3 Interpolação via Aproximação Iterada AMLS

O método denominado "mínimos-quadrados-móveis aproximados iterados" (IAMLS) (?) é capaz de gerar uma família de modelos que capturam os detalhes do objeto original por meio da manipulação de um parâmetro de forma e do número de iterações. Além disso, o método é livre da solução de sistemas lineares. Esta abordagem é inspirada nos recentes resultados que conectam o método "mínimos-quadrados-móveis aproximados" com o método de funções de base radiais.

É possível que um interpolante RBF padrão P_f e um aproximante AMLS Q_f compartilhem o mesmo conjunto de funções base, por exemplo, com funções geradas por uma Laguerre-Gaussiana ou uma Multiquádrica Inversa Generalizada. Neste capítulo será descrito o método de aproximação AMLS e será explicado como uma primeira aproximação $Q_f^{(0)}$ pode ser utilizada para aproximar o correspondente interpolante P_f , por um processo de iteração residual.

3.1 Mínimos-quadrados-móveis aproximados - AMLS

O método dos mínimos-quadrados-móveis aproximados (Approximate moving least-squares - AMLS) (?) é um mecanismo computacionalmente eficiente e livre de sistemas lineares que obtem aproximações de ordem elevada. Porém ele tem a restrição de que os pontos de entrada precisam estar regularmente espaçados. Por outro lado, as funções de bases radiais (RBF) são métodos interpolatórios, como argumentado por Fasshauer em (?) que garantem a melhor aproximação na norma induzida do espaço das funções bases. Na prática instabilidades numéricas podem surgir durante o cálculo das interpolações por RBF devido à natureza do sistema linear que precisa ser resolvido (que. em geral, é grande e mal-condicionado).

Recentemente, Fasshauer apresentou uma versão iterativa do AMLS, que foi denominada de AMLS iterado (*iterated approximate moving-least-squares* - *IAMLS*) (?), no qual, além de conectar as duas abordagens acima ainda é capaz de amenizar o problema de ambas - a restrição quanto à regularidade

dos pontos (AMLS) e o mal-condicionamento do sistema linear (RBF). Esse método gera uma sequência de soluções aproximadas pelo AMLS que converge para uma solução de interpolação de funções de base radial. O que torna o método capaz de lidar com pontos irregularmente espaçados. Como ele é baseado no AMLS, não existe a necessidade da solução de sistemas lineares e, consequentemente, o problema de instabilidade numérica é evitado.

Fasshauer ao definir o AMLS inspirou-se nos trabalhos de Maz'ya (?), que propôs um método de interpolação denominado quasi-interpolante. Esse método é livre de sistemas de equações lineares e possui um mecanismo numericamente eficiente: a definição de um parâmetro que, quando propriamente definido, permite deixar o erro da aproximação tão pequeno de modo que os tipos numéricos de ponto flutuante do computador não sejam capazes de representar tal erro. Maz'ya desenvolveu esse mecanismo originalmente para a solução numérica de operadores diferenciais, tais como operadores integrodiferenciais multidimensionais.

Fasshauer observou que tal "aproximação aproximada" poderia ser vista como a versão do MLS de Backus-Gilbert (?). Além disso, Fasshauer apresentou métodos para eficientemente definir tal aproximação, propondo a aproximação por minimos-quadrados-móveis aproximados.

Os ingredientes chave nesta abordagem sugerida por Maz'ya (Approximate Aproximation) são as condições de momento contínuo para a função base φ , que podem ser descrita como

$$\int_{\mathbb{R}^{s}} \|\mathbf{x}\|^{k} \varphi(\|\mathbf{x}\|) dx = \delta_{0} \text{ para } 0 \leq k \leq d.$$

De acordo com a teoria (?), uma função base φ que satisfaz estas condições tem o seguinte resultado.

Teorema 1. Sejam $f \in C^{(d+1)}$ uma função, $x_j \in \mathbb{R}^s$ pontos uniformente espaçados, ϵ um número real positivo e Φ uma função geradora contínua que satisfaz as condições de momento contínuo. Então o quasi-interpolante

$$Q_f(\mathbf{x}) = \epsilon^s \sum_{j=1}^N f(\mathbf{x}_j) \varphi\left(\epsilon \left\| \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_j}{h} \right\| \right)$$

aproximadamente resolve o problema de aproximar dados com uma convergência garantida, da seguinte forma:

$$||f - Q_f||_{\infty} = O(h^{d+1}) + \xi(\phi, \epsilon),$$

onde h é o parâmetro de escala que ajusta a distância entre os pontos. A quantidade $\xi(\phi,\epsilon)$ é referido como um erro de saturação, e este depende somente da função base φ e do parâmetro de escala ϵ .

Uma grande vantagem do método AMLS é que as condições de momento contínuo preveêm a possibilidade de obter explicitamente uma função base φ . Por exemplo, alguma φ integrável normalizada irá satisfazer as condições de momento contínuo para d=0.

Ao contrário do interpolante RBF, a aproximação AMLS é um método completamente livre de matriz e consequentemente melhora significativamente a eficiência computacional e com êxito evita dificuldades associadas a sistemas de matrizes mal-condicionadas.

3.2 Funções de base radial para o método IAMLS

Para obter a interpolação RBF via IAMLS sobre os resíduos é essencial assegurar que existam funções de base radial que, por um lado satisfaçam condições de momento contínuo e portanto possam ser usadas como funções geradoras para aproximação AMLS, e por outro lado sejam definidas positivas para que possam ser usadas como funções de base para interpolação RBF. Em geral, não é garantido que uma função de base radial que satisfaz condições de momento contínuo é estritamente positiva definida.

Descreveremos agora exemplos de duas funções de base radial estritamente definida positiva e que satisfazem as condições de momento contínuo: a Laguerre-Gaussiana Generalizada e a Multiquádrica Inversa Generalizada.

Laguerre-Gaussiana

Uma Laguerre-Gaussiana é definida como o produto da função Gaussiana padrão $(\phi(r) = e^{-\epsilon^2 r^2})$ e pela função polinomial Laguerre generalizada de grau d em \mathbb{R}^s :

$$L_d^{s/2}(\|\mathbf{x}\|) = \sum_{j=0}^d \frac{\binom{d}{j} (-1)^j \Gamma(d + \frac{s}{2} + 1) \|\mathbf{x}\|^j}{d! \Gamma(\frac{s}{2} + j + 1)},$$

onde Γ é a função Gama. Ou seja, a função de base radial Laguerre-Gaussiana generalizada é dada por:

$$\varphi(\mathbf{x}) = e^{-\epsilon^2 \|\mathbf{x}\|^2} L_d^{s/2}(\|\mathbf{x}\|), \ d = 0, 1, \dots$$

Assim, a Laguerre-Gaussiana para ϵ , d e s dados é a seguinte:

$$\varphi(\|\mathbf{x}\|) = \frac{1}{\sqrt{\pi^s}} e^{-\epsilon^2 \|\mathbf{x}\|^2} L_d^{s/2}(\|\mathbf{x}\|)$$

$$= \frac{e^{-\epsilon^2 \|\mathbf{x}\|^2}}{\sqrt{\pi^s}} \sum_{j=0}^d \frac{\binom{d}{j} (-1)^j \Gamma(d + \frac{s}{2} + 1) \|\mathbf{x}\|^j}{d! \Gamma(\frac{s}{2} + j + 1)}$$
(3-1)

Alguns exemplos função polinomial Laguerre generalizada de grau d em \mathbb{R}^s são dados na tabela (3.1).

Tabela 3.1: Exemplos de função polinomial Laguerre generalizada de grau d em \mathbb{R}^s .

s/d	0	1	2
1	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3}{2} - \left\ \mathbf{x} \right\ ^2 \right)$	$\left\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{15}{8} - \frac{5}{2} \left\ \mathbf{x} \right\ ^2 + \frac{1}{2} \left\ \mathbf{x} \right\ ^4 \right) \right\ $
2	$\frac{1}{\pi}$	$\frac{1}{\pi}\left(2-\ \mathbf{x}\ ^2\right)$	$\frac{1}{\pi} \left(3 - 3 \ \mathbf{x}\ ^2 + \frac{1}{2} \ \mathbf{x}\ ^4 \right)$
3	$\frac{1}{\pi^{3/2}}$	$\left\ rac{1}{\pi^{3/2}} \left(rac{5}{2} - \left\ \mathbf{x} ight\ ^2 ight)$	$\left\ \frac{1}{\pi^{3/2}} \left(\frac{35}{8} - \frac{7}{2} \left\ \mathbf{x} \right\ ^2 + \frac{1}{2} \left\ \mathbf{x} \right\ ^4 \right) \right\ $

Utilizando esses polinômios de Laguerre, por exemplo, pode-se construir funções de base radial Laguerre-Gaussiana generalizadas que satisfazem condições de momento contínuo e são estritamente definidas positivas.

Por exemplo, a Laguerre-Gaussiana com d=0 para todo s expressa por:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi^s}} e^{-\frac{\epsilon^2 \|\mathbf{x}\|^2}{h^2}}$$

A figura 3.1 ilustra alguns exemplos de funções Laguerre-Gaussiana.

Multiquádrica Inversa Generalizada

A família de funções Multiquádricas Inversas Generalizadas em \mathbb{R}^s é definida como um produto da multiquádrica inversa por um polinômio de Laguerre de grau d em \mathbb{R}^s .

$$\phi(\|\mathbf{x}\|) = \frac{1}{\pi^{s/2}} \frac{1}{(1+\|\mathbf{x}\|)^{2d+s}} \sum_{i=0}^{d} \frac{(-1)^{j} \Gamma(d+\frac{s}{2}+1)(d+s-1)! \|\mathbf{x}\|^{j}}{(d-j)! j! \Gamma(d+\frac{s}{2}-j) \Gamma(\frac{s}{2}+j+1)}.$$

onde Γ é a função Gama padrão.

Por exemplo, para d=0 e para qualquer s, a função de base radial multiquádrica inversa genralizada é dada por:

$$\varphi(x) = \frac{1}{\pi^{s/2}} \frac{1}{(1 + \epsilon^2 ||x||^2)^s}$$

Exemplos de funções multiquádricas inversas generalizadas de diferentes ordens de aproximação e para diferentes dimensões são descritas na tabela (3.2). Essas funções satisfazem condições de momento contínuo e são estritamente positivas definidas.

Tabela 3.2: Exemplos de funções multiquádricas inversas generalizadas.

s/d	0	1	2
1	$\frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + \ \mathbf{x}\ ^2}$	$\frac{1}{\pi} \frac{\left(3 - \ \mathbf{x}\ ^2\right)}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^3}$	$\frac{1}{\pi} \frac{\left(5 - 10\ \mathbf{x}\ ^2 + \ \mathbf{x}\ ^4\right)}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^5}$
2	$\frac{1}{\pi} \frac{1}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^2}$	$\frac{2}{\pi} \frac{\left(2 - \ \mathbf{x}\ ^2\right)}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^4}$	$\frac{3}{\pi} \frac{\left(3 - 6\ \mathbf{x}\ ^2 + \ \mathbf{x}\ ^4\right)}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^6}$
3	$\frac{4}{\pi^2} \frac{1}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^3}$	$\frac{4}{\pi^2} \frac{\left(5 - 3\ \mathbf{x}\ ^2\right)}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^5}$	$\frac{8}{\pi^2} \frac{\left(7 - 14\ \mathbf{x}\ ^2 + 3\ \mathbf{x}\ ^4\right)}{\left(1 + \ \mathbf{x}\ ^2\right)^7}$

A figura 3.2 ilustra alguns exemplos de funções multiquádricas inversas generalizadas.

3.3 O método IAMLS

O interpolante RBF P_f e a função aproximante AMLS Q_f serão identificados respectivamente, como:

$$P_f(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^{N} \mathbf{c_j} \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|), \qquad (3-2)$$

$$Q_f(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{x}_j) \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|), \qquad (3-3)$$

$$Q_f(\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{x}_j) \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|), \tag{3-3}$$

Nota-se que ambas P_f e Q_f são expansões lineares sobre uma mesma função de base radial φ definida positiva que satisfaz as condições de momento contínuo até um certo grau d.

Por exemplo, pode-se usar uma Laguerre-Gaussiana s-dimensional sobre $[0,1]^s$,

 $\varphi(r) = \frac{\epsilon^s}{\sqrt{\pi^s}} e^{-\epsilon^2 r^2/h^2},$ (3-4)

com parâmetro de forma ϵ e fator de escala $h = \sup_{\mathbf{x} \in \Omega} \min\{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|_2 : j = 1\}$ $1, \ldots, N$.

A seguir será introduzido o método IAMLS proposto por Fasshauer e Zrang(?).

Ele constrói uma seuqência de funções sobre os resíduos, cujo primeiro termo é o quase-interpolante AMLS

$$Q_f^{(0)}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{x}_j) \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|). \tag{3-5}$$

E os demais termos são definidos pela seguinte sequência de funções:

$$Q_f^{(n)}(\mathbf{x}) = Q_f^{(n-1)}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{N} \left[f(\mathbf{x}_j) - Q_f^{(n-1)}(\mathbf{x}) \right] \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|).$$
 (3-6)

O aproximante IAMLS é sucessivamente atualizado por uma função residual, que também é construída por aproximação AMLS com o mesmo conjunto de pontos de dados. Certamente, até agora não é possível ter nenhuma evidência de que a sequência de aproximação destas funções $\{Q_f^{(n)}\}$ converge quando $n \to \infty$, e ainda mais qual será o seu limite, se for convergente. Os teoremas a seguir, mostram que, sob certos pressupostos apropriados, $\{Q_f^{(n)}\}$ convergirá para o interpolante P_f quando $n \to \infty$.

Uma condição necessária e suficiente para que a aproximação iterada AMLS converge está apresentado no teorema abaixo.

Teorema 2. A sequência de funções $\{Q_f^{(n)}\}$ converge para o interpolante RBF P_f que satisfaz as condições de interpolação (2-1) se, e somente se, a função base φ escolhida gera uma matriz interpolação \mathbf{A} que satisfaz

$$\|\mathbf{I} - \mathbf{A}\|_2 < 1. \tag{3-7}$$

para um determinado conjunto de pontos distintos dados $\{\mathbf{x}_j\} \in \mathcal{S}$. Prova: Veja Gregory E. Fasshauer e Jack G. Zhang (?).

Corolário 3. Seja,

$$\mathbf{q}^{(n)} = \left[Q_f^{(n)}(\mathbf{x}_1), Q_f^{(n)}(\mathbf{x}_2), \dots, Q_f^{(n)}(\mathbf{x}_N) \right]^T.$$

Se $\|\mathbf{I} - \mathbf{A}\|_2 < 1$, então $\|\mathbf{f} - \mathbf{q^{(n)}}\|_2 \to 0$ para $n \to \infty$.

Prova: Veja Gregory E. Fasshauer e Jack G. Zhang (?).

Se a hipótese do Teorema 2 é válida, então pode-se calcular a norma das funções residuais.

Corolário 4. $Se \|\mathbf{I} - \mathbf{A}\|_2 < 1 \ ent \tilde{a}o$

$$\left\| \sum_{j=1}^{N} \left[f(\mathbf{x}_j) - Q_f^{(n-1)}(\mathbf{x}_j) \right] \varphi(\|\cdot - \mathbf{x}_j\|) \right\|_2 \to 0$$

 $para n \to \infty$. Prova: Veja Gregory E. Fasshauer e Jack G. Zhang (?).

Claramente, a velocidade de convergência é regida pelas entradas na matriz interpolação $\bf A$ e, portanto, pela escolha de φ . A função base que é estritamente positiva definida e satisfaz as condições de momento contínuo não garante automaticamente a matriz $\bf A$. Isso pode ser facilmente demonstrado por contra-exemplos.

A fim de tornar este método IAMLS mais útil, apresenta-se uma condição suficiente.

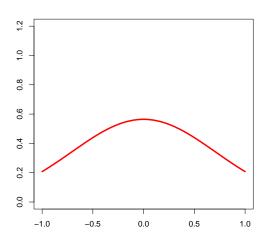
Teorema 5. Usando a mesma notação como no Teorema 2, se uma função base φ é estritamente positiva definida e gera uma matriz interpolação $\mathbf A$ tal que

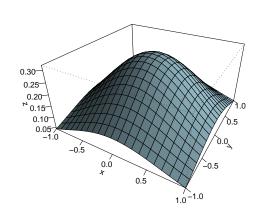
 $\max_{i=1,\dots,N} \left\{ \sum_{j=1}^{N} |\mathbf{A}_{i,j}| \right\} < 2, \tag{3-8}$

então $Q_f^{(n)}$ converge para P_f quando $n \to \infty$.

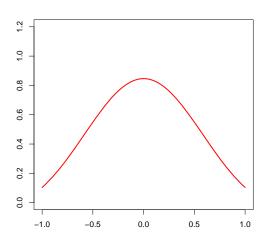
Prova: Veja Gregory E. Fasshauer e Jack G. Zhang (?).

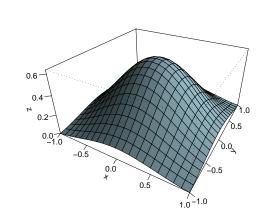
Por fim, pode-se dizer que o método IAMLS une vantagens das abordagens AMLS e RBF: pelo lado do AMLS, a natureza de ser livre de sistemas lineares; pelo lado de RBF, a capacidade das funções de bases radiais aproximarem funções de pontos irregularmente espaçados



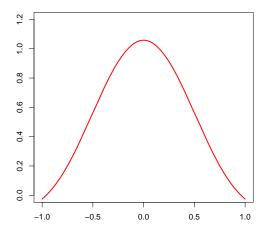


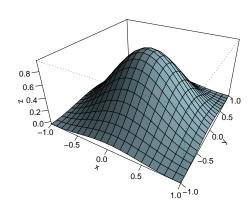
- (a) Laguerre-Gaussiana s=1 e d=0
- (b) Laguerre-Gaussiana s=2 e d=0





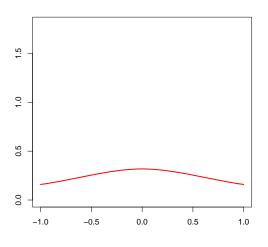
- (c) Laguerre-Gaussiana s = 1 e d = 1
- (d) Laguerre-Gaussiana s=2e d=1

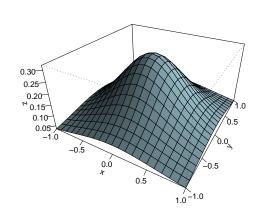




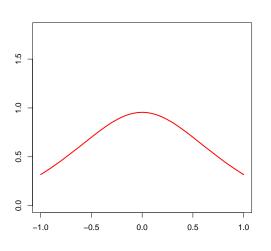
- (e) Laguerre-Gaussiana s = 1 e d = 2
- (f) Laguerre-Gaussiana s = 2 e d = 2

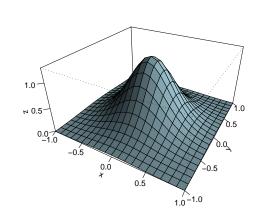
Figura 3.1: Exemplos de funções Laguerre-Gaussianas.



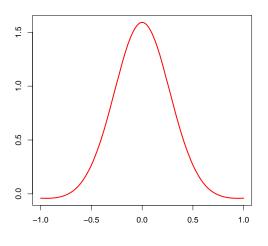


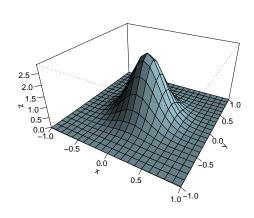
(a) Multiquádrica Inversa com s=1 e d=0. (b) Multiquádrica Inversa com s=2 e d=0.





(c) Multiquádrica Inversa com s=1 e d=1. (d) Multiquádrica Inversa com s=2 e d=1.





(e) Multiquádrica Inversa com s=1 e d=2. (f) Multiquádrica Inversa com s=2 e d=2. Figura 3.2: Exemplos de funções Multiquádrica Inversas Generalizadas.