

Mecánica Computacional Vol. XXII
M. B. Rosales, V. H. Cortínez y D. V. Bambill (Editores)
Bahía Blanca, Argentina, Noviembre 2003.

**FUNCTION ESTIMATION USING A DATA-ADAPTIVE
LAPLACIAN SMOOTHER**

Gloria Simonetti, Amal Azzam y Carlos Zuppa

Departamento de Matemática. Universidad Nacional de San Luis.
Chacabuco y Pedernera, (5700) San Luis, Argentina.
e-mail: zuppa@unsl.edu.ar

Key Words: Nash iteration, nonlinear PDEs, smoothing operator.

Abstract. In several applications of Nash iteration for solving nonlinear PDES, it is customary to use approximate smoothing, based on the solution of evolution equations with calibrated time steps. The aim of this work is to present a simple adaptive smoothing procedure based on the solutions of Dirichlet boundary-value problems. The smoother is an improvement of procedures used, among other applications, in optimization problems in image processing. This work presents a description of the method and some numerical tests. A simple nonlinear one dimensional PDE is solved using a Nash iteration scheme in order to illustrate the use of this approximate smoothing.

1. INTRODUCCIÓN

La iteración de Nash fue introducida por J. Nash¹⁰ y sistematizada en forma de un teorema generalizado de funciones implícitas por J. T. Schwartz¹¹ y J. Moser.^{8,9} Moser desarrolló también en los mencionados trabajos la aplicación de tal teorema para resolver PDEs no lineales. Dichos trabajos introducen la regularización o suavización como un paso post-condicionador importante en la aplicación del método de Newton. Esta metodología fue desarrollada en detalle por J. W. Jerome.⁶ De igual manera que los métodos lineales de multi-grilla¹ este tipo de metodología tiene dos pasos fundamentales: suavizar en la grilla corriente y corregir el error en una grilla más gruesa. La suavización tiene el efecto de disminuir la parte oscilatoria del error. Por otra parte, la suavización permite obtener no solo superconvergencia sino mayor claridad de definición en la forma y contorno de la solución. G. E. Fasshauer³⁻⁵ ha desarrollado este tipo de metodología usando como suavizador la solución numérica de una ecuación de evolución con pasos de tiempo calibrado donde los operadores espaciales son el laplaciano o el operador biarmónico.

El objetivo de este trabajo es introducir un suavizador que resulta como solución de un problema de contorno de Neumann que muestra en nuestras primeras experiencias numéricas un muy buen desempeño. Este suavizador también puede usarse en problemas típicos de estimar una función con datos alterados por ruidos. En general, el suavizador produce resultados sin alterar los picos ni la forma original de la función.

2. ITERACIONES DE NEWTON EN MULTI-NIVELES

Por razones de espacio y simplicidad, no haremos una descripción del resultado de Nash, sino que introduciremos solamente el esquema utilizado en la resolución de problemas no lineales con las iteraciones aproximadas de Newton.³⁻⁵

En lo que sigue, denotamos una PDE no lineal genérica con

$$\mathcal{L}u = f,$$

donde $f \in X$ y $u \in Y$ son espacios de Sobolev apropiados. Denotamos el problema linealizado en u_{k-1} mediante la fórmula

$$L_{u_{k-1}}v = f - \mathcal{L}u_{k-1}.$$

El esquema de Newton aproximado con post condicionamiento es:

$$\begin{aligned} L_{u_{k-1}}v &= f - \mathcal{L}u_{k-1}, \\ u_k &= u_{k-1} + \mathcal{S}v, \end{aligned}$$

donde \mathcal{S} es el suavizador.

Este algoritmo básico puede ser interpretado en diversos esquemas. En particular, en las clásicas metodologías de multi-grillas. Una descripción detallada del algoritmo para grillas encadenadas se encuentra en,³⁻⁵ donde también se encuentra un análisis de la importancia

de una suavización correcta. El algoritmo básico de iteraciones encadenadas es como sigue. Fijamos un número N de grillas computacionales encadenadas $\mathcal{X}_1 \subset \mathcal{X}_2 \subset \dots \subset \mathcal{X}_N$. Es en la grilla más fina \mathcal{X}_N donde queremos conocer la aproximación de Newton. La jerarquía de grillas es usada para obtener v resolviendo los problemas linealizados en dichas grillas. El algoritmo es:

- $u_0 = 0$.
- for $k = 1, 2, 3, \dots$
 1. $v_0 = 0$.
 2. for $l = 1, 2, \dots, N$
 - a) Resolver el problema lineal $L_{u_{k-1}} w_l = f - \mathcal{L}u_{k-1} - L_{u_{k-1}} v_{l-1}$ en \mathcal{X}_l .
 - b) $v_l = v_{l-1} + w_l$.
 - c) $L_{u_{k-1}} v_N = f - \mathcal{L}u_{k-1}$.
 - d) Suavizar la corrección: $u_k = u_{k-1} + \mathcal{S}v_N$.

3. APROXIMACIÓN SUAVIZADA VIA UN OPERADOR ELÍPTICO

Consideraremos aquí un problema común en física: cómo estimar una función suave cuando los datos están distorcidos por errores. Trataremos aquí el caso unidimensional. La generalización a dimensiones mayores, aunque un poco más trabajosa, es inmediata. Asumimos que la señal desconocida es medida en $\{t_i : i = 1, \dots, N\}$ y las mediciones satisfacen $y_i = g(t_i) + \varepsilon_i$ donde los errores ε_i son independientes con media igual a cero y varianza σ^2 . Una manera standard de obtener una aproximación de g es mediante promedios locales con funciones de peso hábilmente elegidas (los núcleos suavizadores). Los núcleos deben elegirse correctamente para evitar en lo posible la deformación que se produce naturalmente de la forma de la función g . En general, este esquema necesita de términos correctores que se obtienen de estimaciones de la derivada segunda en un esquema adaptativo y con técnicas de análisis estadístico (ver Riedel-Sidorenko⁷ por ejemplo).

Otro esquema utilizado habitualmente en procesamiento de imágenes es determinar la función g es como solución de

$$-Lg + kg = y, \quad (1)$$

donde k es una constante positiva, L un operador elíptico de segundo orden (por ejemplo, d^2/dt^2), y la PDE se resuelve mediante algún proceso de discretización en la grilla $\{t_i\}$. Cuando el k es muy grande los valores g_i son prácticamente iguales a y_i . Reduciendo k se obtiene una suavización de los valores $\{y_i\}$. Este esquema también disminuye los picos de la función y es necesario un término corrector. Por otra parte, la ecuación (1) debe ser resuelta con condiciones de contorno apropiadas.

Introduciremos aquí un esquema que mezcla las dos metodologías: los núcleos suavizadores de Riedel-Sidorenko⁷ y el problema elíptico (1) con condiciones de contorno de tipo Neumann. A grosso modo, el algoritmo es como sigue:

- Determinar condiciones de Neumann apropiadas para (1). Este paso se realiza mediante la obtención de polinomios de mejor aproximación en los bordes, utilizando funciones de peso parabólicas como en Riedel -Sidorenko(biblio...).
- Suavizar los datos $\{y_i\}$ con algunos pasos del proceso de Riedel -Sidorenko.
- Resolver (1) con las condiciones de borde tipo Neumann con los datos obtenidos en el primer y segundo paso y obtener g_1 .
- Suavizar los datos $\{g_1 - y\}$ con algunos pasos del proceso de Riedel -Sidorenko.
- Agregar a la solución el término corrector $g_1 - y$.

Ciertamente, hay en este proceso una gran cantidad de parámetros involucrados y sobre los cuales es necesario un mayor estudio para tratar de determinarlos óptimamente. Una descripción más detallada de estas cuestiones aparecerá en un trabajo próximo.

Cuando se trabaja con condiciones de Dirichlet conocidas, como podría ocurrir en las aplicaciones del suavizador en los problemas de la sección anterior, es necesario en cada paso corregir los datos del borde en la función suavizada. Es un hecho curioso que merece un análisis más detallado el hecho que usar condiciones de Neumann aunque las de Dirichlet sean conocidas, produce en general mejores resultados.

Mostraremos ahora algunos ejemplos de suavización. En el primer ejemplo, consideramos la función $g(t) = \sin(4\pi t^2)$ perturbada por un ruido random normal de media igual a cero y $\sigma = 0,1$. Los datos se obtienen en un grilla en el intervalo $[0, 1]$ con $h = 1/128$. Las repeticiones de Riedel-Sidorenko igual a 8, y la cantidad de datos alrededor del borde para determinar las condiciones de Neumann igual a 9. La figura 1 muestra el resultado de la suavización con un valor de $k = 100$, y la figura 2 con $k = 1000$.

La figura 3 muestra el resultado de suavización en datos de bajo valor absoluto obtenidos en ciertos procesos de Monte Carlo en simulación de ciertos procesos de física de superficie. Aquí, los valores utilizados son $k = 4000$ y la repetición de Riedel-Sidorenko se bajó a 3.

Observese que el suavizador conserva bastante bien la forma y los picos de los datos aunque aquí se ha efectuado solamente una iteración del suavizador. Se puede mejorar el resultado en un proceso adaptivo con buenas estimaciones de la derivada segunda, de igual modo que en Riedel-Sidorenko,⁷ pero no es este el objetivo aquí.

4. UN EXPERIMENTO NUMÉRICO SIMPLE

Si bien el el esquema de Nash esta diseñado específicamente para problemas no lineales, desarrollaremos aquí solamente una ilustración del algoritmo en el problema lineal:

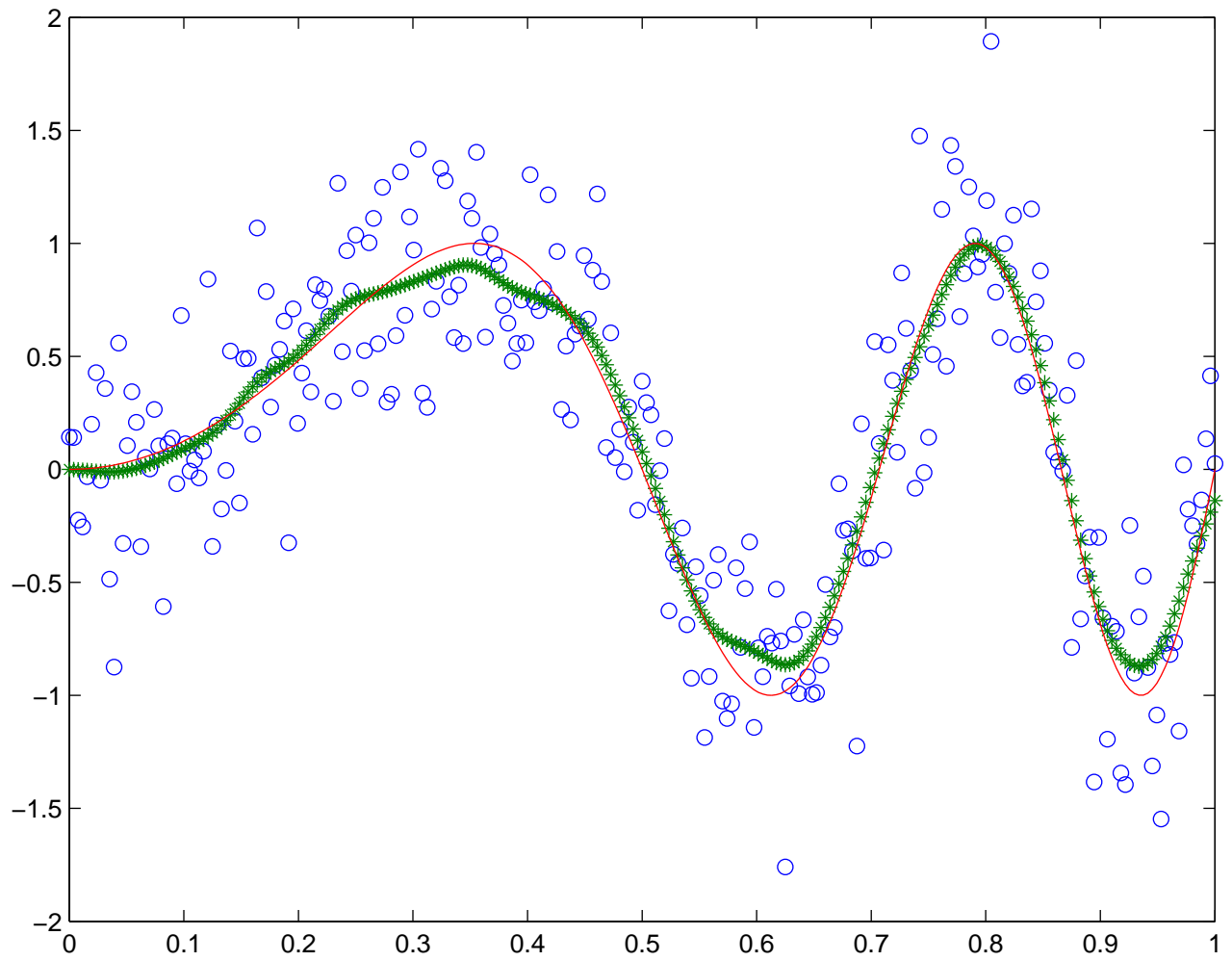


Figura 1: $k = 100, \sigma = 0,1$

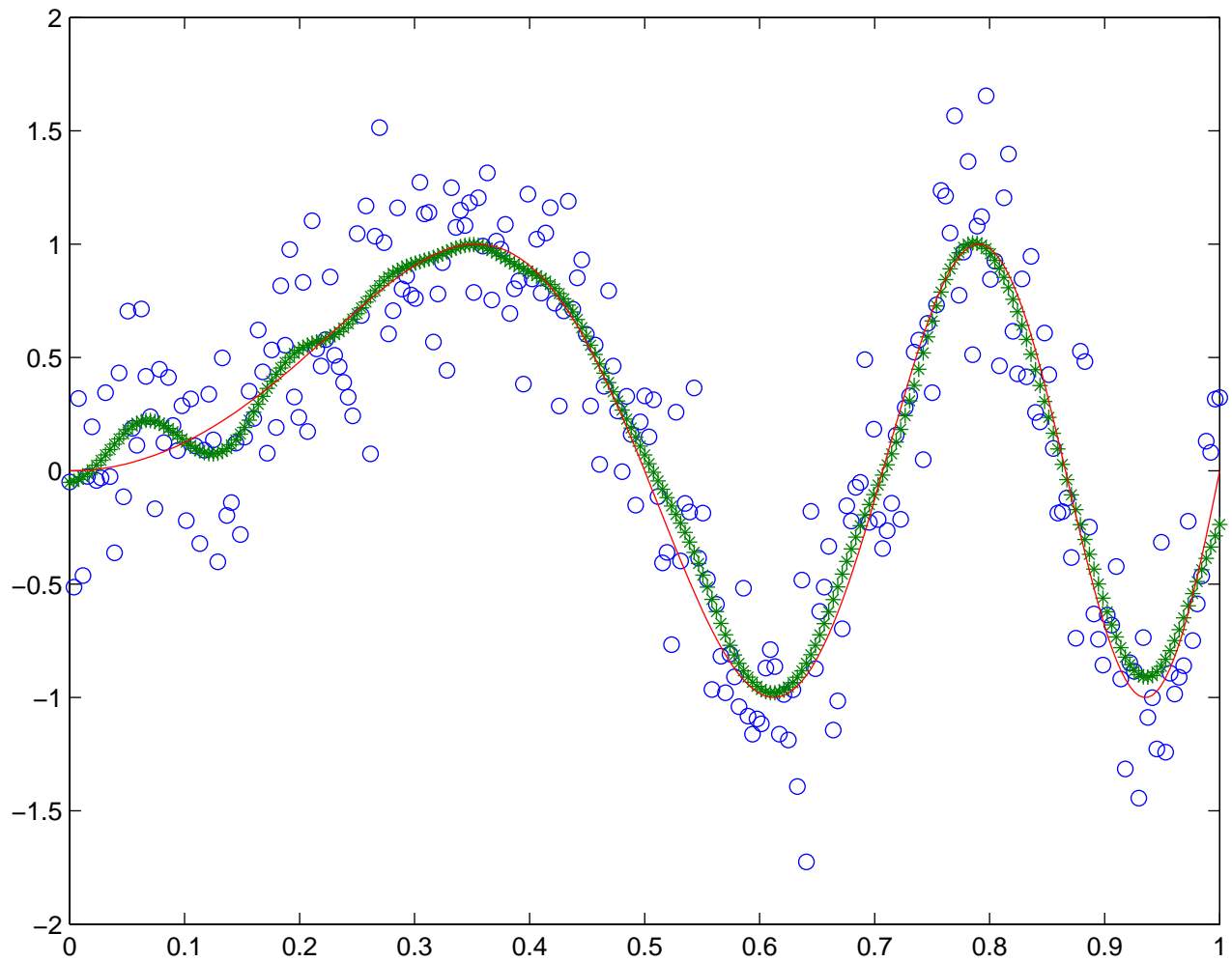


Figura 2: $k = 100, \sigma = 0,1$

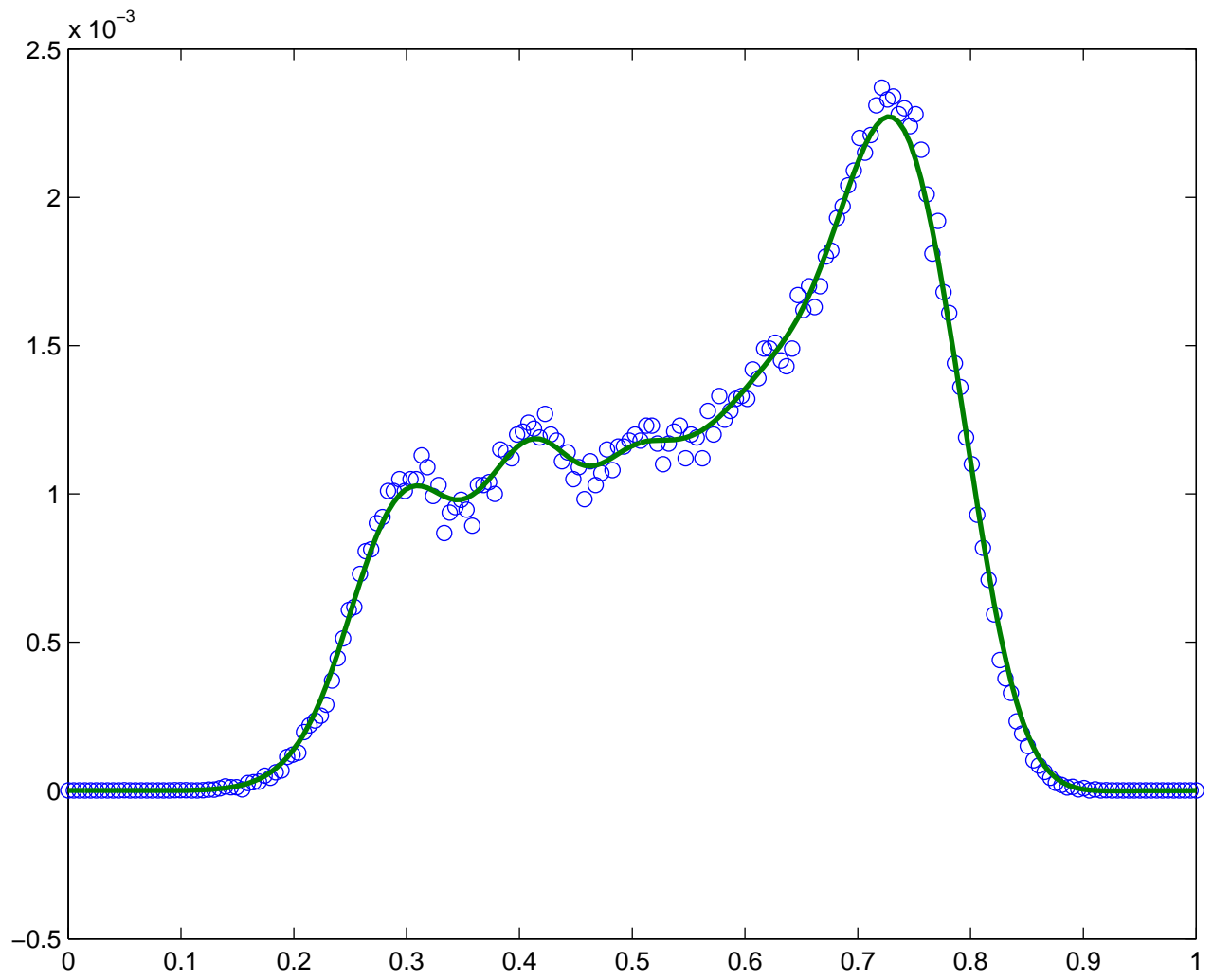


Figura 3: $k = 4000$

$$\begin{aligned}
 -u''(x) + \pi^2 u(x) &= 2\pi^2 \sin(\pi x), & x \in (0, 1), \\
 u(0) &= u(1) = 0.
 \end{aligned}$$

La solución de este problema es $u(x) = \sin(\pi x)$.

Las condiciones para este test son: usamos el algoritmo de la sección anterior en cinco grillas de 5, 9, 17, 33 y 65 puntos igualmente espaciados para la iteración interna. Para resolver la ecuación emplearemos el esquema de colocación LOPI expuesto en Zuppa-Cardona.² Después de obtener una solución aproximada en \mathcal{X}_5 , usamos el operador de suavización. Las demás condiciones del test están descritas en detalle en G. E. Fasshauer et al.⁵ Los beneficios de retornar a la grilla más gruesa se evidencian en la segunda iteración. Comparamos con los resultados de G. E. Fasshauer et al., que usan colocación con RBF compactas y un procedimiento de suavización con el operador temporal biarmónico, en la tabla siguiente. Las columnas 2, 3 son nuestros resultados, y las dos siguientes muestran los resultados de G. E. Fasshauer.

Iteración	l_2 -error	Velocidad	l_2 -error	Velocidad
1(65)	$1,178397 \times 10^{-5}$		$2,062621 \times 10^{-6}$	
2(65)	$2,118022 \times 10^{-9}$	11,33	$2,618147 \times 10^{-9}$	9,62

5. CONCLUSIONES

Un estudio más detallado de las propiedades del suavizador es necesario, especialmente en la influencia de los parámetros que intervienen. La determinación del mejor valor de k requiere un estudio adicional. Por otra parte, es importante destacar que el valor de k puede ser variable en la grilla atendiendo a las necesidades locales de adaptividad. Pero estos primeros ejemplos muestran que el operador de suavización definido aquí tiene potencialidades y la flexibilidad suficiente para constituirse en una buena herramienta de suavización de datos.

REFERENCIAS

- [1] S.C. Brener and L.R. Scott, *The mathematical theory of finite elements methods*, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [2] A. Cardona C. Zuppa, *A collocation meshless method based on local optimal point interpolation*, Int. J. Num. Meth. Engrg. **57** (2003), 509–536.
- [3] G. E. Fasshauer, *Solving differential equations with radial basis functions: multilevel methods and smoothing*, Adv. Comput. Math. **11** (1999), 139–159.
- [4] J. W. Jerome G. E. Fasshauer, *Multistep approximation algorithms: Improved convergence rates though postconditioning with smoothing kernels*, Adv. Comput. Math. **10** (1999), 1–27.

- [5] J. W. Jerome G. E. Fasshauer, E. G. Garland Jr., *Algorithms defined by nash iteration: some implementations via multilevel collocation and smoothing*, J. Comp. Appl. Math. **119** (2000), 161–183.
- [6] J. W. Jerome, *An adaptive newton algorithm based in numerical inversion: regularization and postconditioner*, Numer. Math. **47** (1985), 123–138.
- [7] A. Sidorenko K. S. Riedel, *Function estimation using data-adaptive kernel smoothers - how much smoothing?*, Comp. in Physics **8(4)** (1994), 462–469.
- [8] J. Moser, *A new technique for the construction of solutions of nonlinear differential equations*, Proc. Nat. Acad. Sci. **47** (1961), 1824–1831.
- [9] ———, *A rapidly convergent iteration method and nonlinear partial differential equations i*, Ann. Scuola Norm. Pisa **XX** (1966), 265–315.
- [10] J. Nash, *The imbedding problem for riemannian manifolds*, Ann. Math. **63** (1956), 20–63.
- [11] J. T. Schwartz, *On nash's implicit function theorem*, Comm. Pure Appl. Math. **13** (1960), 509–530.