

VỀ MỘT KHÍA CẠNH ẢNH HƯỞNG CỦA THAM SỐ ĐẾN BÀI TOÁN XẤP XÍ DỮ LIỆU TÁN XẠ SỬ DỤNG HÀM CƠ SỞ BÁN KÍNH MULTIQUADRIC

VŨ THÁI LUÂN, ĐẶNG QUANG Á

Viện Công nghệ thông tin, Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam

Abstract. In this paper, we study an aspect of influence of parameter p in scattered data approximation problems using multiquadric radial basic function (MQ), $\varphi(r) = \sqrt{r^2 + p^2}$. We prove that the condition number $\text{cond}(\mathbf{A})$ of the coefficient matrix \mathbf{A} of the problem is an increasing function of the variable p . This surprising result leads to the fact that the choice of $p \gg 1$ will cause the numerical instability of the system of equations of the problem.

Tóm tắt. Trong bài báo này, chúng tôi nghiên cứu một khía cạnh ảnh hưởng của tham số p khi xấp xỉ hàm với dữ liệu tán xạ bằng phương pháp sử dụng hàm cơ sở bán kính multiquadric (MQ), $\varphi(r) = \sqrt{r^2 + p^2}$. Chúng tôi chỉ ra rằng ma trận hệ số \mathbf{A} của hệ phương trình thu được có số điều kiện $\text{cond}(\mathbf{A})$ là hàm số đồng biến theo biến là tham số p . Kết quả ngạc nhiên này nói lên rằng nếu chọn tham số $p \gg 1$ thì sẽ mất đi tính ổn định khi giải số hệ thu được.

1. GIỚI THIỆU

Gần đây phương pháp RBF (radial basis functions) được biết đến như một phương pháp không lưới (xem [3], [1], [13]), được nghiên cứu rộng rãi và có nhiều ứng dụng hiệu quả cho các bài toán xấp xỉ hoặc nội suy dữ liệu tán xạ (nói chung là các bài toán khôi phục lại một hàm chưa biết từ tập dữ liệu tán xạ cho trước). Do đó một cách tự nhiên nó có nhiều ứng dụng trong các lĩnh vực như: giải số phương trình đạo hàm riêng (PDEs), xử lý ảnh, xử lý tín hiệu, điều khiển, khôi phục bề mặt 2D, 3D,... Lợi ích lớn nhất của phương pháp RBF là có thể giải quyết các bài toán với tập dữ liệu lớn với số chiều không gian tùy ý. Tuy nhiên, sử dụng phương pháp RBF để giải các lớp bài toán này thường đưa về giải một hệ đại số tuyến tính cỡ lớn $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, mà ở đó ma trận \mathbf{A} thường là ma trận đầy và có điều kiện xấu ($\text{cond}(\mathbf{A}) \gg 1$) (xem [11]). Đặc biệt vì nhiều dạng hàm RBF thông dụng thường chứa một tham số p như MQ ($\varphi(r) = \sqrt{r^2 + p^2}$), IMQ ($\varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{r^2 + p^2}}$), Gaussian (e^{-pr^2}) nên độ chính xác của phương pháp xấp xỉ nói chung phụ thuộc chủ yếu vào cách chọn p . Có nhiều thuật toán chọn giá trị tham số p nhằm cải thiện độ chính xác của xấp xỉ được đưa ra như trong [10], [5], [4]. Tuy nhiên những thuật toán này tùy thuộc vào từng ứng dụng cụ thể. Và cho đến nay bài toán chọn tham số tối ưu vẫn là bài toán mở. Trong bài báo này chúng tôi không đề cập đến vấn đề này.

Ý tưởng trong bài báo này là xuất phát từ sự quan sát sau. Ta biết rằng khi cho p một giá trị cố định thì có thể coi $\text{cond}(\mathbf{A})$ như một hàm “ngịch biến” theo khoảng cách tách biệt

giữa các tâm RBF,

$$q_X := \frac{1}{2} \min_{i \neq j} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|,$$

$\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ là các tâm RBF thuộc tập dữ liệu X . Theo đó nếu ta giảm q_X (tức tăng số tâm RBF sử dụng) thì số điều kiện ma trận \mathbf{A} sẽ tăng, thậm chí theo tốc độ hàm mũ (xem [3]). Vì thế, một câu hỏi tự nhiên đặt ra là nếu ta cố định q_X (tức cố định số tâm RBF được chọn) và cho giá trị tham số p thay đổi khi đó $\text{cond}(\mathbf{A})$ là hàm của p sẽ thay đổi như thế nào khi sử dụng hàm MQ cho bài toán xấp xỉ dữ liệu tán xạ cùng một số kết quả đã biết về hàm MQ? Câu trả lời sẽ nằm trong Mục 3 của bài báo.

Trong Mục 2 của bài báo sẽ mô tả lại bài toán xấp xỉ dữ liệu tán xạ với các hàm cơ sở bán kính. Một kết quả thể hiện sự ảnh hưởng của tham số đến số điều kiện ma trận hệ số của hệ đại số tuyến tính thu được khi xấp xỉ dữ liệu tán xạ với MQ được đưa ra trong Mục 3. Và cuối cùng, Mục 4 là một số ví dụ minh họa cho kết quả lý thuyết.

2. BÀI TOÁN XẤP XỈ DỮ LIỆU TÁN XẠ VỚI HÀM CƠ SỞ BÁN KÍNH

Cho trước một tập hợp các điểm tán xạ $X = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N\} \subseteq \Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, trong đó Ω là miền bị chặn, \mathbf{x}_i là các điểm phân biệt, $i = 1, 2, \dots, N$, và các giá trị thực tương ứng của một hàm y nào đó tại các điểm tán xạ của tập X là y_1, y_2, \dots, y_N (trong thực tế các số liệu thường cho ở dạng xấp xỉ). Bài toán đặt ra là xây dựng một hàm $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ thuộc một lớp không gian hàm \mathbf{S} nào đó, xấp xỉ hàm gốc y , hay $f \approx y$ trên Ω ($f(\mathbf{x}_i) \approx y_i$). Bài toán này được gọi là bài toán *xấp xỉ dữ liệu tán xạ* (xem [13]).

Vấn đề chọn không gian hàm \mathbf{S} và dạng hàm f

Trong bài báo này chúng tôi theo cách xây dựng trong [12], ở đó Schaback đã chỉ ra không gian hàm \mathbf{S} chọn là không gian tuyến tính, và phải phụ thuộc vào tập dữ liệu X . Sự phụ thuộc của \mathbf{S} vào tập dữ liệu X có thể được giải thích bởi định lý của Mairhuber và Curtis (xem [13], trang 19). Như vậy có thể biểu diễn \mathbf{S} như sau:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_X = \left\{ \sum_{i=1}^m w_i \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(i)}) : w_i \in \mathbb{R} \right\}, \quad (1)$$

ở đây m là số chiều không gian \mathbf{S} , và $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(i)})$ là hàm biến $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ phụ thuộc dữ liệu $\mathbf{x}^{(i)} = [x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_d^{(i)}]^T \in \mathbb{R}^d$, với

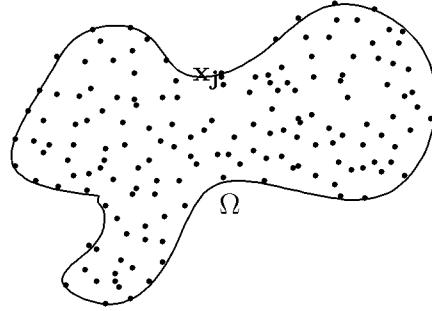
$$\Phi : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}.$$

Một kết quả lý thú được biết đến là khi ràng buộc hàm Φ có các tính chất bất biến tịnh tiến (giá trị hàm không thay đổi khi tịnh tiến hệ trục tọa độ) và bất biến quay (giá trị hàm không thay đổi khi quay hệ trục tọa độ) thì tồn tại hàm φ sao cho Φ có dạng đặc biệt sau (xem [12])

$$\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2), \quad \varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}, \quad (2)$$

$\|\cdot\|_2$ - kí hiệu chuẩn Euclid trong \mathbb{R}^d . Hàm Φ như vậy được gọi là *hàm bán kính*. Có thể thấy ngay lợi ích của hàm bán kính là thay vì chúng ta phải làm việc với hàm nhiều biến Φ ta chỉ phải làm việc với hàm một biến φ với số chiều không gian d tùy ý. Điều này tránh

được nhiều khó khăn gặp phải khi số chiều không gian lớn. Như vậy nếu chọn không gian hàm \mathbf{S} là không gian tuyến tính có cơ sở là các hàm bán kính (gọi tắt là các hàm cơ sở bán kính RBFs (radial basis functions)) thì sẽ rất thích hợp cho bài toán xấp xỉ với các điểm dữ liệu nằm rải rác và không có cấu trúc trong miền hình học phức tạp Ω (xem Hình 1). Đó cũng là lí do mà phương pháp sử dụng các hàm cơ sở bán kính giải bài toán xấp xỉ, hoặc nội suy dữ liệu tán xạ được xem như một phương pháp không lưới (xem [3]).



Hình 1. Dữ liệu tán xạ nằm trong miền hình học phức tạp Ω .

Phân tích ở trên gợi ý cho chúng ta chọn dạng hàm $f : \Omega \subseteq \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ xấp xỉ y trong dạng:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m w_j \varphi_j(\mathbf{x}), \quad (3)$$

ở đó $\{\varphi_j(\mathbf{x}) = \varphi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}^{(j)}\|_2)\}_{j=1}^m$ là tập các hàm RBF, $\{\mathbf{c}^{(j)}\}_{j=1}^m$ gọi là tập các tâm các hàm RBF được chọn theo một cách nào đó với $m \leq N$ và $\{w_j\}_{j=1}^m$ gọi là tập các trọng số. Một số hàm RBF thông dụng với các tính chất có giá toàn cục và độ trơn tùy ý được cho trong Bảng 1.

3. KHÍA CẠNH ẢNH HƯỞNG CỦA THAM SỐ ĐẾN BÀI TOÁN XẤP XỈ HÀM SỬ DỤNG HÀM MQ

Hàm MQ lần đầu tiên được giới thiệu bởi Hardy (xem [6]), ứng dụng trong xấp xỉ bề mặt hai chiều, cùng nhiều ứng dụng phổ biến khác [7]. Ngoài ra có nhiều kết quả lý thuyết toán học cho MQ được chứng minh bởi Micchelli [8]. Nhiều kết quả thử nghiệm số cũng chỉ ra phương pháp sử dụng hàm MQ để nội suy hoặc xấp xỉ hàm có độ chính xác tốt hơn các hàm RBF khác. Điển hình là trong bài báo [5], R. Franke đã xếp hạng MQ là phương pháp tốt nhất trong số 29 lược đồ nội suy dữ liệu tán xạ dựa trên các tiêu chí như: độ chính xác, tính ổn định, và yêu cầu về bộ nhớ. Trong [9] Powell cũng khẳng định nhận định này. Vì vậy trong bài báo này chúng tôi chỉ tập trung vào dạng hàm là MQ: $\varphi(r) = \sqrt{r^2 + p^2}$ ($\beta = 1$). Như vậy khi dạng các hàm RBF đã được chọn thì công việc của chúng ta là tìm các trọng số w_j chưa biết.

Bảng 1. Một số hàm RBF có giá toàn cục với độ trơn $C^\infty(\mathbb{R}^d)$, $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$.

Tên hàm	Dạng hàm	Tham số	Độ trơn
Multiquadrics(MQs)	$\varphi(r) = (r^2 + p^2)^{\beta/2}$	$p > 0, \beta \in \mathbb{R}^+ \setminus 2\mathbb{N}$	$C^\infty(\mathbb{R}^d)$
Thin plate splines(TPSs)	$\varphi(r) = r^\beta \ln r$	$\beta > 0, \beta \in 2\mathbb{N}$	$C^\infty(\mathbb{R}^d)$
Inverse multiquadrics(IMQs)	$\varphi(r) = (r^2 + p^2)^{-\beta/2}$	$p > 0, \beta \in \mathbb{R}^+ \setminus 2\mathbb{N}$	$C^\infty(\mathbb{R}^d)$
Gaussian	$\varphi(r) = e^{-\beta r^2}$	$\beta > 0$	$C^\infty(\mathbb{R}^d)$

Như thường lệ phương pháp bình phương tối thiểu là một công cụ tốt có thể sử dụng trong tình huống này.

Phương pháp bình phương tối thiểu tìm các trọng số w_j

Chúng ta cần giải bài toán cực trị tìm cực tiểu của tổng S sau

$$S = \sum_{i=1}^N [y_i - f(\mathbf{x}^{(i)})]^2 \longrightarrow \min. \quad (4)$$

Từ (3) ta có thể viết

$$S = \sum_{i=1}^N \left[y_i - \sum_{j=1}^m w_j \varphi_j(\mathbf{x}^{(i)}) \right]^2.$$

Điều kiện cực trị: $\frac{\partial S}{\partial w_j} = 0$ ($j = 1, 2, \dots, m$) cho ta

$$\sum_{k=1}^m \left(\sum_{i=1}^N \varphi_k(\mathbf{x}^{(i)}) \varphi_j(\mathbf{x}^{(i)}) \right) w_k = \sum_{i=1}^N \varphi_j(\mathbf{x}^{(i)}) y_i, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (5)$$

Có thể thấy (5) là một hệ gồm m phương trình, m ẩn là các trọng số w_k . Đưa vào các kí hiệu ma trận

$$\mathbf{A} = (\varphi_j(\mathbf{x}^{(i)})), \quad (i = 1, \dots, N; j = 1, \dots, m), \quad \mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_m]^T, \quad \mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_N]^T,$$

kí tự T chỉ sự chuyển vị của một vectơ hay ma trận. Khi đó hệ (5) có thể viết trong dạng ma trận

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A}) \mathbf{w} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}. \quad (6)$$

Khi giải hệ (6) chúng tôi quan tâm đến hai khía cạnh: tính giải được (tồn tại duy nhất nghiệm) và tính ổn định khi giải số, trong đó có ảnh hưởng lớn bởi số điều kiện của ma trận $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$.

Tính giải được của hệ (6) với hàm MQ

Tính giải được khi giải hệ (6) được quyết định bởi tính chất khả nghịch của ma trận $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Do đó nó sẽ phụ thuộc vào dạng hàm RBF được lựa chọn, cụ thể ở đây là dạng hàm MQ: $\varphi_j(\mathbf{x}) = \varphi_j(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}^{(j)}\|_2) = \sqrt{(\|\mathbf{x} - \mathbf{c}^{(j)}\|_2)^2 + p_j^2}$.

Ở đây chúng tôi chỉ tập trung vào xét trường hợp tập các tâm RBFs được chọn trùng với tập dữ liệu X , tức là $\mathbf{c}^{(j)} = \mathbf{x}^{(j)}$ và tham số $p_j^2 = p^2, \forall j = 1, 2, \dots, N$. Khi đó ta luôn có $(-1)^{N-1} \det \mathbf{A} > 0$ (được chứng minh bởi Micchelli (xem [8], trang 14)). Do vậy trong trường hợp này (6) luôn giải được.

Sự ảnh hưởng của tham số đến sự ổn định khi giải số hệ (6)

Để thấy khi sử dụng hàm MQ thì ma trận hệ số $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ sẽ phụ thuộc vào tham số p . Hơn nữa khi giải số hệ (6) yếu tố đóng vai trò quan trọng là số điều kiện của ma trận hệ số. Do đó chúng tôi xét đến một khía cạnh ảnh hưởng của p đến số điều kiện của ma trận hệ số. Trước hết chúng tôi giới thiệu một kết quả đã biết, chẳng hạn xem trong [8].

Bổ đề 3.1. *Giả sử $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^N$ là ma trận thực, đối xứng cấp $N \times N$ và hầu xác định âm. Đồng thời tồn tại vectơ $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{d}^T \mathbf{A} \mathbf{d} > 0$. Khi đó \mathbf{A} có đúng 1 giá trị riêng dương và $N - 1$ giá trị riêng âm.*

Ở đây ma trận thực đối xứng \mathbf{A} được gọi là hầu xác định âm nếu $\mathbf{c}^T \mathbf{A} \mathbf{c} \leq 0, \forall \mathbf{c} = [c_1, \dots, c_N]^T \in \mathbb{R}^N : \sum_{i=1}^N c_i = 0$, và đẳng thức xảy ra khi và chỉ khi $c_1 = \dots = c_N = 0$ (xem [2]). Từ Bổ đề 3.1 chúng tôi rút ra nhận xét sau:

Nhận xét 3.1. Nếu ma trận \mathbf{A} nói trong Bổ đề 3.1 có vết là số dương (tức $\text{trace}(\mathbf{A}) > 0$) thì giá trị riêng dương của nó phải có giá trị tuyệt đối lớn nhất trong các giá trị riêng của \mathbf{A} . Thật vậy, nếu gọi $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ là N giá trị riêng của \mathbf{A} . Không mất tính tổng quát ta giả sử các giá trị riêng của \mathbf{A} được sắp xếp theo thứ tự $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_{N-1} < 0 < \lambda_N$. Mặt khác theo một kết quả đã biết trong đại số tuyến tính nếu \mathbf{A} là ma trận thực vuông, đối xứng thì $\text{trace}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^N a_{ii} = \sum_{i=1}^N \lambda_i$. Do đó nếu $\text{trace}(\mathbf{A}) > 0$ thì ta có $0 < \sum_{i=1}^N \lambda_i = (\lambda_1 + \dots + \lambda_{N-1}) + \lambda_N = -(|\lambda_1| + \dots + |\lambda_{N-1}|) + \lambda_N$. Từ đây dễ dàng suy ra

$$|\lambda_N| = \max_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i| \quad \text{và} \quad |\lambda_{N-1}| = \min_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i|.$$

Dựa vào bổ đề trên, chúng tôi đưa ra kết quả sau nói lên ảnh hưởng của tham số p khi xấp xỉ hàm với MQ.

Định lý 3.1. *Xét hệ phương trình (6) với $m = N$, sử dụng hàm MQ với $p_j^2 = p^2, \forall j = 1, 2, \dots, N$. Khi đó $\text{cond}(\mathbf{A})$ là hàm đồng biến của tham số p .*

Proof. Từ giả thiết, theo phần trên ta có \mathbf{A} là ma trận vuông khả nghịch. Do đó hệ (6) trở thành

$$\mathbf{A} \mathbf{w} = \mathbf{y}. \tag{7}$$

Ngoài ra vì $\varphi_j(\mathbf{x}) = \sqrt{(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(j)}\|_2)^2 + p^2}$ nên $\varphi_j(\mathbf{x}^{(i)}) = \varphi_i(\mathbf{x}^{(j)})$. Do đó ta có \mathbf{A} là ma trận đối xứng. Mặt khác có thể thấy tính chất hầu xác định âm của \mathbf{A} cũng được thỏa mãn (xem [1], trang 15). Nhận thấy $\mathbf{1}^T \mathbf{A} \mathbf{1} = \sum_{i,j=1}^N \varphi_j(\mathbf{x}^{(i)}) > 0$, với $\mathbf{1} = [1, 1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^N$. Vậy \mathbf{A} thỏa mãn bổ đề 3.1. Do đó \mathbf{A} có 1 giá trị riêng dương và $N - 1$ giá trị riêng âm. Vì \mathbf{A} đối xứng nên tất cả các giá trị riêng $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ của \mathbf{A} phải là các số thực (phụ thuộc tham số p). Không mất tính tổng quát ta giả sử các giá trị riêng của \mathbf{A} được sắp xếp theo thứ tự $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_{N-1} < 0 < \lambda_N$. Để ý rằng ở đây $\text{trace}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^N \varphi_i(\mathbf{x}^{(i)}) = N.p > 0$, do đó theo nhận xét 3.1 ta có

$$|\lambda_N| = \max_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i| \quad \text{và} \quad |\lambda_{N-1}| = \min_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i|.$$

Từ tính chất đối xứng của \mathbf{A} ta có

$$\text{cond}(\mathbf{A}) = \frac{\max_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i|}{\min_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i|} = \frac{|\lambda_N|}{|\lambda_{N-1}|} = \frac{\lambda_N}{-\lambda_{N-1}}. \tag{8}$$

Lấy đạo hàm hai vế của (8) theo p ta có

$$\frac{\partial(\text{cond}(\mathbf{A}))}{\partial p} = -\frac{1}{\lambda_{N-1}^2} \left[\frac{\partial \lambda_N}{\partial p} \cdot \lambda_{N-1} - \lambda_N \cdot \frac{\partial \lambda_{N-1}}{\partial p} \right]. \quad (9)$$

Chúng ta cần chứng minh $\frac{\partial(\text{cond}(\mathbf{A}))}{\partial p} > 0$. Từ (9) gợi ý đi chứng minh $\frac{\partial \lambda_N}{\partial p} > 0$ và $\frac{\partial \lambda_{N-1}}{\partial p} > 0$ là xong. Thậ vậy, gọi $\lambda_{\mathbf{A}}$ là một giá trị riêng của \mathbf{A} , khi đó vì \mathbf{A} đối xứng nên sẽ tồn tại vectơ riêng trực chuẩn $\mathbf{x}_{\mathbf{A}}$ ($\|\mathbf{x}_{\mathbf{A}}\|_2 = 1$ hay $\mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \mathbf{x}_{\mathbf{A}} = 1$) sao cho $\mathbf{A} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} = \lambda_{\mathbf{A}} \mathbf{x}_{\mathbf{A}}$. Từ đó suy ra $\lambda_{\mathbf{A}} = \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \mathbf{A} \mathbf{x}_{\mathbf{A}}$ và $\mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \mathbf{A} = \lambda_{\mathbf{A}} \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T$. Do vậy

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_{\mathbf{A}}}{\partial p} &= \frac{\partial \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T}{\partial p} \mathbf{A} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} + \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} + \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{x}_{\mathbf{A}}}{\partial p} \\ &= \frac{\partial \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T}{\partial p} \lambda_{\mathbf{A}} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} + \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} + \lambda_{\mathbf{A}} \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{x}_{\mathbf{A}}}{\partial p} \\ &= \lambda_{\mathbf{A}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T}{\partial p} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} + \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{x}_{\mathbf{A}}}{\partial p} \right) + \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} \\ &= \lambda_{\mathbf{A}} \frac{\partial(\mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \mathbf{x}_{\mathbf{A}})}{\partial p} + \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} = \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} \mathbf{x}_{\mathbf{A}}. \end{aligned} \quad (10)$$

Ở đây các kí hiệu đạo hàm của ma trận $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p}$ hay đạo hàm của véc tơ $\frac{\partial \mathbf{x}_{\mathbf{A}}}{\partial p}$ được hiểu là đạo hàm của từng phần tử trong ma trận hay véc tơ đó theo p , $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} := \left(\frac{\partial \varphi_j(\mathbf{x}^{(i)})}{\partial p} \right) = \left(\frac{-p}{\varphi_j(\mathbf{x}^{(i)})} \right)$. Để ý rằng $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} = p \mathbf{B}$, với $\mathbf{B} := \left(\frac{1}{\varphi_j(\mathbf{x}^{(i)})} \right)$ chính là ma trận hệ số của bài toán xấp xỉ dữ liệu tán xạ sử dụng hàm IMQ. Do đó \mathbf{B} là ma trận xác định dương (xem [8], trang 19). Do đó từ (10) có $\frac{\partial \lambda_{\mathbf{A}}}{\partial p} = \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial p} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} = p \cdot \mathbf{x}_{\mathbf{A}}^T \mathbf{B} \mathbf{x}_{\mathbf{A}} > 0$. Áp dụng với λ_N, λ_{N-1} ta có $\frac{\partial \lambda_N}{\partial p} > 0, \frac{\partial \lambda_{N-1}}{\partial p} > 0$. Từ (9) cho ta thấy được $\frac{\partial(\text{cond}(\mathbf{A}))}{\partial p} > 0$. ■

Nhận xét 3.2. Kết quả này giải thích nếu chọn tham số $p \gg 1$ thì $\text{cond}(\mathbf{A}) \gg 1$, hay ma trận \mathbf{A} là ma trận điều kiện xấu, khi đó việc xấp xỉ hoặc nội suy sẽ không còn ý nghĩa. Cũng có thể thấy khi giải (6) với các hàm RBF bán kính thông dụng còn lại ma trận \mathbf{A} không thỏa mãn Bổ đề 3.1, do vậy sẽ không thể có kết quả tương tự như Định lý 3.1.

Sau đây chúng tôi đưa ra một số ví dụ để minh họa cho kết luận của Định lý 3.1.

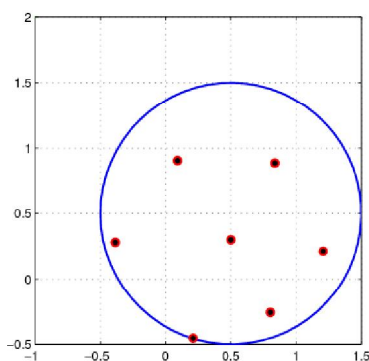
4. VÍ DỤ

Trong phần này chúng tôi xét 2 ví dụ với 2 tập dữ liệu tán xạ với số điểm tương ứng là 7 và 19 điểm, phân bố trong hình tròn $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : (x - \frac{1}{2})^2 + (y - \frac{1}{2})^2 \leq 1\}$. Các kết quả tính toán cho thấy sự phù hợp với kết quả lý thuyết.

Ví dụ 4.1. Xét tập dữ liệu tán xạ gồm 7 điểm cho số liệu ở dạng xấp xỉ trong Bảng 2, phân bố trong miền Ω (xem hình 2). Sử dụng phương pháp xấp xỉ dữ liệu tán xạ hàm MQ với một số giá trị tăng dần của tham số p , chúng tôi thu được số điều kiện của ma trận \mathbf{A} cũng tăng dần (xem Bảng 3).

Bảng 2. Tập dữ liệu với 7 điểm tán xạ

x_i	y_i
1.20647753367457	0.21229496991117
0.83639882568944	0.88744689811487
0.09069547152563	0.90567289832885
-0.38624378873230	0.27942357891325
0.21017881366252	-0.45326759129942
0.80232457266146	-0.25733883755451
0.50000000000000	0.30000000000000

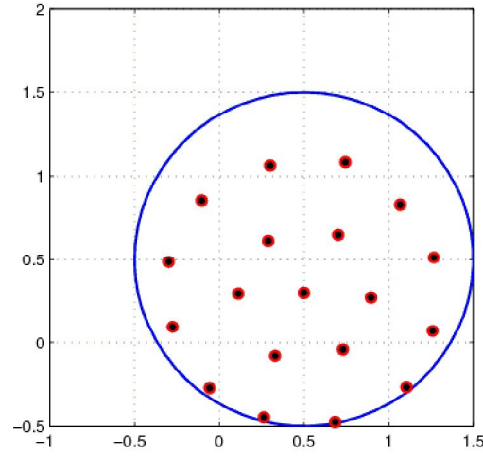


Hình 2. 7 điểm tán xạ phân bố trong miền $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : (x - \frac{1}{2})^2 + (y - \frac{1}{2})^2 \leq 1\}$.

Bảng 3. Giá trị $\text{cond}(\mathbf{A})$ với một số tham số p tăng dần.

Tham số p	$\text{Cond}(\mathbf{A})$
0.0001	16.4636
0.001	16.5061
0.002	16.5535
0.01	16.9396
0.1	22.2237
0.5	87.9049
1	502.0760
10	6.9739e+007
50	1.0562e+012
100	6.7487e+013
1000	1.0823e+017
10000	2.3447e+017

Hình 3. 19 điểm tán xạ phân bố trong miền $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : (x - \frac{1}{2})^2 + (y - \frac{1}{2})^2 \leq 1\}$



Ví dụ 4.2. Xét tập dữ liệu tán xạ gồm 19 điểm cho số liệu ở dạng xấp xỉ trong Bảng 4, phân bố trong miền Ω (xem Hình 3). Chúng tôi cũng thu được kết quả $\text{cond}(\mathbf{A})$ tăng khi tham số p tăng (xem Bảng 5).

Bảng 4. Tập dữ liệu với 19 điểm tán xạ

x_i	y_i
0.89568810134208	0.27170051896385
0.70161449108870	0.65006885656253
0.28928254917570	0.61376839841637
0.11218465047001	0.29479647814025
0.32972475729557	-0.07971594648984
0.72943779561232	-0.04201717262617
1.06806978804223	0.82711143002487
0.74380042139111	1.08426901333136
0.30022602799915	1.06412173434909
-0.10382038170413	0.85181659677916
-0.29816219638898	0.48824074034722
-0.27534327637098	0.09376702723970
-0.05661198341187	-0.26924464864837
0.26411713727159	-0.44791073542637
0.68399698704735	-0.47535490930642
1.10489110834067	-0.26420493943311
1.25914393242607	0.06919154374568
1.26680756611135	0.51350690100095
0.50000000000000	0.30000000000000

Bảng 5. Giá trị $\text{cond}(\mathbf{A})$ với một số tham số p tăng dần

Tham số p	Cond(\mathbf{A})
0.0001	86.8405
0.001	87.2538
0.002	87.7162
0.01	91.5355
0.1	153.7330
0.5	2.4660e+003
1	7.5089e+004
10	3.3506e+014
50	1.2007e+018
100	2.3599e+018
1000	3.3423e+018
10000	1.2452e+019

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] M. D. Buhmann, *Radial Basis Functions: Theory and Implementations*, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [2] W. F. Donoghue, *Monotone Matrix Function and Analytic Continuation*, Berlin Heidelberg New York, Springer-Verlag, 1974.
- [3] G. E. Fasshauer, *Meshfree Approximation Methods with MATLAB*, World Scientific Publishers, Singapore, 2007.
- [4] T. A. Foley, Near optimal parameter selection for multiquadric interpolation, *J. Appl. Sc. Comp.*, **1** (1994), 54-69.
- [5] R. Franke, Scattered data interpolation: tests of some methods, *Math. Comput.*, **48** (1982), 181-200. unit disc. *Numer. Math.*, **84**(2000), 451-474.
- [6] R. L. Hardy, Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces, *J. Geophys. Res.*, **76** (1971), 1905-1915.
- [7] R. L. Hardy, Theory and applications of the multiquadric-biharmonic method, *Comput. Math. Appl.*, **19** (1990), 163-208.
- [8] C.A. Micchelli, Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions, *Const. Approx.* , **2** (1986), 11-22.
- [9] M. J. D. Powell, Radial basis function approximations to polynomials, in *Numerical Analysis 1987 Proceedings*, D. F. Griffiths and G. A. Watson (eds.), Longman Scientific and Technical Essex, (1987), 223-241.
- [10] S. Rippa, An algorithm for selecting a good value for the parameter c in radial basis function interpolation, *Adv. Comput. Math.* **11** (1999), 193-210.
- [11] R. Schaback, Error estimates and condition numbers for radial basis function interpolation, *Adv. in Comput. Math.*, **3** (1995), 251-264.

- [12] R. Schaback, Native Hilbert spaces for radial basis functions I, in *New Developments in Approximation Theory*, M. W. Muller, M. D. Buhmann, D. H. Mache and M. Felten (eds.), Birkhauser, Basel, (1999), 255-282.
- [13] H. Wendland, *Scattered Data Approximation*, Cambridge University Press (2005).

Nhận bài ngày 21 - 12 - 2008