2
Interpolação usando Funções de Base Radial

2.1
Introdução

Seja $\mathcal{S} = \{(\mathbf{x}_1, f_1), (\mathbf{x}_2, f_2), \ldots, (\mathbf{x}_N, f_N)\}$ um conjunto de pares de pontos, onde $f_i \in \mathbb{R}$ corresponde ao valor de uma função f amostrada no ponto $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^s$, para $i = 1, \ldots, N$. Considere ainda, que os pontos $\mathbf{x}_i$ são distintos, isto é $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j$, para $i \neq j$.

A aproximação numérica consiste no processo de determinar uma função $\hat{f}$ capaz de estimar o valor da função f em posições arbitrárias $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^s$ a partir do conjunto de dados $\mathcal{S}$. Nas posições $\mathbf{x}_i$, $i = 1, \ldots, N$, os valores estimados pela função $\hat{f}$ não precisam ser iguais aos conhecidos f_i. Esta peculiaridade distingue os conceitos de aproximação e interpolação.

Quando os dados estão arbitrariamente posicionados, isto é, sem seguir nenhuma estrutura regular, um método comumente escolhido é o baseado em funções de base radial (*Radial Basis Functions* – RBFs), devido as suas boas propriedades de aproximação e a sua característica de ser independente da dimensão do espaço onde os dados estão mergulhados.

As *funções de base radial* são funções multivariadas que apresentam simetria radial. A definição de uma RBF pode ser feita da seguinte forma:

Definição 1. *Uma função $\Phi : \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}$ é de base radial desde que exista uma função univariada $\varphi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ tal que*

$$\Phi(\mathbf{x}) = \varphi(r)$$

onde $r = \|\mathbf{x}\|$ e $\|\cdot\|$ é alguma norma sobre $\mathbb{R}^s$.

A função Gaussiana univariada $\varphi(r) = e^{-\epsilon^2 r^2}$ é comumente utilizada em estatística e seu parâmetro de forma ϵ está relacionado com a variância σ^2 da função de distribuição normal por $\epsilon = \frac{1}{2\sigma^2}$. Da composição da função Gaussiana com a função distância euclidiana $\|\cdot\|_2$, obtem-se, para qualquer centro fixo $\mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^s$, a função de base radial $\Phi_k(\mathbf{x}) = e^{-\epsilon^2 \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|_2^2}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^s$.

As funções de base radial possuem a propriedade de serem invariantes sob todas transformações Euclideanas (translações, rotações, e reflexão). Esta é uma consequência imediata, visto que as transformações Euclideanas são caracterizadas por transformação de matrizes ortogonais e, portanto, invariantes em relação à norma.

Elas têm sua origem na teoria da interpolação de dados e formam uma classe especial de funções. Em geral, são funções não-lineares cujos valores crescem ou decrescem monotonicamente, em relação à distância de um ponto central (**?**). Tal ponto normalmente é chamado de *centro* da função de base radial (**?**).

Dentre as aplicações práticas nas quais as RBFs têm demonstrado grande utilidade, destacam-se:

– procesamento de imagens;

– interpolação de dados multidimensionais ou distribuições, tais como medidas de densidade, temperatura, potencial elétrico, etc.;

– aprendizagem estatística;

– solução numérica de equações diferenciais parciais.

2.1.1 Funções de Base Radial

Uma função de base radial com centro em $\mathbf{x}_k$ é dita ter *suporte compacto* quando ela é nula e a distância entre qualquer ponto $\mathbf{x}$ e o seu ponto central $\mathbf{x}_k$ é maior do que um certo limiar.

A maior parte das funções RBF tem um parâmetro ϵ que ajusta a forma da função. A escolha deste parâmetro é um fator importante na precisão numérica do método, pois controla o quão "achatadas"as funções φ podem ser, pois, quanto maior for o achamento, mais suaves são as soluções por RBF.

Algumas funções de base radial clássicas podem ser vistas na Tabela(2-1).

Tabela 2.1: Alguns tipos clássicos de funções de base radial.

Função de Base Radial	$\varphi(r)$	Parâmetros
Gaussiana	$e^{-(\epsilon r)^2}$	$\epsilon \in \mathbf{R}^+$
Multiquádrica Inversa	$\frac{1}{\sqrt{r^2+\epsilon^2}}$	$\epsilon \in \mathbf{R}^+$
Inversa Quadrática	$(r^2+\epsilon^2)^{-1}$	$\epsilon \in \mathbf{R}^+$

Na figura 2.1 podem ser observados alguns exemplos destas funções para o caso unidimensional e bidimensional, e para diferentes valores do parâmetro de forma ϵ.

2.2
O problema de interpolação de dados esparsos

Dado o conjunto de dados $\mathcal{S} = \{(\mathbf{x}_j, f_j)\}_{j=1,\ldots,N}$, onde $\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^s$ e $f_j \in \mathbb{R}$ representa a amostragem de uma função suave desconhecida $f : \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}$ no ponto $\mathbf{x}_j$, deseja-se encontrar uma função $P_f : \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}$ tal que

$$P_f(\mathbf{x}_j) = f_j, j = 1, \ldots, N. \tag{2-1}$$

Frequentemente, assume-se que P_f seja uma combinação linear de um conjunto de funções $\Phi_j : \mathbb{R}^s \to \mathbb{R}$, isto é:

$$P_f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} c_j \Phi_j(\mathbf{x}). \tag{2-2}$$

onde c_j são coeficientes escalares. Uma vez que as Φ_j são escolhidas, os valores de c_j são determinados de forma que P_f satisfaça as condições (2-1). Essas condições, de fato, geram um sistema de equações lineares. Em outras palavras, o problema de determinar esses coeficientes pode ser resolvido obtendo a solução de um sistema linear, que na sua forma matricial é escrita como:

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \mathbf{f}, \tag{2-3}$$

onde

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \varphi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|) & \varphi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|) & \cdots & \varphi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_1\|) \\ \varphi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|) & \varphi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_2\|) & \cdots & \varphi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_2\|) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_N\|) & \varphi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_N\|) & \cdots & \varphi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_N\|) \end{bmatrix}$$

é chamada de matriz de interpolação,

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix}$$

é chamado de vetor dos coeficientes e

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix}$$

é chamado de vetor das imagens conhecidas.

2.3
Interpolação RBF

O método de interpolação RBF padrão para o problema de ajuste de dados assume que o interpolante P_f é uma combinação linear de funções de base radial, isto é:

$$P_f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} c_j \varphi \left(\frac{||\mathbf{x} - \mathbf{x}_j||}{h} \right), \tag{2-4}$$

para alguma função univariada $\varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$. O parâmetro de escala h usado na definição da função P_f é dado pela seguinte escolha $h = \sup_{\mathbf{x}\in\Omega} \min\{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|_2 : j = 1, \ldots, N\}$. Em outras palavras, o interpolador RBF substitui $\Phi_j(\mathbf{x})$ por $\varphi \left(\frac{||\mathbf{x}-\mathbf{x}_j||}{h} \right)$.

Pode-se garantir que a matriz de interpolação

$$\mathbf{A} = \left\{ \varphi \left(\left\| \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{h} \right\| \right)_{i,j=1}^{N} \right\}$$

é não singular quando φ for uma função base radial definida positiva estritamente, sobre $\mathbb{R}^s$. Esse conceito será visto na próxima seção.

A interpolação RBF é um método livre de malha e possui várias vantagens e importantes propriedades teóricas. Um interpolante RBF é menos sensível à dimensão espacial e é a melhor solução no espaço normal com produto interno escolhido. A desvantagem do método de interpolação RBF é que, para dados de tamanho N de valor grande, a resolução do sistema linear é uma tarefa difícil, especialmente quando a função base escolhida gera uma matriz de interpolação $\mathbf{A}$ densa e mal-condicionada.

2.4
Funções estritamente positivas definidas

O conceito de *matriz definida positiva* é habitual em álgebra linear, mas aqui é fornecida a sua definição precisa a fim de fazer um contraste com o conceito de uma função definida positiva.

Definição 2. *Uma matriz $\boldsymbol{A}$ real simétrica é chamada semi-definida positiva, se sua forma quadrática associada satisfaz:*

$$\mathbf{c}^T \mathbf{A} \mathbf{c} = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} c_i c_j \mathbf{A}_{ij} \geq 0,$$

para qualquer vetor real $\mathbf{c}= [c_1, \dots, c_2]^T$. *Se o único* $\mathbf{c}$ *que faz valer a igualdade acima é o vetor* $\mathbf{0}$, *então* $\mathbf{A}$ *é dita ser uma matriz definida positiva.*

Uma propriedade importante da matriz definida positiva é que todos os seus autovalores são positivos e, portanto, ela é não singular.

O conceito de função definida positiva vem da análise funcional, e ele é dado por:

Definição 3. *Uma função* $\Phi : \mathbb{R}^s \to \mathbb{C}$ *é dita ser uma função semi-definida positiva sobre* $\mathbb{R}^s$ *se sua forma quadrática satisfaz:*

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

para qualquer vetor complexo $\mathbf{c}= [c_1, \dots, c_N]^T \in \mathbb{C}^N$, *dados* $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N \in \mathbb{R}^s$ *distintos. Se o único* $\mathbf{c}$ *que faz valer a igualdade é o vetor* $\mathbf{0}$, *então* Φ *é dita ser uma função definida positiva sobre* $\mathbb{R}^s$.

O valor da forma quadrática pode ser complexo. No entanto, é considerado o conceito de funções definida positiva somente no caso em que a forma quadrática é real.

Uma vez que a função radial é associada com uma função univariada $\Phi(\mathbf{x}) = \varphi(\|\mathbf{x}\|)$, é conveniente também referir-se à função φ como definida positiva sobre $\mathbb{R}^s$.

Se φ é definida positiva e radial sobre $\mathbb{R}^s$, esta é positiva definida e radial sobre $\mathbb{R}^\sigma$, para todo $\sigma \leq s$.

Se uma função de base radial definida positiva φ é usada como uma função base no problema de interpolação de dados esparsos, isto é, na determinação dos coeficientes c_j da função

$$P_f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} c_j \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|),$$

então é garantido que cada c_j será unicamente determinado para satisfazer as condições de interpolação desejadas.

2.5 Selecionando o melhor parâmetro de forma para RBF

As funções de base radial (RBF) possuem um parâmetro de forma livre que desempenha um papel importante para a precisão do método interpolador ou aproximador. Uma estratégia popular para estimar o parâmetro de forma ϵ, baseado nos dados amostrais $(\mathbf{x}_i, f(\mathbf{x}_i)), i = 1, \ldots, N$, é o método chamado de validação cruzada (*cross validation*), que é bastante conhecido em estatística. Em (**?**) um algoritmo é descrito para determinar o valor para o parâmetro de forma, e este corresponde a uma variação do método de validação cruzada e é conhecido como *"leave-one-out cross validation"* (LOOCV). Neste algorítmo um valor ótimo do parâmetro de forma ϵ é selecionado minimizando uma função custo que coleciona erros para uma sequência de previsões parciais dos dados.

O algoritmo consiste em:

Passo 1: Fixe um valor para ϵ_i dentro de um conjunto pré-determinado de valores.

Passo 1.a: Para $k = 1, \ldots, N$
Calcule o erro estimado no k-ésimo ponto amostral:

$$e_k = \left| f(\mathbf{x}_k) - P_f^{[k]}(\mathbf{x}_k) \right|.$$

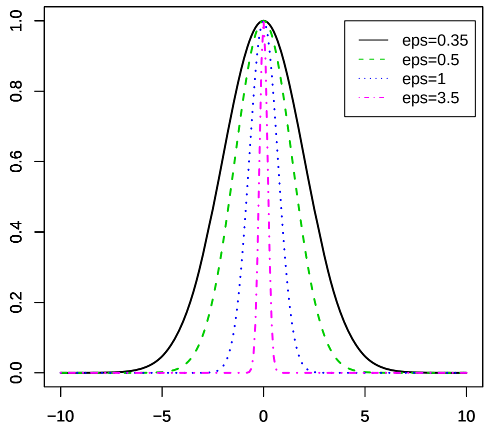
Passo 1.b: Construa o vetor custo $\mathbf{e}_i = [e_1, \ldots, e_N]^t$.

Passo 2: O valor ótimo para o parâmetro ϵ é dado minimizando $\|\mathbf{e_i}\|^2$.

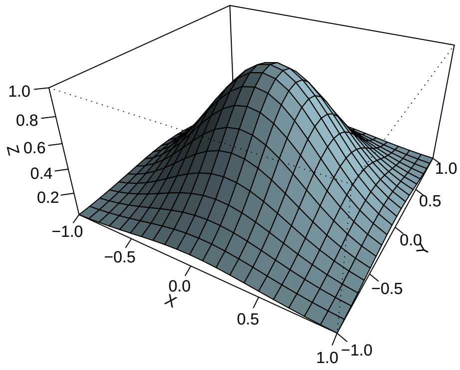
Rippa, em (**?**), mostra que o algorítmo pode ser simplificado por uma simples fórmula dada por:

$$e_k = \frac{c_k}{\mathbf{A}_{kk}^{-1}},$$

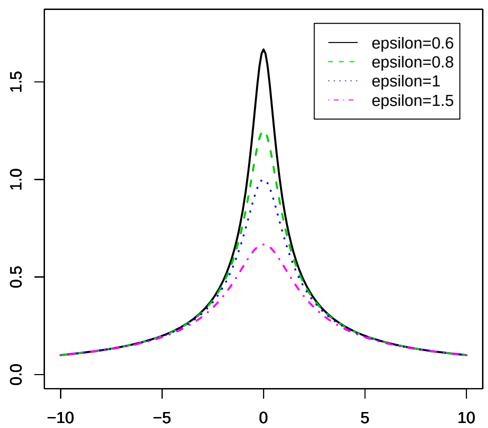
onde c_k o k-ésimo coeficiente na expans ao do interpolante P_f baseado na amostra, e $\mathbf{A}_{kk}^{-1}$ é o k-ésimo elemento diagonal, correspondente a inversa da matriz de interpolação $\mathbf{A}$.



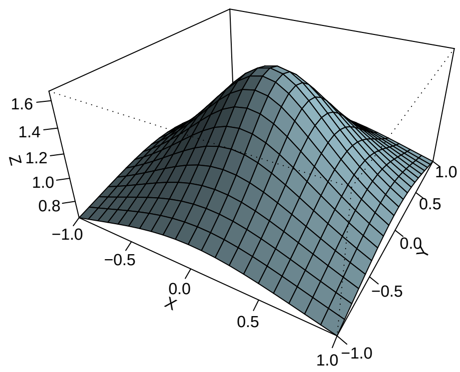
(a) - Gaussiana $s = 1$.



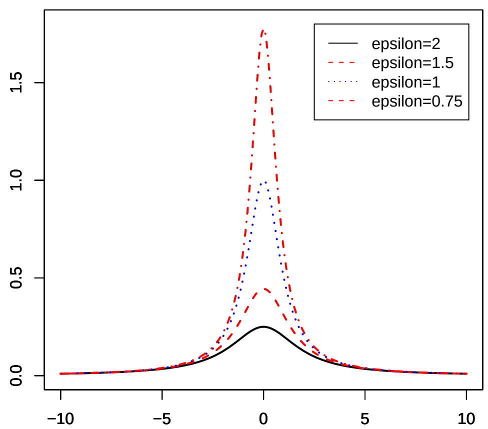
(b) - Gaussiana $s = 2$.



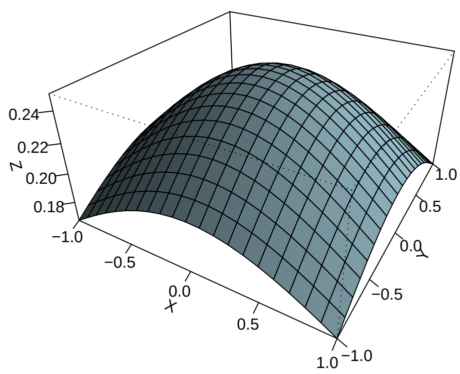
(c) - Multiquádrica Inversa $s = 1$.



(d) - Multiquádrica Inversa $s = 2$.



(c) - Quadrática inversa $s = 1$.



(f) - Quadrática inversa $s = 2$.

Figura 2.1: Exemplos gráficos de funções de base radial.