Prof. Dr. Reinhard Klein
Alexander Schier

Universität Bonn
Institut für Informatik II
Wintersemester 2023/2024 25.10.2023

Übungen zu Angewandte Mathematik: Numerik - Blatt 3

Die Lösungen für die praktischen Aufgaben müssen bis Donnerstag, den 02.11.2023, um 12:00 im eCampus hochgeladen werden. Die Lösungen zu Theorieaufgaben müssen bis 12:00 in die Postfächer im Raum 0.004 im Hörsaalgebäude eingeworfen oder digital im eCampus abgegeben werden. Bei digitaler Abgabe werden werden keine Scans, Fotos, etc. gewertet.

Aufgabe 1 (Parabel fitten, *6 Punkte*)

Gegeben sind die Punkte

$$\begin{aligned} u_1 &:= -1 & u_2 &:= 0 & u_3 &:= 1 & u_4 &:= 2 \\ v_1 &:= 1 & v_2 &:= 0 & v_3 &:= 2 & v_4 &:= 5. \end{aligned}$$

Bestimme $a, b, c \in \mathbb{R}$ so dass die Parabel $g(x) = a \cdot x^2 + b \cdot x + c$ im Sinne der kleinsten Quadrate möglichst nah an den Punkten liegt. Konstruiere dazu eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{4\times 3}$ und einen Vektor $v \in \mathbb{R}^4$ mit

$$\left\| A \cdot \begin{pmatrix} c \\ b \\ a \end{pmatrix} - v \right\|_2^2 = \sum_{i=1}^{4} (a \cdot u_i^2 + b \cdot u_i + c - v_i)^2$$

und löse das entsprechende lineare Ausgleichsproblem.

Aufgabe 2 (Orthogonalität des Residuums, *2 Punkte*)

Zeige, dass für das Least-Squares Problem

$$y = \arg\min_x \|Ax - b\|_2$$

gilt, dass das Residuum $r = b - Ay$ orthogonal zu $\mathrm{Bild}(A)$ ist.

Hinweis: Benutze dazu die Skalarprodukte zwischen dem Residuum und den Spalten von A, unter Ausnutzung der Tatsache, dass y die Normalengleichung erfüllen muss.

Aufgabe 3 (Thin Plate Splines, *4+4=8 Punkte*)

In vielen praktischen Situationen stellt sich das Problem, dass Messdaten nur an unregelmäßig verteilten Punkten erhoben wurden und aus diesen Daten nun die entsprechenden Werte an anderen Punkten geschätzt werden sollen. Beispiele dafür sind Wetterdaten, die nur an den jeweiligen Messstationen erfasst wurden. Es gibt eine Reihe von verschiedenen Ansätzen dieses "Scattered Data Interpolation Problem" zu lösen, von denen im Folgenden die so genannten Thin Plate Splines implementiert werden sollen. Thin Plate Splines können genutzt werden um Messpunkte $(x_1, y_1)^T, \ldots, (x_m, y_m)^T \in \mathbb{R}^2$ und Messwerte $z_1, \ldots, z_m \in \mathbb{R}$ exakt zu interpolieren, d.h. es wird eine Funktion $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ erzeugt, die

$$\forall i \in \{1, \ldots, m\} : f(x_i, y_i) = z_i$$

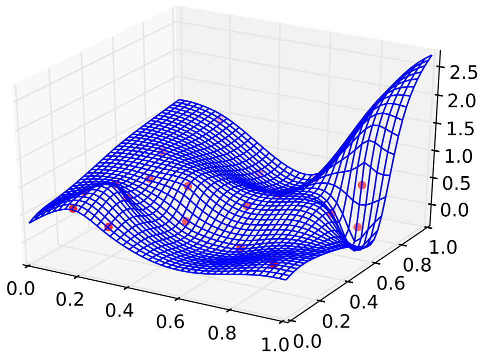

Abbildung 1: Zufällig gewählte Messpunkte (rot) und der resultierende Thin Plate Spline (blau).

erfüllt. Sie simulieren das Biegungsverhalten dünner Metallplatten, die durch die gegebenen Punkte gehen (daher der Name). Zur Konstruktion wird die Funktion $g(r) := r^2 \cdot \log r$ genutzt und f wird definiert wie folgt:

$$f(x, y) := \sum_{j=1}^{m} w_j \cdot g\left(\left\|\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_j \\ y_j \end{pmatrix}\right\|_2\right)$$

Dabei ist $w \in \mathbb{R}^m$ ein zu bestimmender Koeffizientenvektor. Sei $A = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{m \times m}$ mit

$$a_{i,j} = g\left(\left\|\begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_j \\ y_j \end{pmatrix}\right\|_2\right).$$

Es gilt:

$$A \cdot w = (z_1, \ldots, z_m)^T \quad \Leftrightarrow \quad \forall i \in \{1, \ldots, m\} : f(x_i, y_i) = z_i.$$

Nun soll an zufällige Daten ein Thin Plate Spline gefittet werden. Das bereitgestellte Framework produziert bei einer richtigen Lösung eine Ausgabe ähnlich der in Abbildung 1.

a) Schreibe eine Funktion `ComputeTPSWeights(X,Y,Z)`, die zu gegebenen Messungen den Koeffizientenvektor w für den Thin Plate Spline berechnet.

   Hinweis: Zum Lösen linearer Gleichungssysteme kann `numpy.linalg.solve` verwendet werden. Es kann Probleme geben, wenn bei der Berechnung der Diagonaleinträge von A $\log(0)$ evaluiert wird. Die Funktion $g(r)$ hat aber einen wohldefinierten Limes in 0. Daher sollte r durch $\max\{r, 10^{-8}\}$ ersetzt werden.

b) Schreibe eine Funktion `EvaluateTPSSpline(XNew,YNew,X,Y,Weights)`, die unter Verwendung der Ein- und Ausgabe `X`, `Y`, `Weights` von `ComputeTPSWeights(...)` den Thin Plate Spline f an den durch `XNew` und `YNew` gegebenen Stellen evaluiert.

Bonusaufgabe 4 (Induzierte Metrik, *2 Punkte*)

Sei X eine Menge, dann ist $d : X \times X \to \mathbb{R}$ eine Metrik auf X, wenn für $x, y, z \in X$ gilt:

$$\text{Positive Definitheit:} \quad d(x, y) \geq 0 \text{ und } d(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y \tag{1}$$

$$\text{Symmetrie:} \quad d(x, y) = d(y, x) \tag{2}$$

$$\text{Dreiecksungleichung:} \quad d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z). \tag{3}$$

a) Sei V ein Vektorraum und $\|\cdot\|$ eine Norm auf V. Zeige, dass $d(x,y) := \|x-y\|$ eine Metrik auf V ist.