径向基函数核方法

孙正杰 南京理工大学

国家天元数学中部中心高性能计算短期课程

7 月 25 日-7 月 29 日

1. 径向基函数插值理论
2. 径向基函数无网格方法

1 径向基函数插值理论

径向基函数插值

插值的存在性

插值的收敛性

2 径向基函数无网格方法

1. 径向基函数插值理论
   - 径向基函数插值
   - 插值的存在性
   - 插值的收敛性

2. 径向基函数无网格方法

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

  其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.
- 常见的径向基函数种类:

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

  其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.
- 常见的径向基函数种类:
  - 高斯函数 (Gaussian), $\phi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

  其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.
- 常见的径向基函数种类:
  - 高斯函数 (Gaussian), $\phi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$
  - Multiquadric (MQ), $\phi(r) = \sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

  其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.
- 常见的径向基函数种类:
  - 高斯函数 (Gaussian), $\phi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$
  - Multiquadric (MQ), $\phi(r) = \sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
  - Inverse multiquadric (IMQ), $\phi(r) = 1/\sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.

- 常见的径向基函数种类:
  - 高斯函数 (Gaussian), $\phi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$
  - Multiquadric (MQ), $\phi(r) = \sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
  - Inverse multiquadric (IMQ), $\phi(r) = 1/\sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
  - Bessel(BE)(d=1,2,...), $\phi(r) = J_{d/2-1}(\epsilon r)/(\epsilon r)^{d/2-1}$

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.

- 常见的径向基函数种类:
  - 高斯函数 (Gaussian), $\phi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$
  - Multiquadric (MQ), $\phi(r) = \sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
  - Inverse multiquadric (IMQ), $\phi(r) = 1/\sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
  - Bessel(BE)(d=1,2,...), $\phi(r) = J_{d/2-1}(\epsilon r)/(\epsilon r)^{d/2-1}$
  - Polyharmonic spline(PHS), $\phi(r) = r^m$, $m = 1, 3, 5, \ldots;$ $\phi(r) = r^m \log(r)$, $m = 2, 4, 6, \ldots$

径向基函数 (RBF)

- 径向函数: 如果函数 $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 可以通过一个一维函数 $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ 表示,

$$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|) = \phi(r), \quad r := \|\mathbf{x}\|$$

  其中 $\|\cdot\|$ 表示欧几里得距离, 那么称 $\Phi(\mathbf{x})$ 是一个径向函数.
- 常见的径向基函数种类:
  - 高斯函数 (Gaussian), $\phi(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$
  - Multiquadric (MQ), $\phi(r) = \sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
  - Inverse multiquadric (IMQ), $\phi(r) = 1/\sqrt{1 + (\epsilon r)^2}$
  - Bessel(BE)(d=1,2,...), $\phi(r) = J_{d/2-1}(\epsilon r)/(\epsilon r)^{d/2-1}$
  - Polyharmonic spline(PHS), $\phi(r) = r^m$, $m = 1, 3, 5, \ldots$; $\phi(r) = r^m \log(r)$, $m = 2, 4, 6, \ldots$
  - Compact support ('Wu' function)

径向基函数插值

- 采样数据：d 维散乱数据 $\{\mathbf{x}_j, f(\mathbf{x}_j)\}_{j=1}^N$，$\mathbf{x}_j \in \mathbb{R}^d$.
- RBF 插值 $I_X f$ 表示如下

$$I_X f(x) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \phi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|),$$

插值系数由插值条件 $I_X f(\mathbf{x}_k) = f(\mathbf{x}_k)$ 得到.

径向基函数插值

将插值条件写成矩阵形式可以得到

$$\lambda = A^{-1}F,$$

其中插值矩阵

$$A = \begin{pmatrix} \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1\|) & \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|) & \dots & \phi(\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_N\|) \\ \phi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|) & \phi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_2\|) & \dots & \phi(\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_N\|) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_1\|) & \phi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_2\|) & \dots & \phi(\|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_N\|) \end{pmatrix}$$

径向基函数插值

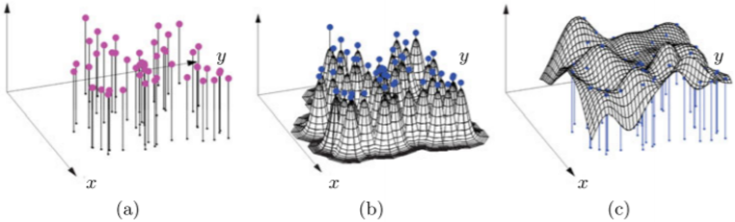


Figure 2.1. Graphical illustration of the RBF concept. (a) Example of two-dimensional scattered data. (b) Basis function set. One rotated Gaussian is located at each data point. (c) The unique linear combination of the Gaussians that agrees with all the provided data.

图 1: 径向基函数插值示意图[1]

[1] Bengt Fornberg and Natasha Flyer (2015). Solving PDEs with radial basis functions. Acta Numerica, 24, pp 215-258.

1 径向基函数插值理论
- 径向基函数插值
- 插值的存在性
- 插值的收敛性

2 径向基函数无网格方法

插值的存在性

定理

函数 $\phi:\mathbb{R}_+\to\mathbb{R}$ 是连续的, $\lim_{r\to\infty}\phi(r)=0$. 那么 d 维径向基函数插值总是存在唯一解的条件是: 矩阵 $(\phi(\|\mathbf{x}_k-\mathbf{x}_j\|))$ 都是正定矩阵.

插值的存在性

定理

函数 $\phi:\mathbb{R}_+\to\mathbb{R}$ 是连续的, $\lim_{r\to\infty}\phi(r)=0$. 那么 d 维径向基函数插值总是存在唯一解的条件是: 矩阵 $(\phi(\|\mathbf{x}_k-\mathbf{x}_j\|))$ 都是正定矩阵.

定义 $\Phi(\mathbf{x})=\phi(\|\mathbf{x}\|)$. 假设 $\Phi(\mathbf{x})=\int_{\mathbb{R}^d}e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{t}}\hat{\Phi}(\mathbf{t})\,d\mathbf{t}$, 于是

$$\sum_{j,k}\lambda_j\lambda_k\phi(\|\mathbf{x}_k-\mathbf{x}_j\|)=\int\Big|\sum_j\lambda_je^{i\mathbf{x}_j\cdot\mathbf{t}}\Big|^2\hat{\Phi}(\mathbf{t})\,d\mathbf{t}$$

插值的存在性

定理

函数 $\phi:\mathbb{R}_+\to\mathbb{R}$ 是连续的, $\lim_{r\to\infty}\phi(r)=0$. 那么 d 维径向基函数插值总是存在唯一解的条件是: 矩阵 $(\phi(\|\mathbf{x}_k-\mathbf{x}_j\|))$ 都是正定矩阵.

定义 $\Phi(\mathbf{x})=\phi(\|\mathbf{x}\|)$. 假设 $\Phi(\mathbf{x})=\int_{\mathbb{R}^d}e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{t}}\hat{\Phi}(\mathbf{t})\,d\mathbf{t}$, 于是

$$\sum_{j,k}\lambda_j\lambda_k\phi(\|\mathbf{x}_k-\mathbf{x}_j\|)=\int\Big|\sum_j\lambda_je^{i\mathbf{x}_j\cdot\mathbf{t}}\Big|^2\hat{\Phi}(\mathbf{t})\,d\mathbf{t}$$

定理 (Bochner)

函数 $\Phi(\mathrm{x})$ 是正定函数的充分必要条件是其 *Fourier* 变换 $\hat{\Phi}(\mathrm{t})$ 几乎处处非负, 且至少在一个正测度上大于零.

全单调函数

假设 $\phi(r)=\int_0^\infty e^{-r^2 t}d\nu(t)$, ν 是非负有限 Borel 测度. 于是

$$\sum_{j,k}\lambda_j\lambda_k\phi(\|\mathbf{x}_k-\mathbf{x}_j\|)=\int_0^\infty\sum_{j,k}\lambda_j\lambda_k e^{-t\|x_j-x_k\|^2}d\nu(t)>0.$$

更进一步, $\psi(r):=\phi(\sqrt{r})$ 满足

$$(-1)^n\frac{d^n}{dr^n}\psi(r)=(-1)^n\frac{d^n}{dr^n}\int_0^\infty e^{-rt}d\nu(t)=\int_0^\infty t^n e^{-rt}d\nu(t)>0.$$

全单调函数

假设 $\phi(r) = \int_0^\infty e^{-r^2 t} d\nu(t)$, ν 是非负有限 Borel 测度. 于是

$$\sum_{j,k} \lambda_j \lambda_k \phi(\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j\|) = \int_0^\infty \sum_{j,k} \lambda_j \lambda_k e^{-t\|x_j - x_k\|^2} d\nu(t) > 0.$$

更进一步, $\psi(r) := \phi(\sqrt{r})$ 满足

$$(-1)^n \frac{d^n}{dr^n}\psi(r) = (-1)^n \frac{d^n}{dr^n} \int_0^\infty e^{-rt} d\nu(t) = \int_0^\infty t^n e^{-rt} d\nu(t) > 0.$$

定理 (Micchelli)

如果定义 $\psi(r^2) = \phi(r)$, 那么 $\phi(\|x\|)$ 对任何维空间的 x 都是正定函数的充分必要条件是 $\psi(r)$ 是全单调函数, 即 $\psi \in \mathbb{C}^\infty$ 且

$$(-1)^n \psi^{(n)}(r) > 0, \quad n = 0, 1, \ldots.$$

条件正定函数

- Gauss 函数，逆 MQ 函数在任意维空间都是正定函数.

条件正定函数

- Gauss 函数, 逆 MQ 函数在任意维空间都是正定函数.
- MQ 函数, 薄板样条不是正定函数. (Fourier 变换在零点是极点)

条件正定函数

- Gauss 函数，逆 MQ 函数在任意维空间都是正定函数.
- MQ 函数，薄板样条不是正定函数. (Fourier 变换在零点是极点)

条件正定函数

- Gauss 函数, 逆 MQ 函数在任意维空间都是正定函数.
- MQ 函数, 薄板样条不是正定函数. (Fourier 变换在零点是极点)

定义

如果对任意的 N, 两两不同的节点 $x_1, x_2, \ldots, x_N$ 以及非零系数 λ 满足

$$\sum_{j=1}^{N} \lambda_j p(\mathbf{x}_j) = 0, \quad \forall p \in P_m,$$

二次型

$$\sum_{j,k=1}^{N} \lambda_j \lambda_k \Phi(x_j - x_k) > 0,$$

称 Φ 是 m 阶条件正定函数.

条件正定函数

- Gauss 函数，逆 MQ 函数在任意维空间都是正定函数.
- MQ 函数，薄板样条不是正定函数. (Fourier 变换在零点是极点)

定义

如果对任意的 N, **两两不同的节点** $x_1, x_2, \ldots, x_N$ **以及非零系数** λ **满足**

$$\sum_{j=1}^{N} \lambda_j p(\mathbf{x}_j) = 0, \quad \forall p \in P_m,$$

二次型

$$\sum_{j,k=1}^{N} \lambda_j \lambda_k \Phi(x_j - x_k) > 0,$$

称 Φ **是** m **阶条件正定函数**.

条件正定函数插值

对于条件正定函数，我们可以构造下面的插值函数

$$I_X f = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \phi(\|x - x_j\|) + \sum_{k=1}^{Q} \beta_k p_k(x),$$

满足插值条件

$$I_X f(x_k) = f_k, \quad k = 1, \ldots, N,$$

以及附加条件

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_j p_k(x_j) = 0, \quad 1 \le k \le Q.$$

可以写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} A_{\phi,X} & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

条件正定函数插值

定理

插值问题(1)唯一可解的条件是 Φ 为条件正定函数，且 X 是 P_m 空间的唯一可解集 *(unisolvent set)*.

定理

如果定义 $\psi(r^2)=\phi(r)$，那么 $\phi(\|x\|)$ 对任何维空间的 x 都是 m 阶条件正定函数的充分必要条件是 $\psi(r)$ 是 m 阶的全单调函数，即 $\psi\in\mathbb{C}^\infty$ 且

$$(-1)^l\psi^{(l)}(r)>0,\ \forall l>m.$$

紧支柱正定径向函数

- Gauss 函数, MQ 函数得到的插值问题的系数矩阵是满矩阵

紧支柱正定径向函数

- Gauss 函数, MQ 函数得到的插值问题的系数矩阵是满矩阵
- 如何得到稀疏矩阵 $\Rightarrow$ 紧支柱径向函数

紧支柱正定径向函数

- Gauss 函数, MQ 函数得到的插值问题的系数矩阵是满矩阵
- 如何得到稀疏矩阵 $\Rightarrow$ 紧支柱径向函数
- 紧支柱条件正定径向函数不存在

紧支柱正定径向函数

- Gauss 函数, MQ 函数得到的插值问题的系数矩阵是满矩阵
- 如何得到稀疏矩阵 $\Rightarrow$ 紧支柱径向函数
- 紧支柱条件正定径向函数不存在
- 紧支柱正定径向函数只对特定维数空间存在

紧支柱正定径向函数

- Gauss 函数, MQ 函数得到的插值问题的系数矩阵是满矩阵
- 如何得到稀疏矩阵 $\Rightarrow$ 紧支柱径向函数
- 紧支柱条件正定径向函数不存在
- 紧支柱正定径向函数只对特定维数空间存在

紧支柱正定径向函数

- Gauss 函数, MQ 函数得到的插值问题的系数矩阵是满矩阵
- 如何得到稀疏矩阵 $\Rightarrow$ 紧支柱径向函数
- 紧支柱条件正定径向函数不存在
- 紧支柱正定径向函数只对特定维数空间存在

定理

全单调函数或往后全单调函数都不是紧支柱的, 从而 $\phi(\|\mathbf{x}\|)$ 对任何 $d, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 都是正定或者条件正定的函数不可能是紧支柱的.

证明.

利用 Laplace 变换 $F(r) = \int_0^\infty \hat{F}(t) e^{-rt} dt$. 如果在某点 r_0 有 $F(r_0) = 0$, 那么 $\hat{F} = 0$ 几乎处处成立, 这样有 $F(r) \equiv 0$. $\square$

紧支柱正定径向函数

定理

假设 $\Phi \in L_1(\mathbb{R}^d) \cap C(\mathbb{R}^d)$ 是径向函数，$\Phi(\mathbf{x}) = \phi(\|\mathbf{x}\|_2)$，$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$，那么 Φ 的 *Fourier* 变换也是径向的，即 $\hat{\Phi}(\omega) = \mathcal{F}_d\phi(\|\omega\|_2)$，其中

$$\mathcal{F}_d\phi(r) = r^{-(d-2)/2} \int_0^\infty \phi(t)\, t^{d/2} J_{(d-2)/2}(rt)\, dt$$

紧支柱正定径向函数

证明.

$d=1$ 由 $J_{-1/2}(t)=\left(\frac{2}{\pi t}\right)^{1/2}\cos t$ 容易验证. 下面看 $d\geq 2$. 我们令 $r=\|\mathbf{x}\|_2$, 利用 Fourier 变换的定义可知

$$
\begin{aligned}
\hat{\Psi}(\mathbf{x}) &= (2\pi)^{-d/2}\int_{\mathbb{R}^d}\Phi(\omega)e^{-i\mathbf{x}\cdot\omega}\,d\omega \\
&= (2\pi)^{-d/2}\int_0^\infty t^{d-1}\int_{S^{d-1}}\Phi(t\|\omega\|_2)e^{-it\mathbf{x}\cdot\omega}\,dS(\omega)\,dt \\
&= (2\pi)^{-d/2}\int_0^\infty \phi(t)t^{d-1}\int_{S^{d-1}}e^{-it\mathbf{x}\cdot\omega}\,dS(\omega)\,dt \\
&= r^{-(d-2)/2}\int_0^\infty \phi(t)t^{d/2}J_{(d-2)/2}(rt)\,dt,
\end{aligned}
$$

$\int_{S^{d-1}}e^{-ix\cdot\omega}\,dS(\omega)=(2\pi)^{d/2}\|x\|_2^{-(d-2)/2}J_{(d-2)/2}(\|x\|_2)$. □

紧支柱正定径向函数

利用 $\frac{d}{dz}(z^\mu J_\mu(z)) = z^\mu J_{\mu-1}(z)$ 分布积分得到

紧支柱正定径向函数

利用 $\frac{d}{dz}(z^\mu J_\mu(z)) = z^\mu J_{\mu-1}(z)$ 分布积分得到

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}_d\phi(r) =& r^{-(d-2)/2}\int_0^\infty \phi(t)t^{d/2}J_{(d-2)/2}(rt)\,dt \\
=& r^{-(d-2)/2}r^{-d/2}\int_0^\infty \phi(t)(rt)^{d/2}J_{d/2-1}(rt)\,dt \\
=& r^{-d}\phi(t)(rt)^{d/2}J_{d/2}(rt)|_0^\infty - r^{-d}\int_0^\infty \phi'(t)(rt)^{d/2}J_{d/2}(rt)\,dt \\
=& -r^{-d/2}\int_0^\infty \frac{1}{t}\phi'(t)t^{d/2+1}J_{d/2}(rt)\,dt \\
=& \mathcal{F}_{d+2}(D\phi)(r), \quad D\phi(t) = -\frac{1}{t}\phi'(t).
\end{aligned}
$$

紧支柱正定径向函数

定义

对于 $\phi \in C^2(\mathbb{R})$, 定义算子

$$(D\phi)(r) = -\frac{1}{r}\phi'(r), \quad r \geq 0.$$

当 $t \mapsto \phi(t)t \in L_1[0,\infty)$ 存在时, 定义其对偶算子

$$(I\phi)(r) = \int_r^{\infty} t\phi(t)\,dt.$$

推论: 当 ϕ 连续且满足 $t \mapsto \phi(t)t \in L_1[0,\infty)$ 时, $DI\phi = \phi$. 反之, 当 $\phi \in C^2(\mathbb{R})$ 且 ϕ 是偶函数有 $\phi' \in L_1$ 时, $ID\phi = \phi$.

紧支柱正定径向函数

定理

函数 $\phi(r)=F(r^2)(n\geq 3)$ 是 n 维紧支柱正定径向函数的充分必要条件是存在 $G\in C^1[0,\infty)$ 满足 $-G'=F$, 而 $\psi(r)=G(r^2)$, 或者说 $\phi=-\frac{\psi'}{r}$ 是 $n-2$ 维紧支柱正定径向函数.

- 对单变量的紧支柱对称正定函数施加算子 D, 可以获得多变量的紧支柱正定径向函数.

紧支柱正定径向函数

定理

函数 $\phi(r)=F(r^2)(n\geq 3)$ 是 n 维紧支柱正定径向函数的充分必要条件是存在 $G\in C^1[0,\infty)$ 满足 $-G'=F$, 而 $\psi(r)=G(r^2)$, 或者说 $\phi=-\frac{\psi'}{r}$ 是 $n-2$ 维紧支柱正定径向函数.

- 对单变量的紧支柱对称正定函数施加算子 D, 可以获得多变量的紧支柱正定径向函数.
- 如果 $\phi(r)=F(r^2)\in C^{2\ell}$, 构造
  $\psi_k(r)=G(r^2)=(-1)^kF^{(k)}(r^2)=D^k\phi(r)$, 有 $\psi_k\in C^{2\ell-2k}$.

紧支柱正定径向函数

定理

函数 $\phi(r)=F(r^2)(n\geq 3)$ 是 n 维紧支柱正定径向函数的充分必要条件是存在 $G\in C^1[0,\infty)$ 满足 $-G'=F$, 而 $\psi(r)=G(r^2)$, 或者说 $\phi=-\frac{\psi'}{r}$ 是 $n-2$ 维紧支柱正定径向函数.

- 对单变量的紧支柱对称正定函数施加算子 D, 可以获得多变量的紧支柱正定径向函数.
- 如果 $\phi(r)=F(r^2)\in C^{2\ell}$, 构造 $\psi_k(r)=G(r^2)=(-1)^kF^{(k)}(r^2)=D^k\phi(r)$, 有 $\psi_k\in C^{2\ell-2k}$.
- 构造正定函数的最简单的办法是作卷积. $\forall f\in C^\ell$, 那么卷积 $f*f\in C^{2\ell}$ 并且是一元正定函数. 如果对它作用 k 次 D 算子的话, 可以得到一个 $C^{2\ell-2k}$ 的 $2k+1$ 维的正定径向函数.

紧支柱正定径向函数

例　令 $f_l(x)=(1-x^2)_+^\ell \in C^{\ell-1}$ 是一个 2ℓ 次截断多项式，那么卷积 $\phi_\ell=f_\ell * f_\ell$ 是一个分段的 $4\ell+1$ 次多项式. $\phi_{\ell,k}:=D^k\phi_\ell(2r)$ 是一个 $4\ell-2k+1$ 次的截断多项式 (在 $[0,1]$). 并且它还是一个 C^{2l-2k} 的 $2k+1$ 维的紧支柱正定函数.

紧支柱正定径向函数

例　令 $f_l(x) = (1-x^2)_+^{\ell} \in C^{\ell-1}$ 是一个 2ℓ 次截断多项式，那么卷积 $\phi_\ell = f_\ell * f_\ell$ 是一个分段的 $4\ell+1$ 次多项式. $\phi_{\ell,k} := D^k\phi_\ell(2r)$ 是一个 $4\ell-2k+1$ 次的截断多项式 (在 $[0,1]$). 并且它还是一个 C^{2l-2k} 的 $2k+1$ 维的紧支柱正定函数.

例　$\phi_{3,k} = D^k\psi_3(r) = D^k((1-\cdot^2)_+^3 * (1-\cdot^2)_+^3)(2r), \quad k=0,1,2,3$

$$
\begin{aligned}
\phi_{3,0} &\doteq (1-r)_+^7(5+35r+101r^2+147r^3+101r^4+35r^5+5r^6) \\
&\in C^6 \cap PD_1 \\
\phi_{3,1} &\doteq (1-r)_+^6(6+36r+82r^2+72r^3+30r^4+5r^5) \quad \in C^4 \cap PD_3 \\
\phi_{3,2} &\doteq (1-r)_+^5(8+40r+48r^2+25r^3+5r^4) \quad \in C^2 \cap PD_5 \\
\phi_{3,3} &\doteq (1-r)_+^4(16+29r+20r^2+5r^3) \quad \in C^0 \cap PD_7.
\end{aligned} \tag{2}
$$

紧支柱正定径向函数

例 $\phi_{s,k} = I^k \phi_{\lfloor s/2 \rfloor + k + 1}$，$\varphi_{s,k}$ 是 $\lfloor s/2 \rfloor + 3k + 1$ 次截断多项式.

$$
\begin{aligned}
\phi_{3,0} &= (1-r)_+^2 \in C^0 \cap PD_3 \\
\phi_{3,1} &\doteq (1-r)_+^4 (4r+1) \in C^2 \cap PD_3 \\
\phi_{3,2} &\doteq (1-r)_+^6 (35r^2 + 18r + 3) \quad \in C^4 \cap PD_3 \\
\phi_{3,3} &\doteq (1-r)_+^8 (32r^3 + 25r^2 + 8r + 1) \quad \in C^6 \cap PD_3.
\end{aligned}
\tag{3}
$$

$$
\phi_{3,1} = I\phi_3(r) = \int_r^1 t(1-t)^3 \, dt = \frac{(1-r)^4}{12}(4r+1).
$$

1 径向基函数插值理论

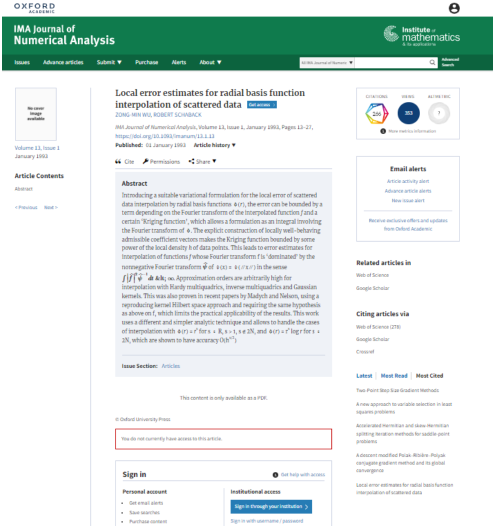
径向基函数插值

插值的存在性

插值的收敛性

2 径向基函数无网格方法

插值的收敛性



OXFORD ACADEMIC

IMA Journal of Numerical Analysis

Institute of mathematics & its applications

Issues | Advance articles | Submit | Purchase | Alerts | About | Advanced Search

Volume 13, Issue 1
January 1993

Article Contents

Abstract

< Previous Next >

Local error estimates for radial basis function interpolation of scattered data

Get access

ZONG-MIN WU, ROBERT SCHABACK

IMA Journal of Numerical Analysis, Volume 13, Issue 1, January 1993, Pages 13–27,
https://doi.org/10.1093/imanum/13.1.13
Published: 01 January 1993 Article history

Cite Permissions Share

Abstract

Introducing a suitable variational formulation for the local error of scattered data interpolation by radial basis functions $\phi(r)$, the error can be bounded by a term depending on the Fourier transform of the interpolated function f and a certain 'Kriging function', which allows a formulation as an integral involving the Fourier transform of ϕ. The explicit construction of locally well-behaving admissible coefficient vectors makes the Kriging function bounded by some power of the local density h of data points. This leads to error estimates for interpolation of functions f whose Fourier transform f is 'dominated' by the nonnegative Fourier transform $\hat{\psi}$ of $\psi(x) = \phi(//x//)$ in the sense $\int |\hat{f}|^2 \hat{\psi}^{-1} dt$ < ∞. Approximation orders are arbitrarily high for interpolation with Hardy multiquadrics, inverse multiquadrics and Gaussian kernels. This was also proven in recent papers by Madych and Nelson, using a reproducing kernel Hilbert space approach and requiring the same hypothesis as above on f, which limits the practical applicability of the results. This work uses a different and simpler analytic technique and allows to handle the cases of interpolation with $\phi(r) = r^s$ for s ∊ R, s > 1, s ∉ 2N, and $\phi(r) = r^s \log r$ for s ∊ 2N, which are shown to have accuracy $O(h^{s/2})$

Issue Section: Articles

This content is only available as a PDF.

You do not currently have access to this article.

Sign in Get help with access

Personal account
- Get email alerts
- Save searches
- Purchase content

Institutional access
Sign in through your institution
Sign in with username / password

Email alerts
Article activity alert
Advance article alerts
New issue alert

Receive exclusive offers and updates from Oxford Academic

Related articles in
Web of Science
Google Scholar

Citing articles via
Web of Science (278)
Google Scholar
Crossref

Latest | Most Read | Most Cited

Two-Point Step Size Gradient Methods
A new approach to variable selection in least squares problems
Accelerated Hermitian and skew-Hermitian splitting iteration methods for saddle-point problems
A descent modified Polak–Ribière–Polyak conjugate gradient method and its global convergence
Local error estimates for radial basis function interpolation of scattered data

插值的收敛性

对于条件正定函数，我们可以构造下面的插值函数

$$I_X f = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \phi(\|x - x_j\|) + \sum_{k=1}^{Q} \beta_k p_k(x),$$

满足插值条件

$$I_X f(x_k) = f_k, \quad k = 1, \ldots, N,$$

以及附加条件

$$\sum_{j=1}^{N} \alpha_j p_k(x_j) = 0, \quad 1 \le k \le Q.$$

这个函数同时还有一个 Lagrange 表示

$$f^*(x) = \sum_{j=1}^{N} f(x_j) u_j(x)$$

插值的收敛性

如果定义

$$
\begin{aligned}
R(x) &= (\phi(\|x - x_1\|), \ldots, \phi(\|x - x_N\|))^T, \\
U(x) &= (u_1(x), \ldots, u_N(x))^T, \quad V(x) = (v_1(x), \ldots, v_Q(x))^T, \\
S(x) &= (p_1(x), \ldots, p_Q(x))^T, \\
A &= (\phi(\|x_j - x_k\|)), \quad P = (p_k(x_j))
\end{aligned}
$$

那么径向基插值的 Lagrange 基满足

$$
\begin{pmatrix} A & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(x) \\ V(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R(x) \\ S(x) \end{pmatrix}
$$

插值的收敛性

把 $V(x)$ 看成是 Lagrange 乘子, 那么径向基函数插值的 Lagrange 表示 $U(x)$ 同时是在给定 x 时如下两次条件最优问题的解,

$$\min\{U^TAU - 2U^TR(x) + \phi(0) | U \in \mathbb{R}^N, \ P^TU = S(x)\}$$

上述两次最优问题是唯一可解的, 并且它的解就是径向基函数插值的解. 这是径向基函数插值的另一个物理意义 (Kriging 意义).

插值的收敛性

如果函数 ϕ 是 $2m$ 次可微的，定义 $\Phi(x)=\phi(\|x\|)$，那么 $U(x)$ 的导数 $U^{(\mu)}$ 满足下列线性方程组

$$\begin{pmatrix} A & P \\ P^T & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U^{(\mu)}(x) \\ V^{(\mu)}(x) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} R^{(\mu)}(x) \\ S^{(\mu)}(x) \end{pmatrix}$$

从而它是在给定 x 时两次最优问题

$$\min\{{U^{(\mu)}}^T A\, U^{(\mu)}-2\,{U^{(\mu)}}^T R^{(\mu)}(x)+\Phi^{(2\mu)}(0)\}$$

在限制条件

$$U^{(\mu)}\in\mathbb{R}^N,\quad P^T U^{(\mu)}=S^{(\mu)}(x)$$

下的解.

插值的收敛性

定义

$\phi(r)$ 是 q 阶条件正定函数，并假设 $\phi \in C^{2m}[0,\infty)$，那么对于 $0 \le \mu \le m$ 及数据点 $x_1,\dots,x_N$，函数

$$\kappa_q^{\mu}(x) := \min\{ {U^{(\mu)}}^T A\, U^{(\mu)} - 2\, {U^{(\mu)}}^T R^{(\mu)}(x) + \Phi^{(2\mu)}(0)\},$$

其中 U 满足条件限制，$U^{\mu} \in K_{\mu,q}(x)$，

$$K_{\mu,q}(x) := \{u \in \mathbb{R}^N | \sum_{j=1}^{N} u_j p(x_j) = p^{(\mu)}(x),\ \forall p \in P_q\}.$$

称 $\kappa_q^{\mu}(x)$ 为在点 x 的 μ 阶的 Kriging 函数. $K_{\mu,q}(x)$ 称为允许向量集合.

插值的收敛性

如果 $\phi(\|\cdot\|)$ 是一个绝对可积的函数，并且有非负的 Fourier 变换 $\hat{\Phi}$，满足

$$\phi(\|x\|) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix\cdot t}\hat{\Phi}(t)\,dt,$$

可以得到恒等式

$$U^T A U - 2U^T R(x) + \phi(0) = \int_{\mathbb{R}^n} \left| \sum_{j=1}^{N} u_j e^{ix_j\cdot t} - e^{ix\cdot t} \right|^2 \hat{\Phi}(t)\,dt$$

这是两次最优问题或者 Kriging 范数的 Fourier 表示.

插值的收敛性

进一步有

$$
\begin{aligned}
&{U^{(\mu)}}^T A\, U^{(\mu)} - 2\, {U^{(\mu)}}^T R^{(\mu)}(x) + \Phi^{(2\mu)}(0) \\
&= \int_{\mathbb{R}^n} \left| \sum_{j=1}^{N} u_j^{(\mu)}\, e^{ix_j\cdot t} - (it)^{\mu}\, e^{ix\cdot t} \right|^2 \hat{\Phi}(t)\, dt
\end{aligned}
$$

如果未知函数 f 可以由 Fourier 积分表示，即 $f(x) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix\cdot t}\hat{f}(t)\, dt$，那么

$$
|f^{*(\mu)}(x) - f^{(\mu)}(x)|^2 = \left| \int_{\mathbb{R}^n} \left(\sum_{j=1}^{N} u_j^{(\mu)}\, e^{ix_j\cdot t} - (it)^{\mu}\, e^{ix\cdot t} \right) \hat{f}(t)\, dt \right|^2
$$

插值的收敛性

利用 Cauchy-Schwarz 不等式得到

$$
\begin{aligned}
&|f^{*(\mu)}(x) - f^{(\mu)}(x)|^2 \\
&\leq \left(\int_{\mathbb{R}^n} \left| \sum_{j=1}^{N} u_j^{(\mu)} e^{ix_j\cdot t} - (it)^\mu e^{ix\cdot t} \right| |\hat{f}(t)|\, dt \right)^2 \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^n} \left| \sum_{j=1}^{N} u_j^{(\mu)} e^{ix_j\cdot t} - (it)^\mu e^{ix\cdot t} \right|^2 \hat{\phi}(t)\, dt \cdot \int_{\mathbb{R}^n} |\hat{f}(t)|^2 (\hat{\phi}(t))^{-1}\, dt \\
&:= \kappa_q^\mu(x) \cdot c_f^2,
\end{aligned}
$$

$$
c_f^2 := \int_{\mathbb{R}^n} |\hat{f}(t)|^2 (\hat{\phi}(t))^{-1}\, dt
$$

插值的收敛性

$$0 < \hat{\psi}(t) \leqslant c \begin{cases} \|t\|^{-n-s_0} & \text{for} \quad \|t\| \to 0 \\ \|t\|^{-n-s_\infty} & \text{for} \quad \|t\| \to \infty \end{cases}$$

当 $2|\mu| < s_\infty$, $s_0 < 2q$ 时, Kriging 函数可以用积分表示.

$$\kappa_q^{(\mu)}(x) \leqslant C h_\rho^{s_\infty/2-|\mu|}(x), \quad 0 \leq |\mu| < s_\infty/2$$

再生核 Hilbert 空间

定义

假设 $\mathcal{H}$ 是一个实的 Hilbert 空间, $f:\Omega\to\mathbb{R}$ 是其中的元素. 一个函数 $K:\Omega\times\Omega\to\mathbb{R}$ 称为 $\mathcal{H}$ 的再生核如果满足下面两个条件

1. $K(\mathbf{x},\cdot)\in\mathcal{H}$, for all $\mathbf{x}\in\Omega$,
2. $f(\mathbf{x})=\langle f,K(\cdot,\mathbf{x})\rangle_{\mathcal{H}}$

- 一个 Hilbert 空间的再生核是惟一的.
- 再生核的存在性等价于点估计泛函 δ_x 是有界线性泛函, 即 $|\delta_x f|=|f(x)|\le M\|f\|_{\mathcal{H}}$, for all $f\in\mathcal{H}$

再生核 Hilbert 空间

定理

假设 $\mathcal{H}$ 是 *Hilbert* 空间，K 是再生核，$\mathcal{H}^*$ 是其对偶空间，即 $\mathcal{H}$ 上的线性泛函空间．那么有

1. $K(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \langle K(\cdot,\mathbf{x}), K(\cdot,\mathbf{y})\rangle_{\mathcal{H}}$
2. $K(\mathbf{x},\mathbf{y}) = K(\mathbf{y},\mathbf{x})$
3. *Hilbert* 空间范数收敛性蕴含点点收敛

再生核 Hilbert 空间

定理

假设 $\mathcal{H}$ 是 *Hilbert* 空间, K 是再生核, $\mathcal{H}^*$ 是其对偶空间, 即 $\mathcal{H}$ 上的线性泛函空间. 那么有

1. $K(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \langle K(\cdot,\mathbf{x}), K(\cdot,\mathbf{y})\rangle_{\mathcal{H}}$
2. $K(\mathbf{x},\mathbf{y}) = K(\mathbf{y},\mathbf{x})$
3. *Hilbert* 空间范数收敛性蕴含点点收敛

$$|f(x) - f_n(x)| = |\langle f - f_n, K(\cdot,\mathbf{x})\rangle_{\mathcal{H}}| \le \|f - f_n\|_{\mathcal{H}} \|K(\cdot,\mathbf{x})\|_{\mathcal{H}}$$

再生核 Hilbert 空间

定理

假设 $\mathcal{H}$ 是 *Hilbert* 空间，K 是再生核，那么 K 是正定的．更进一步，K 是严格正定的当且仅当 $\mathcal{H}^*$ 中的点估计泛函是线性独立的．

证明.

$$
\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} c_j c_k K(\mathbf{x}_j,\mathbf{x}_k) &= \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} c_j c_k \langle K(\mathbf{x}_j,\cdot), K(\mathbf{x}_k,\cdot)\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \langle \sum_{j=1}^{N} c_j K(\mathbf{x}_j,\cdot), \sum_{k=1}^{N} c_k K(\mathbf{x}_k,\cdot)\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \| \sum_{j=1}^{N} c_j K(\mathbf{x}_j,\cdot)\|_{\mathcal{H}}^2 \geq 0.
\end{aligned}
$$

本性空间 (Native space)

由再生核定义可知 $\mathcal{H}$ 包含 $f = \sum_j c_j K(\mathbf{x}_j, \cdot)$.

$$\|f\|_{\mathcal{H}}^2 = \langle f, g\rangle_{\mathcal{H}} = \langle \sum_{j=1}^{N} c_j K(\mathbf{x}_j, \cdot), \sum_{k=1}^{N} c_k K(\mathbf{x}_k, \cdot)\rangle_{\mathcal{H}}$$

$$= \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} c_j c_k \langle K(\mathbf{x}_j, \cdot), K(\mathbf{x}_k, \cdot)\rangle_{\mathcal{H}}$$

$$= \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} c_j c_k K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k)$$

定义空间 $H_K(\Omega) = \mathrm{span}\{K(\cdot, \mathbf{y}) : \mathbf{y} \in \Omega\}$, 相应的范数为

$$\langle \sum_{j=1}^{N} c_j K(\mathbf{x}_j, \cdot), \sum_{k=1}^{N} d_k K(\mathbf{y}_k, \cdot)\rangle_{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} c_j d_k K(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_k)$$

本性空间 (Native space)

定理

假设 K 是对称严格正定核, 那么双线性型 $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\mathcal{H}}$ 是 $H_K(\Omega)$ 中的内积. 并且 $H_K(\Omega)$ 是准 *Hilbert* 空间.

本性空间 $\mathcal{N}_K(\Omega)$ 是 $H_K(\Omega)$ 在范数 $\|\cdot\|_K$ 下的完备化空间. 特别地, 当 $\Phi(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = K(\mathbf{x},\mathbf{y})$ 时, 我们可以得到本性空间在 Fourier 变换下的刻画.

本性空间 (Native space)

定理

假设 $\Phi \in C(\mathbb{R}^s) \cap L_1(\mathbb{R}^s)$ 是严格正定函数. 定义

$$\mathcal{G} = \{f \in L_2(\mathbb{R}^s) \cap C(\mathbb{R}^s) : \frac{\hat{f}}{\sqrt{\hat{\Phi}}} \in L_2(\mathbb{R}^s)\}$$

以及双线性型

$$\langle f, g\rangle_{\mathcal{G}} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^s}}\langle \frac{\hat{f}}{\sqrt{\hat{\Phi}}}, \frac{\hat{g}}{\sqrt{\hat{\Phi}}}\rangle_{L_2(\mathbb{R}^s)} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^s}}\int_{\mathbb{R}^s} \frac{\hat{f}(\Omega)\overline{\hat{g}(\Omega)}}{\hat{\Phi}(\Omega)}\, d\Omega.$$

那么 $\mathcal{G}$ 是再生核空间, 内积为 $\langle \cdot, \cdot\rangle_{\mathcal{G}}$, 再生核 $\Phi(\cdot - \cdot)$. 并且 $\mathcal{G}$ 是 Φ 的再生核空间.

本性空间误差估计

$$
\begin{aligned}
I_X f &= \sum_{j=1}^{N} f(\mathbf{x}_j) u_j(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} u_j(\mathbf{x}) \langle f, \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} \\
&= \langle f, \sum_{j=1}^{N} u_j(\mathbf{x}) \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
|f(\mathbf{x}) - I_X f(\mathbf{x})| &= |\langle f, \Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^{N} u_j(\mathbf{x}) \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j) \rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}| \\
&\le \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} \|\Phi(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^{N} u_j(\mathbf{x}) \Phi(\cdot, \mathbf{x}_j)\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} = \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)} P_{\Phi,X}(\mathbf{x}).
\end{aligned}
$$

定理 (Madych and Nelson et.al)

$$
|f(x) - I_X f| \le P_{\Phi,X} \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}
$$

$$
\begin{aligned}
Q(\boldsymbol{u}) =&\Phi(\mathbf{x},\mathbf{x})-2u^{T}b(\mathbf{x})+u^{T}Au\\
=&\Phi(\mathbf{x},\mathbf{x})-2\sum_{j=1}^{N}u_j\Phi\left(\mathbf{x},\mathbf{x}_j\right)+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}u_iu_j\Phi\left(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j\right)\\
=&\langle\Phi(\cdot,\mathbf{x}),\Phi(\cdot,\mathbf{x})\rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}-2\sum_{j=1}^{N}u_j\left\langle\Phi(\cdot,\mathbf{x}),\Phi\left(\cdot,\mathbf{x}_j\right)\right\rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}\\
&+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}u_iu_j\left\langle\Phi\left(\cdot,\mathbf{x}_i\right),\Phi\left(\cdot,\mathbf{x}_j\right)\right\rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}\\
=&\left\langle\Phi(\cdot,\mathbf{x})-\sum_{j=1}^{N}u_j\Phi\left(\cdot,\mathbf{x}_j\right),\Phi(\cdot,\mathbf{x})-\sum_{j=1}^{N}u_j\Phi\left(\cdot,\mathbf{x}_j\right)\right\rangle_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}\\
=&\left\|\Phi(\cdot,\mathbf{x})-\sum_{j=1}^{N}u_j\Phi\left(\cdot,\mathbf{x}_j\right)\right\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}^{2}
\end{aligned}
\tag{4}
$$

误差估计

fill distance $h = h_{X,\Omega} = \sup_{\mathbf{x}\in\Omega} \min_{\mathbf{x}_j \in X} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|_2$.

- Gauss: $\|f - I_X f\|_{L_\infty(\Omega)} \le e^{\frac{-c|\log h_{X,\Omega}|}{h_{X,\Omega}}} \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$
- Inverse MQ: $\|f - I_X f\|_{L_\infty(\Omega)} \le e^{\frac{-c}{h_{X,\Omega}}} \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$
- Powers($\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{\lceil \beta/2 \rceil} \|\mathbf{x}\|^\beta$):
  $|D^\alpha f - D^\alpha I_X f| \le C h^{\frac{\beta}{2} - |\alpha|} \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$
- $\Phi(\mathbf{x}) = (-1)^{k+1} \|\mathbf{x}\|^{2k} \log \|\mathbf{x}\|$:
  $|D^\alpha f - D^\alpha I_X f| \le C h^{k-|\alpha|} \|f\|_{\mathcal{N}_\Phi(\Omega)}$

稳定性

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$$

$$\lambda_{\max} \le N\Phi(0)$$

$$\lambda_{\min} \ge F(q_X), \quad q_X := \frac{1}{2} \min_{i \ne j} \|x_i - x_j\|_2.$$

$$\mathrm{cond}(A) \le \frac{N\Phi(0)}{F(q_X)}$$

mesh ratio $\rho = \frac{h_{X,\Omega}}{q_X}$, quasi-uniform ($\rho \approx 1$). Trade-off principle[3]

[3] R. Schaback, Error estimates and condition numbers for radial basis function interpolation, Adv. in Comput. Math. 3, pp. 251-264.

1 径向基函数插值理论

2 **径向基函数无网格方法**

径向基函数无网格方法常见类型

1 径向基函数插值理论

2 径向基函数无网格方法

径向基函数无网格方法常见类型

广义 Hermite 插值[4]

考虑泛函型数据 $\{x_j, L_j f\}_{j=1}^N$, $\Lambda = \{L_1, \dots, L_N\}$ 是一组线性无关的连续线性泛函. 希望寻找逼近函数 $P_f(x)$, s.t. $L_j P_f = L_j f$, $j = 1, \dots, N$.

$$P_f(x) = \sum_{j=1}^{N} c_j L_j^y \phi(\|x - y\|)$$

$$Ac = F_L, \quad A_{ij} = L_i^x L_j^y \phi, \quad F_L = (L_1 f, \dots, L_N f)^T.$$

[3] Z.M. Wu, Hermite-Birkhoff interpolation of scattered data by radial basis function, Approx. Theory Appl., 1992, 8, pp. 1-10.

无网格微分方程数值解

一般的线性偏微分方程

$$\mathcal{L}u = \sum p_\alpha(x) D^\alpha u(x) = f(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d,$$

$$\mathcal{B}u = \sum q_\alpha(x) D^\alpha u(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d$$

无网格微分方程数值解

一般的线性偏微分方程

$$\mathcal{L}u = \sum p_\alpha(x) D^\alpha u(x) = f(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d,$$

$$\mathcal{B}u = \sum q_\alpha(x) D^\alpha u(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d$$

由线性算子表示定理，存在广义函数

$$p(x,y) = \sum p_\alpha(x)\delta^{(\alpha)}(x-y), q(x,y) = \sum q_\alpha(x)\delta^{(\alpha)}(x-y),$$

使得上述线性偏微分方程可以用积分表示

$$\mathcal{L}u = \int_\Omega p(x,y)u(y)\,dy = f(x),$$

$$\mathcal{B}u = \int_{\partial\Omega} p(x,y)u(y)\,dy = g(x).$$

无网格微分方程数值解

一般的线性偏微分方程

$$\mathcal{L}u = \sum p_\alpha(x) D^\alpha u(x) = f(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d,$$

$$\mathcal{B}u = \sum q_\alpha(x) D^\alpha u(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d$$

由线性算子表示定理，存在广义函数

$$p(x, y) = \sum p_\alpha(x)\delta^{(\alpha)}(x-y), q(x, y) = \sum q_\alpha(x)\delta^{(\alpha)}(x-y),$$

使得上述线性偏微分方程可以用积分表示

$$\mathcal{L}u = \int_\Omega p(x, y)u(y)\,dy = f(x),$$

$$\mathcal{B}u = \int_{\partial\Omega} p(x, y)u(y)\,dy = g(x).$$

这类方程包含线性偏微分方程，线性积分方程，线性积分微分混合方程等.

无网格微分方程数值解

对方程进行离散化. 在区域内取点 $\{x_j\}_{j=1}^{N}$, 边界上取点 $\{x_j\}_{j=N+1}^{M}$. 把方程离散为一组线性泛函方程

$$\mathcal{L}_j u = f(x_j) = \int_{\Omega} p(x_j, y)\, u(y)\, dy, \quad j = 1, \ldots, N,$$

$$\mathcal{B}_j u = g(x_j) = \int_{\partial\Omega} q(x_j, y)\, u(y)\, dy, \quad j = N+1, \ldots, N+M.$$

无网格微分方程数值解

对方程进行离散化. 在区域内取点 $\{x_j\}_{j=1}^N$, 边界上取点 $\{x_j\}_{j=N+1}^M$. 把方程离散为一组线性泛函方程

$$\mathcal{L}_j u = f(x_j) = \int_\Omega p(x_j, y) u(y)\, dy, \quad j = 1, \dots, N,$$

$$\mathcal{B}_j u = g(x_j) = \int_{\partial\Omega} q(x_j, y) u(y)\, dy, \quad j = N+1, \dots, N+M.$$

寻找泛函信息值得 Kriging 插值 (径向基函数插值)

$$u^*(x) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \mathcal{L}_j \Phi(x - x_j) + \sum_{k=N+1}^{N+M} \mu_k \mathcal{B}_k \Phi(x - x_k).$$

λ, μ 满足下面的线性方程组

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}$$

$$A_{11} = \left(\iint p(x_{j1}, s) p(x_{j2}, t) \Phi(s-t)\, ds dt \right),$$

$$A_{12} = \left(\iint p(x_{j1}, s) q(x_{k2}, t) \Phi(s-t)\, ds dt \right),$$

$$A_{21} = \left(\iint q(x_{k1}, s) p(x_{j2}, t) \Phi(s-t)\, ds dt \right),$$

$$A_{22} = \left(\iint q(x_{k1}, s) q(x_{k2}, t) \Phi(s-t)\, ds dt \right).$$

离散方程的解

$$u^*(x) = [\mathcal{L}\Phi(x-x_j), \mathcal{B}\Phi(x-x_k)] A^{-1} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}.$$

收敛性分析

径向基函数插值使得 Kriging 范数最小

$$\int \hat{\Phi}(\omega) I^2(\omega, x)\, dx,$$

$$I(\omega, x) = \sum_j \lambda_j(x) \int P(x_j, s)\, e^{i\omega s} ds + \sum_k \mu_k(x) \int Q(x_k, s)\, e^{i\omega s} ds - e^{i\omega x}.$$

利用 Schawarz 不等式，误差 $u(x) - u^*(x)$ 的范数受 Kriging 范数控制

$$\begin{aligned}\|u - u^*\|^2 &= \left| \int \hat{u}(\omega) I(\omega, x)\, d\omega \right|^2 \\ &\leq \left(\int \frac{\hat{u}^2(\omega)}{\hat{\Phi}(\omega)} \right) \left(\int \hat{\Phi}(\omega) I^2(\omega, x)\, d\omega \right)\end{aligned}$$

收敛性分析

选择合适的径向函数可使 $\int \frac{\hat{u}^2(\omega)}{\hat{\Phi}(\omega)}$ 有界. (譬如 $u \in C^l$, 可知 $\hat{u} < \mathcal{O}(1+\|\omega\|)^{-l-d}$, 可选取 $\hat{\Phi}(\omega) \approx C(1+\|\omega\|)^{-K}$, $K < 2l+d$). 只需要分析

$$\int (1+\|\omega\|)^{-K} I^2(\omega, x)\, d\omega$$

无网格方法

- 最小二乘法
- 配置法
- Galerkin 方法
- 拟插值方法

最小二乘法

考虑方程

$$\mathcal{L}u = f(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d,$$
$$\mathcal{B}u = g(x), \quad x \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d$$

最小二乘法

考虑方程

$$\mathcal{L}u = f(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d,$$
$$\mathcal{B}u = g(x), \quad x \in \partial\Omega \subset \mathbb{R}^d$$

假设微分方程的解已经有逼近形式

$$u(x) = \sum \lambda_j \Phi(x - x_j)$$

x_j 是 Ω 中密集的节点，也可取一些 x_j 在区域外部. 称使得

$$\int_\Omega \Big(\sum \lambda_j \mathcal{L}\Phi(x - x_j) - f(x)\Big)^2 dx + w^2 \int_{\partial\Omega} \Big(\sum \lambda_j \mathcal{B}\Phi(x - x_j) - g(x)\Big)^2$$

达到最小的函数 $\sum \lambda_j \Phi(x - x_j)$ 为微分方程最小二乘解 (希望在象空间中误差的 L^2 范数最小).

最小二乘法

$\lambda = (\ldots, \lambda_j, \ldots)^T$ 满足

$$A\lambda = D, \quad A = (a_{jk}), \quad D = (d_j),$$

其中

$$a_{jk} = \int_\Omega \mathcal{L}\Phi(x - x_j)\mathcal{L}\Phi(x - x_k)\,dx + w^2 \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}\Phi(x - x_j)\mathcal{B}\Phi(x - x_k)\,dx$$

$$d_j = \int_\Omega \mathcal{L}\Phi(x - x_j)f(x)\,dx + w^2 \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}\Phi(x - x_j)g(x)\,dx,$$

最小二乘法

$\lambda = (\ldots, \lambda_j, \ldots)^T$ 满足

$$A\lambda = D, \quad A = (a_{jk}), \quad D = (d_j),$$

其中

$$a_{jk} = \int_\Omega \mathcal{L}\Phi(x - x_j)\mathcal{L}\Phi(x - x_k)\,dx + w^2 \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}\Phi(x - x_j)\mathcal{B}\Phi(x - x_k)\,dx$$

$$d_j = \int_\Omega \mathcal{L}\Phi(x - x_j)f(x)\,dx + w^2 \int_{\partial\Omega} \mathcal{B}\Phi(x - x_j)g(x)\,dx,$$

w 是权重，由实际问题对边界及区域内部的不同要求决定. 如果函数 Φ 满足，当 λ_j 不全为零时，$\sum_j \lambda_j \mathcal{L}\Phi(x - x_j)$ 在 Ω，$\sum_j \lambda_j \mathcal{B}\Phi(x - x_j)$ 在 $\partial\Omega$ 至少有一个不是零函数，那么有

$$\lambda^T A\lambda = \int_\Omega [\sum_j \lambda_j \mathcal{L}\Phi(x - x_j)]^2 + w^2 \int_{\partial\Omega} [\sum_j \lambda_j \mathcal{B}\Phi(x - x_j)]^2 > 0$$

配置法

对于最小二乘法中的积分，如果取 Ω 内部密集的点 $\{x_j\}_{j=1}^{N}$，边界 $\partial\Omega$ 上密集的点 $\{x_j\}_{j=N+1}^{N+M}$，用 Riemann 和近似表示积分

$$\sum_{k=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{N+M}\lambda_j\mathcal{L}\Phi(x_k-x_j)-f(x)\right)^2\Delta_k$$

$$+w^2\sum_{k=N+1}^{N+M}\left(\sum_{j=1}^{N+M}\lambda_j\mathcal{B}\Phi(x_k-x_j)-g(x)\right)^2\Delta_k,$$

其中 Δ_j 是包含点 x_j 的 Riemann 面积元.

配置法

求 λ_j 使得上述离散和最小得到

$$A^T \Delta A \lambda = A^T \Delta \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix},$$

其中 $A = (a_{jk})$,

$$a_{jk} = \mathcal{L}\Phi(x_j - x_k), \ \ k = 1, \dots, N,$$

$$a_{jk} = \mathcal{B}\Phi(x_j - x_k), \ \ k = N+1, \dots, N+M$$

$$\Delta = \begin{pmatrix} \Delta_j & \\ & w^2 \Delta_j. \end{pmatrix}$$

如果矩阵 A 本身非奇异, 那么有如下形式

$$A\lambda = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}.$$

配置法

上述结果可以看成，对解 $u(x)$ 用 $u^*(x) = \sum_j \lambda_j \Phi(x - x_j)$ 逼近，而要求

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u^*(x_j) &= f(x_j), \quad j = 1, \ldots, N, \\ \mathcal{B}u^*(x_j) &= g(x_j), \quad j = N+1, \ldots, N+M. \end{aligned}$$

这就是径向基函数配置法 (collocation method)[5].

[5] E. Kansa, Multiquadrics-a scattered data approximation scheme with applications to computational fluid dynamics-II. Solution to parabolic, hyperbolic and elliptic partial differential equations. Comput. Math. Appl., 1990,19, pp. 147-161.

Galerkin 方法

上述方法使得误差

$$\sum_j \lambda_j \mathcal{L}\Phi(x - x_j) - f(x),$$

$$\sum_j \lambda_j \mathcal{B}\Phi(x - x_j) - g(x)$$

在某种最小二乘意义下取最小. Galerkin 方法希望误差与某个径向基函数张成的函数空间正交.

$S = \text{span}\{\Phi(x - x_1), \ldots, \Phi(x - x_N)\}$