + \phi_{ss}(s)(x^2 - x_i^2)^2 + \phi_s(s) \\ &= 2\phi_s(s) + \phi_{ss}(s)[(x^1 - x_i^1)^2 + (x^2 - x_i^2)^2] \\ &= 2\phi_s(s) + 2s\phi_{ss}(s) \\ &= 2\phi_s \left(\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}{2} \right) + \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2 \phi_{ss} \left(\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}{2} \right)\end{aligned}$$

4.4 Simulation

Ziel dieses Kapitels ist es, mittels Beispielen die RBF-FD Methode zu verifizieren. Wir folgen hierbei den Überlegungen von [58]. In der ersten Simulation beziehen wir uns noch einmal auf das zuvor behandelte Problem aus Beispiel 4.2, um zu zeigen, dass die RBF-FD Methode funktioniert. Hierfür betrachten wir die Konvergenzgeschwindigkeit und den maximalen Fehler der Approximation im Vergleich zur analytischen Lösung.

Wir betrachten erneut folgendes Problem:

$$f(x) = u''(x) = -\cos(x) \quad u(0) = 1, \quad u(2\pi) = 1 \quad \text{auf } [0, 2\pi]$$

Die Stencilgröße für die RBF-FD Methode hat erneut den Wert 3. Die Anzahl der äquidistanten Knoten auf dem Gebiet $[0, 2\pi]$ wird nun, beginnend

mit 10, sukzessive verdoppelt und es wird der maximale Fehler betrachtet. Die folgende Grafik 39 stellt die Entwicklung des maximalen Fehlers für die beiden radialen Basisfunktionen Inverse Quadratic und Gaussian mit Shape Parameter $\varepsilon = 0.8$ dar. Die Lösung $u(x)$ sei bekannt und normalisiert, sodass $\max_{\Omega} |u(x)| = 1$ gelte, wobei $s(x, \tau)$ die zugehörige RBF-Approximation mit Schrittweite τ ist. Der maximale Fehler in Abhängigkeit der Schrittweite ist definiert durch:

$$\text{Max Error}(\tau) = \max_{\Omega} |s(x, \tau) - u(x)|. \quad (49)$$

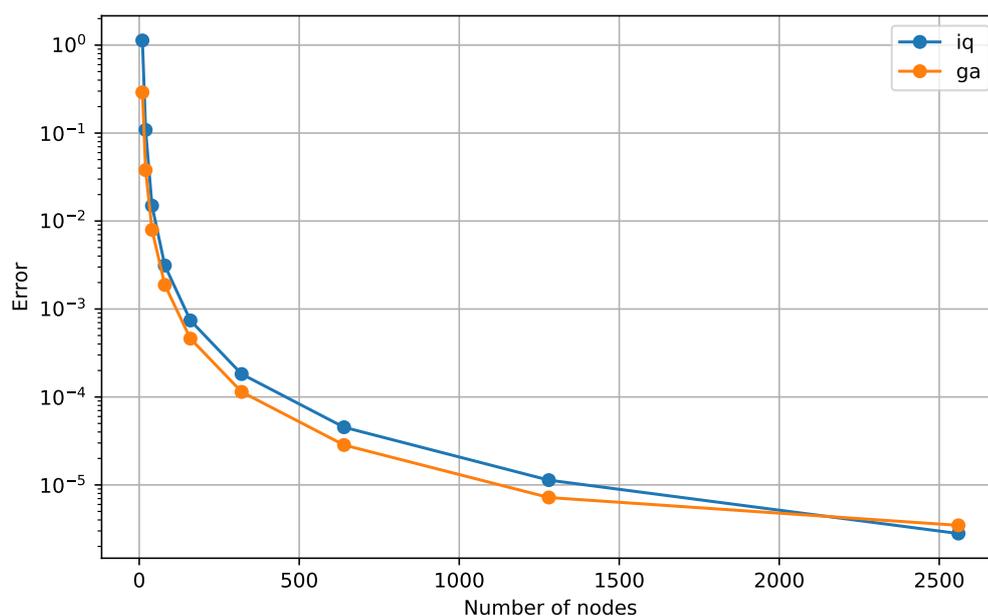


Abbildung 39: Entwicklung des maximalen Fehlers in Abhängigkeit der Anzahl der Knoten für die RBF Inverse Quadratic (IQ) und Gaussian (GA) mit Shape Parameter $\varepsilon = 0.8$.

Den nachstehenden Tabellen sind die Werte des maximalen Fehlers und die Konvergenzordnung zu entnehmen [Programm: *Simulation1.py*]. Dabei wird die Konvergenzordnung p der Verfahren folgendermaßen berechnet:

$$p \approx \frac{\ln(\|e_1\|/\|e_2\|)}{\ln(\tau_1/\tau_2)},$$

wobei e_1 der maximale Fehler für die Schrittweite τ_1 und e_2 der maximale Fehler für die Schrittweite τ_2 ist.

Anzahl Knoten	maximaler Fehler IQ	Konvergenzordnung IQ
10	1.1291	
20	0.1087	1.4184
40	1.4954 e-02	1.3434
80	3.1223 e-03	1.3466
160	7.4085 e-04	1.3423
320	1.8224 e-04	1.3370
640	4.5302 e-05	1.3336
1280	1.1339 e-05	1.3268
2560	2.8022 e-06	1.3609

Tabelle 8: Maximaler Fehler und Konvergenzordnung der RBF-FD Methode für die RBF *Inverse Quadratic*

Anzahl Knoten	maximaler Fehler GA	Konvergenzordnung GA
10	0.2904	
20	3.7948 e-02	2.936
40	7.9406 e-03	2.2567
80	1.8785 e-03	2.0797
160	4.6040 e-04	2.0286
320	1.1418 e-04	2.0116
640	2.8445 e-05	2.005
1280	1.1339 e-05	1.9826
2560	2.8022 e-06	1.0511

Tabelle 9: Maximaler Fehler und Konvergenzordnung der RBF-FD Methode für die RBF *Gaussian*

Wir können sehen, dass der Fehler mit zunehmender Anzahl an Knoten geringer wird. Während die experimentelle Konvergenzordnung bei der Inverse Quadratic RBF zwischen 1.3 und 1.4 liegt, besitzt die RBF Gaussian zuerst sogar eine Konvergenzordnung von etwa 2, bis diese bei der letzten Verdopplung der Knoten auf etwa 1.05 zurückgeht. Dieser Rückgang kann eventuell mit Rundungsfehlern erklärt werden. Das Beispiel ist ein guter Hinweis dafür, dass die RBF-FD Methode funktioniert.

In dieser Simulation werden wir die globale Kollokationsmethode und die RBF-FD Methode auf einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ anhand der schon zuvor verwendeten Radialen Basisfunktionen Inverse Quadratic und Gaussian hinsichtlich des Shape Parameters ε untersuchen. Dafür definieren wir den maximalen Fehler in Abhängigkeit des Shape Parameters ε mit

$$\text{Max Error}(\varepsilon) = \max_{\Omega} |s(\mathbf{x}, \varepsilon) - u(\mathbf{x})|, \quad (50)$$

wobei $s(\mathbf{x}, \varepsilon)$ die RBF-FD Approximation in Abhängigkeit des Shape Parameters sei. Für die Simulation wird der folgende elliptische partielle Differentialoperator auf die Radialen Basisfunktionen angewendet:

$$\Delta u - 3u_x = f(x, y).$$

Die Funktion $f(x, y)$ im Inneren und die Dirichlet Randbedingung werden über die analytische Lösung

$$u(x, y) = \exp\left(-\frac{3}{2}x\right) \sin\left(\frac{3}{2}y\right)$$

berechnet. Für das Problem betrachten wir 400 gleichverteilte Knoten auf dem Einheitskreis und wählen die Stencilgröße 13, wie in Abbildung 40 dargestellt [Programm: *Shape_Parameter.py*].

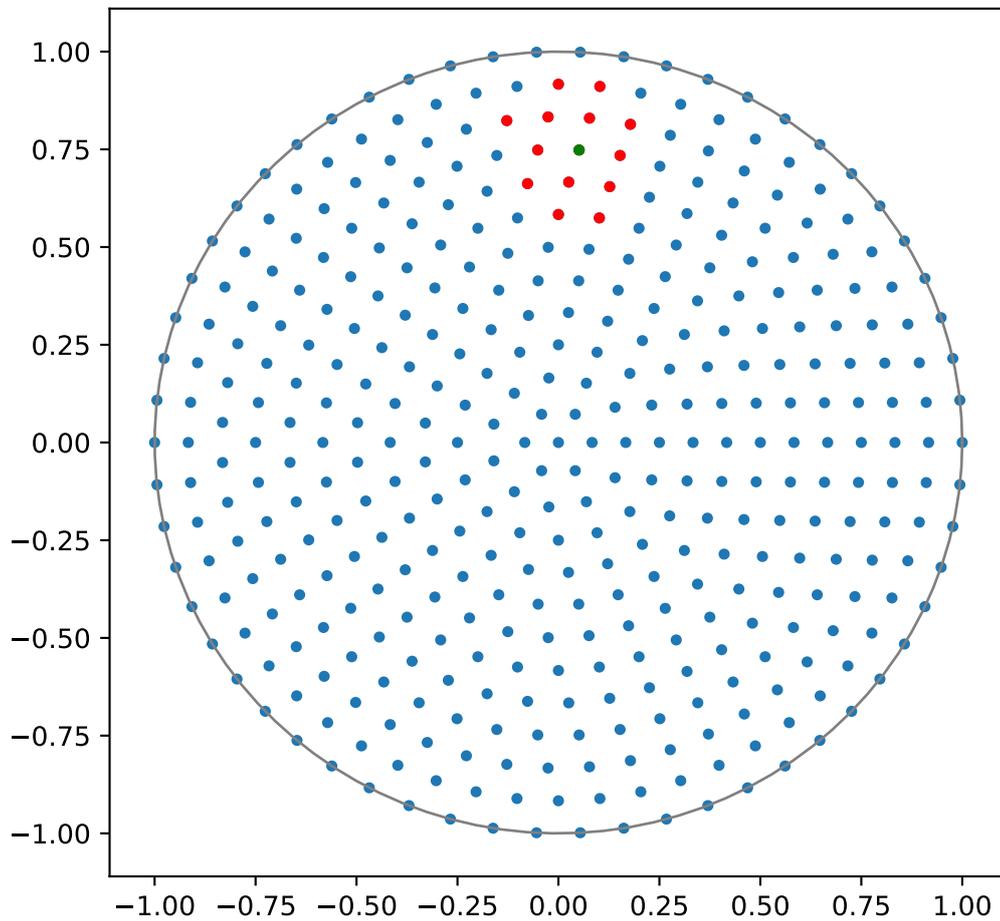
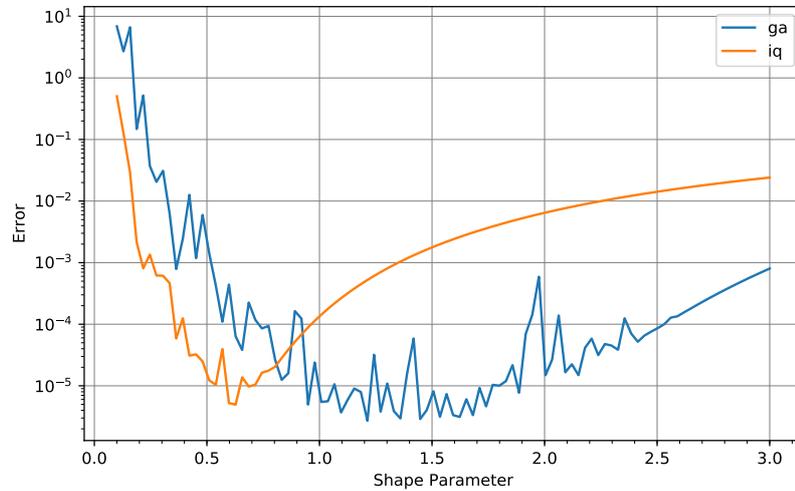
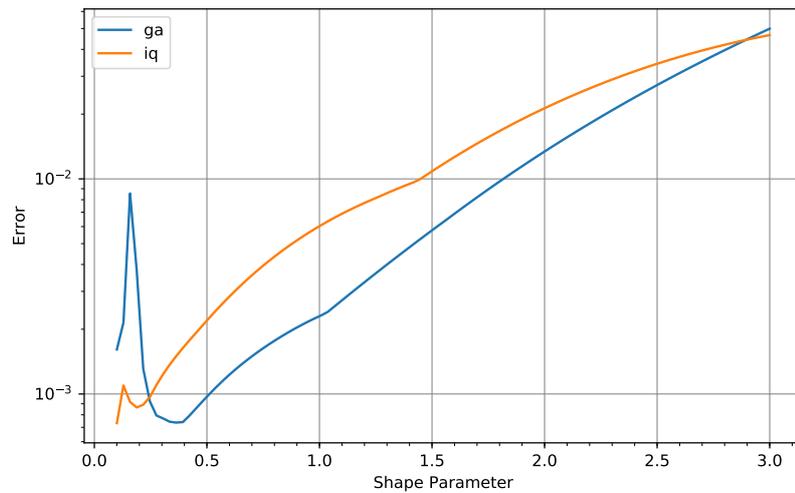


Abbildung 40: Diskretisierung des Einheitskreises mit Stencil (rot) um einen inneren Knoten (grün)

Die Abbildung 41(a) zeigt die Ergebnisse der Berechnungen über die Kollokationsmethode mit den Funktionen IQ und GA, während Abbildung 41(b) die Ergebnisse der RBF-FD Methode mit diesen radialen Basisfunktionen darstellt.



(a)



(b)

Abbildung 41: Die Graphen zeigen den maximalen Fehler als eine Funktion des Shape Parameters. Sie vergleichen den maximalen Fehler der Approximation über die globale Kollokationsmethode (a) und der RBF-FD Methode (b) für die radialen Basisfunktionen IQ und GA.

Bei der Kollokationsmethode erkennen wir, dass die Fehlerentwicklung der beiden Approximationen grundsätzlich verschieden ist, wobei die *Gaussian* RBF mit größerem Shape Parameter eine bessere Approximation liefert. Des Weiteren ist zu beachten, dass der Fehler für kleine Shape Parameter sehr groß wird, da die Systemmatrix des Kollokationsverfahrens mit kleinerem Shape schlecht konditioniert ist. Die Konditionierung wird mit zunehmender Knotenanzahl schlechter, was das Kollokationsverfahren ungeeignet für Probleme mit einer großen Anzahl an Knoten macht (vgl. [58]).

Die Ergebnisse in Abbildung 41(b) zeigen, dass die RBF-FD Methode keine großen Probleme mit kleinen Shape Parametern besitzt. Dies liegt vor allem daran, dass die Systemmatrix der RBF-FD Methode dünn besetzt ist. Dementsprechend ist die RBF-FD Methode geeigneter für Approximation mit einer großen Anzahl an Knoten. Jedoch liefert die Kollokationsmethode für größere Shape Parameter eine bessere Approximation.

5 Fazit

Die Einführung in das Studienprojekt hat das Problem der Interpolation verstreuter Daten erläutert und die RBF-Methode als mögliche Lösung des Problems präsentiert. Dabei wurden Fragen aufgeworfen, die in den folgenden Kapiteln behandelt werden sollten. Auf einige der Fragen konnten konkrete Antworten gefunden werden. Andere Fragen konnten nur teilweise beantwortet werden und haben weiteren Forschungsbedarf offengelegt.

In Abschnitt 2.1 wurde die Interpolation mit Radialen Basisfunktionen mit der kubischen Spline-Interpolation motiviert. Schließlich wurde in Abschnitt 2.3 die Interpolation mit eindimensionalen kubischen Splines $s : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tatsächlich als Spezialfall (RP, $\beta = 3$) der Interpolation mit Radialen Basisfunktionen in der erweiterten RBF-Methode bezüglich des Polynomraumes $\mathcal{P}_1(\mathbb{R})$ identifiziert. Im weiteren Verlauf des Kapitels 2 wurde die Existenz und Eindeutigkeit der einfachen und erweiterten RBF-Methode untersucht. Dazu wurden in Abschnitt 2.2 (hauptsächlich) positiv definite Radiale Basisfunktionen vorgestellt, welche durch Anwendung der einfachen RBF-Methode eine eindeutige Interpolation liefern. In Abschnitt 2.3 wurden bedingt positiv definite Radiale Basisfunktionen vorgestellt, welche im Allgemeinen nur unter gewissen Voraussetzungen an die Menge der Datenpunkte durch Anwendung der erweiterten RBF-Methode, nach Theorem 2.35, eine eindeutige Interpolation liefern. Die Voraussetzungen, um die Verwendung von Theorem 2.35 zu gewährleisten, wurden in Abschnitt 2.3.5 näher beleuchtet und können für üblich verwendete Radiale Basisfunktionen als relativ gering angesehen werden. Zudem wurde in Abschnitt 2.3 und 2.4 dargelegt, dass für $m = 0$ die Definition 1.4 mit der Definition 2.33 übereinstimmt und damit die erweiterte RBF-Methode eine Verallgemeinerung der einfachen RBF-Methode darstellt. Des Weiteren sind, nach Theorem 2.40, für $m = 0$ die Definition 2.13 der positiven Definitheit und die Definition

2.37 der bedingten positiven Definitheit identisch, sodass die bedingte positive Definitheit eine Verallgemeinerung der positiven Definitheit verkörpert. Da zusätzlich $\mathcal{U}_{0-1}(\mathbb{R}^d) = \{\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d : |\mathcal{X}| < \infty\}$ gilt, reduzieren sich die Forderungen aus Theorem 2.35 für $m = 0$ auf die Forderung der positiven Definitheit der Radialen Basisfunktion Φ . Eine Zusammenfassung der Resultate des Kapitels 2 liefert insbesondere die Tabelle 7 aus Abschnitt 2.4, welche die in dem Kapitel 2 untersuchten Radialen Basisfunktionen zur Interpolation verstreuter Daten in der einfachen und erweiterten RBF-Methode auflistet.

In Kapitel 3 lag das Augenmerk auf der Fehleranalyse und -abschätzung der einfachen RBF-Methode. Dazu wurde die Power Function eingeführt, die die Grundlage für eine punktweise Fehlerabschätzung liefert (s. Theorem 3.13). Für die einfache RBF-Methode wurden einige Tests bezüglich der Fehlerentwicklung vorgestellt (vgl. Beispiel 3.14). Diese wurden sowohl hinsichtlich der Anzahl und Verteilung der Stützstellen, als auch hinsichtlich des Shape Parameters analysiert. Des Weiteren wurde, um den Interpolationsfehler zu minimieren, die Optimierung des Shape Parameter anhand mehrerer Methoden (vgl. Kapitel 3.5) vorgenommen. Die Optimierung des Shape Parameters ist im Allgemeinen nicht analytisch möglich, weshalb auf die Methoden aus Kapitel 3.5 zurückgegriffen werden muss. Dies wurde an einigen Beispielen konkretisiert und für ein Beispiel wurde der optimale Shape Parameter ermittelt. Darüber hinaus wurde die Stabilität und Kondition der Interpolationsmethode thematisiert, die typischerweise mit Hilfe der Fourier Transformation untersucht werden, auf die in diesem Studienprojekt nicht eingegangen wurde. Weitere wissenschaftliche Forschungen könnten sich zum Beispiel mit einer (nicht punktweisen) Fehlerabschätzung, die nicht auf der Power Function basiert, oder einem optimalen Shape Parameter für bestimmte Funktionsfamilien beschäftigen.

Neben der Interpolation verstreuter Daten wurde in diesem Studienprojekt ebenfalls das Lösen von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen mithilfe von RBFs untersucht.

Im letzten Kapitel wurde gezeigt, dass die Verfahren, welche auf RBFs basieren, eine gute Alternative zum Lösen von gewöhnlichen beziehungsweise partiellen Differentialgleichungen darstellt. Die Kollokationsmethode und RBF-Finite Differenzen Methode benötigen kein strukturiertes Gitter. Anhand verschiedener Beispiele wurden die beiden Verfahren verifiziert und der Einfluss der Knoten und des Shape Parameters auf die Approximation der Lösung weiter erläutert. Wie bereits zu erwarten, hat eine erhöhte Anzahl der Knoten eine verbesserte Approximation durch die RBF-FD Methode zur Folge. Analog dazu liefert die RBF-FD Methode, im Vergleich zur Kollokationsmethode bereits für kleine Shape Parameter eine gute Approximation.

Literatur

- [1] BALL, K. (1992): Eigenvalues of Euclidean distance matrices. *Journal of Approx. Theory* 68, pp. 74-82.
- [2] BHATIA, G. S.; ARORA, G. (2016): Radial Basis Function Methods for Solving Partial Differential Equations - A Review. *Indian Journal of Science and Technology*, Vol. 9, pp. 1-18.
- [3] BUHMANN, M. D. (2003): *Radial Basis Functions: Theory and Implementations*. Cambridge University Press.
- [4] CHEUNG, K. C.; LING, L.; RUUTH, S. J.(2015): A localized meshless method for diffusion on foiled surfaces. *Journal of Computational Physics*, Vol. 257, No. 15, pp. 194-206.
- [5] DAHMEN, W.; REUSKEN, A. (2008): *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp. 323-342.
- [6] DE BOOR, C. (1988): What is a multivariate spline?. *Proceedings of the First International Conference on Industrial and Applied Mathematics, Proceedings in Applied Mathematics*, SIAM, pp. 90-101.
- [7] Cox, M.; Harris, P.; Kenward, P. (2001): *Fixed- and Free-Knot Univariate Least-Squares Data Approximation by Polynomial Splines*. National Physical Laboratory, Teddington, pp. 330-345.
- [8] DE MARCHI, S. (2013): *Four lectures on Radial Basis Functions*. Department of Mathematics, University of Padua.
- [9] DE MARCHI, S. (2017): *Lectures on multivariate polynomial approximation*. Department of Mathematics, University of Padua.

- [10] DEUFLHARD, P., HOHMANN, A. (2008): Numerische Mathematik 1: Eine algorithmisch orientierte Einführung. De Gruyter, pp. 240-255.
- [11] DIERCKX, P. (1993): Curve and Surface Fitting with Splines. Monographs on numerical analysis, Clarendon Press, Oxford.
- [12] DUCHON, J. (1977): Splines minimizing rotation-invariant semi-norms in sobolev space. Constructive Theory of Functions os Several Variables, Springer Lecture Notes in Math, Vol. 21, pp. 85-100.
- [13] ERKUL, U. (2017): Numerische Simulationen der Konvektions-Diffusions-Gleichung mit der RBF-FD-Methode. Masterarbeit TU Dortmund.
- [14] FASSHAUER, G. E. (2007): Meshfree Approximation Methods with Matlab. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
- [15] FASSHAUER, G. E. (2010): MATH 590: Meshfree Methods. Department of Applied Mathematics, Illinois Institute of Technology.
- [16] FISCHER, G. (2008): Lehrbuch der Algebra. Friedr. Vieweg & Sohn Verlag, Wiesbaden.
- [17] FORNBERG, B., WRIGHT, G. (2004): Stable computation of multiquadratic interpolants for all value of the shape Parameter. Comput. Math. Appl. 47, pp. 497-523.
- [18] FORNBERG, B.; FLYER, N. (2015): Solving PDEs with radial basis functions. Acta Numerica, 24, pp. 215-258.
- [19] FORSTER, OTTO (2006) Analysis 2. Vieweg-Verlag, 7. Auflage.
- [20] FRANKE, R. (1982): Scattered data interpolation: tests of some methods. Mathematics Of Computation, Vol. 38, pp. 181-200.

- [21] GODRICH, R. (1970): A Riesz Representation Theorem. Proceedings of the American Mathematical Society Vol. 24, pp. 629-636.
- [22] HANKE-BOURGEOIS, M. (2009): Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, pp. 355-375.
- [23] HARDY, L. R. (1971): Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. Journal of geophysical research, Vol. 76, No. 8, pp. 1905-1915.
- [24] HARDY, L. R. (1990): Theory and application of the Multiquadric-Biharmonic Method. Computers & Mathematics with Applications, Vol. 19, No. 8/9, pp. 163-208.
- [25] HON, Y.; MAO, X.(1999): A Radial Basis Function Method for Solving Options Pricing Modell. Financial Engineering, Vol. 8, No. 1, pp. 31-49.
- [26] HON, Y.; ZHOU P.(2000): A comparison on using various radial basis functions for options pricing. International Journal of Applied Science and Computations, Vol. 7, No. 1, pp. 29-47.
- [27] ISKE, A. (1994): Charakterisierung bedingt positiv definiter Funktionen für multivariate Interpolationsmethoden mit radialen Basisfunktionen. Doktorarbeit, Georg-August-Universität zu Göttingen.
- [28] KINDELAN, M.; BERNAL, F.; GONZÁLEZ-RODRÍGUEZ P.; MOSCOSO M. (2009): Application of the RBF meshless method to the solution of the radiative transport equation. Journal of Computational Physics, Vol. 229, pp. 1897-1908.

- [29] LARSSON, E.; FORNBERG, B. (2003): A Numerical Study of Some Radial Basis Function Based Solution Methods for Elliptic PDEs. *Computers and Mathematics with Applications* Vol. 46, pp.891-902.
- [30] LI, Z.; QIAO, Z.; TANG, T. (2017): Numerical Solution of Differential Equations. *Introduction to Finite Difference and Finite Element Methods*. Cambridge University Press.
- [31] MICCHELLI, C. A. (1986): Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions. *Construct. Approx.*, vol 2, pp. 11-22.
- [32] MONGILLO, M. (2011): Choosing basis functions and shape parameters for radial basis function methods. *SIAM Undergraduate Research Online*, pp. 190-209.
- [33] NARCOWICH, F., WARD, J. (1991): Norms of inverses and condition numbers of matrices associated with scattered Data. *Journal of Approximation Theory* 64 pp. 69-94.
- [34] TOMAS SAUER (2008/09): Integraltransformationen Vorlesungsskriptum, Lehrstuhl für Numerische Mathematik, URL: <https://www.fim.uni-passau.de/fileadmin/files/lehrstuhl/sauer/geyer/IntegralTrafo.pdf>.
- [35] OANH, D.; DAVYDOV, O.; PHU, H. (2017): Adaptive RBF-FD Method for Elliptic Problems with Point Singularities in 2D. *Applied Mathematics and Computation*, pp. 1-32.
- [36] PLATO, R. (2010): *Numerische Mathematik kompakt: Grundlagenwissen für Studium und Praxis*. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, pp. 21-37.

- [37] QUARTERONI, A., SALERI, F. (2006): *Wissenschaftliches Rechnen mit MATLAB*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp. 81-84.
- [38] RIPPA, S. (1999): An algorithm for selecting a good value for the parameter c in radial basis function interpolation. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 11, pp.193-210.
- [39] SCHABACK, R. (1995): Error estimates and condition numbers for radial basis function interpolation. *Advances in Computational Mathematics*, Vol. 3, pp. 251-264.
- [40] SCHABACK, R. (1995): Multivariate interpolation and approximation by translates of a basis function. *Approximation Theory VIII*, pp. 491-514.
- [41] SCHABACK, R. (1997): Radial Basis Functions Viewed From Cubic Splines. *Multivariate approximation and splines*, Conference paper, Springer-Verlag, Basel, pp. 245-258.
- [42] SCHABACK, R. (2002): Stability of radial basis function interpolants. *Approximation Theory X: Wavelets, Splines, and Applications*, pp. 433-440.
- [43] SCHABACK, R., WENDLAND, H. (2005): *Numerische Mathematik*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp. 179-198.
- [44] SCHABACK, R. (2011): *MATLAB Programming for Kernel-Based Methods*.
- [45] SCHAGEN, I. P. (1979): Interpolation in Two Dimension - A New Technique. *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, Vol. 23, pp. 53-59.
- [46] SCHREIBER, A. (2001): *Die Methode von Smolyak bei der multivariaten Interpolation*. Dissertation Universität Göttingen.

- [47] Schütze, T. (1998): Diskrete Quadratmittelapproximation durch Splines mit freien Knoten. Dissertation Universität Dresden.
- [48] SCHWARZ, H. R., KÖCKLER, N. (2009): Numerische Mathematik. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, pp. 106-127.
- [49] SHU, C.; DING, H.; YEO, K. S. (2003): Local radial basis function-based differential quadrature method and its application to solve two-dimensional incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 192, pp. 941-954.
- [50] SOKOLOV, A.; DAVYDOV, O.; TUREK, S.(2017): Numerical study of the RBF-FD level set based method for partial differential equations on evolving-in-time surfaces in *Ergebnisberichte Angewandte Mathematik der TU Dortmund*, Dortmund, No. 579.
- [51] STÖCKLER, J. (2012): Numerische Mathematik 1. Vorlesungsskriptum, Technische Universität Dortmund, URL: https://www.mathematik.tu-dortmund.de/lsviii/new/media/veranstaltungen/wise1213/numerik/kap7_1.pdf.
- [52] SÜLI, E., MAYERS, D. F. (2003): *An Introduction to Numerical Analysis*. Cambridge University Press, New York, pp. 292-307.
- [53] VARGA, R. S. (1965): Minimal Gerschgorin Sets. *Pacific Journal of Mathematics*, pp. 719-729.
- [54] WENDLAND, H. (2004): *Scattered Data Approximation*. Cambridge University Press.
- [55] WIENERS, C. (2013): Einführung in die Numerische Mathematik. Vorlesungsskriptum, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), URL: <http://www.math.kit.edu/ianm3/lehre/numa22013s/media/na.pdf>.

- [56] WRIGHT, G. B. (2003): Radial Basis Function Interpolation: Numerical and Analytical Developments. Ph.D. thesis, University of Colorado, Boulder.
- [57] WU, Z.; SCHABACK, R. (1993): Local error estimates for radial basis function interpolation of scattered data. IMA journal of Numerical Analysis, Vol. 13, pp. 13-27.
- [58] YENSIRI, S.; SKULKHU, J. (2017): An Investigation of Radial Basis Function-Finite Difference (RBF-FD) Method for Numerical Solution of Elliptic Partial Differential Equations, Marthematics Vol. 5, pp. 1-14.

A Anhang

A.1 Ergänzungen zu Splines

Ergänzend zu der vorgestellten natürlichen Randbedingung nach Wendland (siehe 2.4) werden hier noch einmal für kubische Splines die gängigsten Randbedingungen zusammengefasst. Unter anderem in [36], [22] oder [43] findet sich eine ausführliche Beschreibung sowie zugehörige Beweise.

Theorem A.1 (Interpolierender kubischer Spline)

Es sei $\mathcal{X} = \{x_1 < x_2 < \dots < x_n\}$ eine gegebene Menge an Stützstellen und $\mathcal{Y} = \{y_i : y_i = f(x_i), i = 1, \dots, n\}$ die zugehörige Menge an Stützwerten. Mit

$$\mathcal{S}_3(\mathcal{X}) = \left\{ s \in C^2([x_1, x_n]) : s|_{[x_i, x_{i+1}]} \in \mathcal{P}_3, i = 1, \dots, n-1 \right\} \subset C^2(\mathbb{R})$$

sei die Menge der kubischen Splines auf dem betrachteten Intervall bezeichnet. Für einen Spline $s \in \mathcal{S}_3(\mathcal{X})$ gelte die Interpolationsbedingung

$$s(x_i) = f(x_i) = y_i \quad \text{für alle } i = 1, \dots, n.$$

Gilt zusätzlich eine der folgenden Bedingungen für die Randpunkte des Intervalls $[x_1, x_n]$, so ist der Spline s eine eindeutige Interpolante für die Funktion f :

(a) *Natürliche Randbedingung:* $s''(x_1) = s''(x_n) = 0$

(b) *Vollständige Randbedingung:* $s'(x_1) = f'(x_1)$ und $s'(x_n) = f'(x_n)$

(c) *Periodische Randbedingung:* $s'(x_1) = s'(x_n)$ und $s''(x_1) = s''(x_n)$.

Wie sich kubische Splines nun anhand der Randbedingung nach Wendland konkret berechnen lassen, wird mit dem nachfolgenden Beispiel veranschaulicht (vgl. [36], S.26).

Beispiel A.2

Gesucht ist ein natürlicher kubischer Spline $s \in \mathcal{N}_3(\tilde{\mathcal{X}})$ mit $\tilde{\mathcal{X}} = \{x_0 < x_1 < \dots < x_{n+1}\}$. Da es sich bei kubischen Splines um stückweise definierte Polynome dritten Grades handelt, lässt sich der Spline s auf den Intervallen $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ für $i = 0, \dots, n$ darstellen als

$$s|_{I_i}(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3.$$

Für die Ableitungen gilt entsprechend

$$s'|_{I_i}(x) = b_i + 2c_i(x - x_i) + 3d_i(x - x_i)^2$$

$$s''|_{I_i}(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_i)$$

$$s^{(3)}|_{I_i}(x) = 6d_i.$$

Aus der abschnittswisen Darstellung des Splines s ist ersichtlich, dass für die $(n + 1)$ Intervalle I_i insgesamt $4(n + 1)$ Koeffizienten bestimmt werden müssen. Zur eindeutigen Bestimmung benötigt man daher $4(n + 1)$ Gleichungen. Aus der Interpolationsbedingung $s(x_i) = f(x_i)$ für $i = 1, \dots, n$ ergeben sich n -viele Gleichungen

$$a_i + b_i(x_i - x_i) + c_i(x_i - x_i)^2 + d_i(x_i - x_i)^3 = f(x_i) \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

$$\Leftrightarrow a_i = f(x_i) \quad \text{für } i = 1, \dots, n.$$

Da $s \in C^2([x_0, x_{n+1}])$, lassen sich aus der Glattheitsanforderung an den Stützstellen $3n$ weitere Gleichungen ableiten

$$\begin{aligned}
s|_{I_i}(x_{i+1}) &= s|_{I_{i+1}}(x_{i+1}) \\
\Leftrightarrow a_i + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 &= a_{i+1}, \quad i = 0, \dots, n-1 \\
s'|_{I_i}(x_{i+1}) &= s'|_{I_{i+1}}(x_{i+1}) \\
\Leftrightarrow b_i + 2c_i(x_{i+1} - x_i) + 3d_i(x_{i+1} - x_i)^2 &= b_{i+1}, \quad i = 0, \dots, n-1 \\
s''|_{I_i}(x_{i+1}) &= s''|_{I_{i+1}}(x_{i+1}) \\
\Leftrightarrow 2c_i + 6d_i(x_{i+1} - x_i) &= 2c_{i+1}, \quad i = 0, \dots, n-1.
\end{aligned}$$

Schließlich fehlen noch vier Gleichungen zur eindeutigen Bestimmung der Koeffizienten. An dieser Stelle kommen die natürlichen Randbedingungen (nach Wendland) zum Tragen. Der kubische Spline s soll auf dem Intervall $[x_0, x_1]$ und auf $[x_n, x_{n+1}]$ ein Polynom ersten Grades sein. Daher gelten die Randbedingungen

$$s''(x_1) = s^{(3)}(x_1) = 0 \quad \text{und} \quad s''(x_n) = s^{(3)}(x_n) = 0.$$

Daraus resultieren die vier Gleichungen

$$\begin{aligned}
s''|_{I_1}(x_1) = 2c_1 + 6d_1(x_1 - x_1) = 0 & \Leftrightarrow c_1 = 0 \\
s''|_{I_n}(x_n) = 2c_n + 6d_n(x_n - x_n) = 0 & \Leftrightarrow c_n = 0 \\
s^{(3)}|_{I_0}(x_1) = 6d_0 = 0 & \Leftrightarrow d_0 = 0 \\
s^{(3)}|_{I_n}(x_n) = 6d_n = 0 & \Leftrightarrow d_n = 0.
\end{aligned}$$

Somit wurden $4(n+1)$ Gleichungen gefunden. Da die Stützstellen paarweise verschieden sind, ist das resultierende Gleichungssystem zur Bestimmung der Koeffizienten eindeutig lösbar.

Der Beweis zur Fehlerabschätzung der kubischen Spline-Interpolation ist hier noch einmal ausgeführt. Er beruht vor allem auf der Darstellung von Wieners ([55], S.88 f.) und Schaback und Wendland ([43], S.192 f.).

Proposition A.3 (Fehlerabschätzung)

Sei die zu interpolierende Funktion $f \in C^4([x_1, x_n])$. Dann gilt für den natürlichen kubischen Spline $s \in \mathcal{N}_3(\mathcal{X})$ die Fehlerabschätzung

$$\|s - f\|_\infty \leq h^4 \|f^{(4)}\|_\infty.$$

Hierbei beschreibt

$$h = \max_{i=0, \dots, n-1} h_i = \max_{i=0, \dots, n-1} x_{i+1} - x_i$$

die Feinheit der Stützstellen.

Beweis Der Beweis folgt der Darstellung in [55], S.88 f., ein alternativer Ansatz findet sich auch in [36], S.33 ff.. Für den Beweis der globalen Fehlerabschätzung wird zunächst eine Abschätzung des natürlichen kubischen Splines $s \in \mathcal{N}_3(\mathcal{X})$ benötigt. Ist f die zu interpolierende Funktion und f mindestens zweimal stetig differenzierbar, so gilt:

$$\|s''\|_\infty \leq 3\|f''\|_\infty. \quad (\star)$$

Ein ausführlicher Beweis findet sich unter anderem in [55]. Die Idee des Beweises ist es den Momentenvektor $\mathbf{M} = (M_i)$ mit $s''(x_i) = M_i$ der zweiten Ableitung von s an den Stützstellen x_i mit der Neumannschen Reihendarstellung abzuschätzen. Dazu wird die Tridiagonalmatrix A des Gleichungssystems $A\mathbf{M} = \mathbf{b}$, welche zur Berechnung des natürlichen kubischen Splines aufgestellt wurde, durch die Neumannsche Reihe ausgedrückt. Eine einfache Abschätzung in der Maximumsnorm liefert schließlich die Behauptung.

Die eigentliche Aussage beweisen wir nun in drei Schritten. Zunächst betrachten wir die zweiten Ableitungen von f und s . Definiere $l \in \mathcal{N}_1(\mathcal{X})$ als den linearen Spline, der f'' interpoliert. Für das Integral $v(x) = \int_{x_1}^x (x-y)l(y)dy$ lässt sich dann folgern, dass

$$\begin{aligned} v'(x) &= \int_{x_1}^x l(s)dy \\ v''(x) &= l(x). \end{aligned}$$

Damit ist also $v(x) \in \mathcal{N}_3(\mathcal{X})$ und die Differenz $s-v$ ist ein Spline zur Differenz $f-v$ (**).

Es folgt nun für den Fehler der zweiten Ableitungen

$$\begin{aligned} \|s'' - f''\|_\infty &\stackrel{(**)}{=} \|(s-v)'' + (f-v)''\|_\infty \\ &\leq \|(s-v)''\|_\infty + \|(f-v)''\|_\infty \\ &\stackrel{(*),(**)}{\leq} 3\|(f-v)''\|_\infty \|(f-v)''\|_\infty \\ &= 4\|f'' - l\|_\infty. \end{aligned}$$

Im zweiten Schritt treffen wir eine Abschätzung für den Fehler der linearen Interpolation von f'' . Jener lässt sich nach dem Mittelwertsatz als das folgende Integral auffassen:

$$\begin{aligned} (f'' - l)(x) &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f''' - l')(y)dy \\ &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{\tau_i}^y (f^{(4)} - l'')(\tau)d\tau dy \quad \text{für ein } x \in (x_i, x_{i+1}), \end{aligned}$$

da nämlich $(f'' - l)(x_i) = 0$ ist für alle $i = 1, \dots, n$ und mit dem Satz von Rolle dann auch $(f''' - l')(\tau_i) = 0$ für alle $i = 1, \dots, n$ mit $\tau_i \in (x_i, x_{i+1})$. Es ergibt sich also in der Maximumsnorm

$$\begin{aligned} \|f'' - l\|_\infty &= \left\| \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{\tau_i}^y (f^{(4)} - l'')(\tau) d\tau dy \right\|_\infty \\ &\leq \|f^{(4)} - l''\|_\infty \left\| \int_{x_i}^{x_{i+1}} \int_{\tau_i}^y d\tau dy \right\|_\infty \\ &= \|f^{(4)} - l''\|_\infty \left\| \int_{x_i}^{x_{i+1}} (y - \tau_i) dy \right\|_\infty \\ &\leq \frac{1}{2} h^2 \|f^{(4)} - l''\|_\infty. \end{aligned}$$

Hier ist h der maximale Abstand zweier Stützstellen x_i und x_{i+1} . Für die Abschätzung aus dem ersten Schritt erhält man also insgesamt

$$\|s'' - f''\|_\infty \leq 4 \|f'' - l\|_\infty \leq 2h^2 \|f^{(4)} - l''\|_\infty. \quad (\star \star \star)$$

Im letzten Schritt benutzen wir noch einmal die Argumentation aus dem zweiten Schritt. Angewendet auf die Differenz von $s - f$ erhalten wir schließlich

$$\|s - f\|_\infty \leq \frac{1}{2} h^2 \|s'' - f''\|_\infty \stackrel{(\star \star \star)}{\leq} \frac{1}{2} h^2 2h^2 \|f^{(4)} - l''\|_\infty = h^4 \|f^{(4)}\|_\infty.$$

Da $l \in \mathcal{N}_1(\mathcal{X})$ war, gilt für die zweite Ableitung $l'' \equiv 0$. Damit ist die Behauptung gezeigt. \square

A.2 Symbolverzeichnis

Variable	Bedeutung
\mathbf{x}	Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ oder $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^d$ mit $d \in \mathbb{N}_{>0}$ (Schriftstärke: Fett)
x	Punkt $x \in \mathbb{R}$ oder $x \in \mathbb{C}$ (Schriftstärke: Normal)
Φ	Radiale Basisfunktion
f	Zu interpolierende Funktion
d	Dimension des Interpolationsproblems
$\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$	Menge der Datenpunkte des Interpolationsproblems
$\mathcal{Y} = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_n\}$	Menge der Datenwerte des Interpolationsproblems
$\mathbf{y} = [f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n)]^T$	Vektor der Datenwerte des Interpolationsproblems
s	Interpolierender Spline
$\mathcal{S}_k(\mathcal{X})$	Raum der Splines vom Grad k zu Datenpunkten \mathcal{X}
$\mathcal{N}_k(\mathcal{X})$	Raum der natürlichen Splines vom Grad k Datenpunkten \mathcal{X}
$\mathcal{H}^2([x_0, x_{n+1}])$	Sobolev-Raum über dem Intervall $[x_0, x_{n+1}]$
M_I	Einfache RBF-Methode
M_{II}	Erweiterte RBF-Methode
\mathcal{P}_f	Interpolant zur Funktion f in Methode M_I und M_{II}
$ f - \mathcal{P}_f $	Fehler der Interpolation \mathcal{P}_f zur Funktion f
q	(Multivariates) Polynom

Variable	Bedeutung
$\deg q$	(Totale) Grad des multivariaten Polynoms q
$A_{ij} = \Phi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$	Interpolationsmatrix der einfachen RBF-Methode
$A\mathbf{c} = \mathbf{y}$	Zu lösendes Gleichungssystem in Methode M_I
$\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$	Menge der Polynome $q : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\deg q = m - 1$
$c_1, \dots, c_n, \gamma_1, \dots, \gamma_M$	Koeffizienten zur Bestimmung von P_f in Methode M_{II}
$psd(d)$	Menge aller positiv semidefiniten Funktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$
$bpsd(m, d)$	Menge bedingt positiv semidefiniter Φ in \mathbb{R}^d (Ordnung: m)
$pd(d)$	Menge aller positiv definiten Funktionen $\Phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$
$bpd(m, d)$	Menge bedingt positiv definiten Φ in \mathbb{R}^d (Ordnung: m)
M	Dimension von $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$
$\{p_1, \dots, p_M\}$	Basis von $\mathcal{P}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$
$\mathcal{U}_{m-1}(\mathbb{R}^d)$	Menge aller $(m - 1)$ -unisolventen Mengen in \mathbb{R}^d
m^*	Kleinste Ordnung $m \in \mathbb{N}_0$ mit $\Phi \in bpd(m, d)$
$h = h_{\mathcal{X}, \Omega}$	fill distance
\mathbf{u}^*	Vektor der kardinalen Basisfunktionen
ε	Shape Parameter
\mathcal{H}	Hilbertraum
K	Reproduzierender Kern
$\mathcal{N}_K(\Omega)$	Native Space
$Q(\mathbf{u})$	Quadratisches Hilfsmittel
$P_{\Phi, \mathcal{X}}(x)$	Power Function
Ω	Gebiet in \mathbb{R}^s bzw. \mathbb{R}^d

Variable	Bedeutung
$\mathcal{P}_f^\varepsilon$	Interpolante der MQ-Methode mit Shape Parameter ε
$\mathbf{b} = [\Phi(\cdot, \mathbf{x}_1), \dots, \Phi(\cdot, \mathbf{x}_n)]^T$	Vektor vom Kern an Stützstellen
$H_K(\Omega) = \text{span}\{K(\cdot, \mathbf{y}) : \mathbf{y} \in \Omega\}$	Prä-Hilbertraum zu Kern K

A.3 Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Bedeutung
RBF	Radiale Basisfunktion
VM	Vollständige Monotonie
PD	Positiv Definit
GA	Gaussian Basisfunktion
IQ	Inverse Quadratics
IMQ	Inverse Multiquadrics
MQ	Multiquadrics
GMQ	Generalized Multiquadrics
RP	Radial Powers
TPS	Thin Plate Spline