



*FACULTAD
DE
CIENCIAS*

APROXIMÁNDOSE CON RBF

(Approximating with RBF)

Trabajo de fin de Grado
para acceder al

GRADO EN MATEMÁTICAS

Autora: Marina Esgueva Ruiz

Directores: Luis Alberto Fernández Fernández y
Cecilia Pola Méndez

Junio-2016

Índice general

1.	Resumen	4
2.	Abstract	4
3.	Introducción	4
4.	Interpolación	5
4.1.	Problema de interpolación en dos variables	5
4.2.	Funciones de base radial (RBF)	7
4.3.	Experimentación numérica	13
4.4.	Algoritmo de Rippa para determinar el parámetro de forma óptimo . . .	26
4.5.	Elección de centros	30
5.	Aproximación	33
5.1.	Descomposición en valores singulares	34
5.2.	Elección de centros	35
6.	Aplicación industrial: aproximación de la temperatura en la placa de una cocina de gas	45
6.1.	Wok central	45
6.2.	Todos los quemadores	48
6.3.	Variación del número de nodos	50

1. Resumen

Uno de los problemas habituales que se presenta en el marco de la aproximación es el ajuste de datos arbitrariamente distribuidos en más de una dimensión. En este trabajo se estudiará el uso de las funciones de base radial (RBF) como herramienta para solucionar este problema cuando los datos están en \mathbb{R}^2 . En el marco de la interpolación, analizaremos la dificultad presente en el paso de una a varias variables y se introducirá la interpolación utilizando RBF para superar estas dificultades. Se estudiarán dos familias de RBF, así como sus propiedades teóricas y prácticas. Llevaremos a cabo distintos experimentos numéricos que pongan de manifiesto los factores que influyen en la calidad de la solución y en la elección del parámetro de forma óptimo. Se propondrá un algoritmo que determine la mejor distribución de los centros de las RBF para cada conjunto de datos. Por último, ya en el ámbito de la aproximación numérica, resolveremos un caso práctico, aproximando la temperatura de una placa de una cocina de gas a partir de ciertas medidas reales suministradas.

2. Abstract

Scattered multidimensional data fitting is one of the most common problems we face in approximation. In this work, radial basis functions (RBF) are proposed as a tool to solve this problem. We will point out the difficulties that arise with multivariate interpolation. RBF functions are introduced as a way to overcome these obstacles. Two different families of RBF are going to be studied as well as their theoretical and practical properties. We will expose the results of different numerical experiments which show the factors that affect the quality of the solution and the choice of the optimal shape parameter. Given a data set, an algorithm to determine the best distribution for the RBF centers is presented. Finally, we will use RBF approximation to determine the temperature of a gas stove plate using real measurements.

3. Introducción

En diferentes áreas científicas se plantea el siguiente problema: dado un conjunto de mediciones en un número finito de nodos, se busca obtener información del proceso estudiado en puntos diferentes a los dados, es decir, se busca una función que sea un buen ajuste de los datos dados y del proceso físico asociado a ellos. La búsqueda de esta función se puede llevar a cabo desde dos enfoques diferentes: el primero es la **interpolación**, en el que se busca una función que tome en los nodos los valores de las mediciones correspondientes; el segundo es la **aproximación**, donde se busca minimizar el error en el ajuste aunque la función aproximante no tome los valores de las medidas en cada nodo. Este segundo enfoque suele ser el más adecuado en la práctica, ya que las mediciones suelen estar afectadas por cierto error y no es razonable forzar al aproximante a tomar exactamente esos valores contaminados por ruido.

El uso de **funciones de base radial**, cuyas iniciales en inglés son **RBF**, proporciona una solución a este problema. Se trata de un método libre de malla, es decir, no necesita generar rejillas o triangulaciones en el dominio de los datos. Esta es una de las principales ventajas que presenta frente a otros métodos de aproximación tradicionales.

Las primeras aplicaciones de los métodos de aproximación libres de malla fueron la geodesia, la geofísica, la creación de mapas o la meteorología. Sin embargo, recientemente han surgido otras muchas aplicaciones como la resolución numérica de ecuaciones en derivadas parciales, la inteligencia artificial, teoría del aprendizaje, redes neuronales artificiales, procesado de imágenes y de señales, estadística u optimización.

En 1971, Rolland Hardy introdujo el método de las RBF multicuadráticas en sus trabajos de cartografía, ya que no estaba satisfecho con los resultados que le proporcionaba la interpolación polinomial. Su nuevo método podía ajustar datos distribuidos arbitrariamente. El método de RBF utilizado en la actualidad es una generalización del introducido por Hardy.

Este trabajo se centra en la resolución de problemas de interpolación y aproximación de datos arbitrariamente distribuidos en dos dimensiones utilizando RBF, con el objetivo de reconstruir funciones desconocidas a partir de ciertos datos conocidos. A lo largo del trabajo veremos que las RBF dependerán fuertemente del conjunto de los datos, a diferencia de las funciones utilizadas en los cursos básicos de cálculo numérico a nivel de grado.

Este trabajo está estructurado en tres secciones:

- La primera está dedicada a la interpolación e incluye un estudio teórico y práctico de las propiedades de las RBF y una validación del algoritmo introducido por Rippa en [7].
- La segunda sección se centra en la aproximación introduciendo la descomposición en valores singulares como herramienta para afrontar el mal condicionamiento de las matrices.
- En la tercera sección se presenta una aplicación industrial para aproximar la temperatura en placas de cocinas de gas. Los datos experimentales que utilizaremos han sido suministrados por la empresa BSH Electrodomésticos España S.A., localizada en Santander, a quien agradecemos su colaboración.

En todas las secciones se presenta una selección de los resultados numéricos obtenidos con códigos propios desarrollados en MATLAB.

4. Interpolación

4.1. Problema de interpolación en dos variables

Dados los puntos $p_i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$ con $i = 1, \dots, N$ tales que $p_i \neq p_j$ si $i \neq j$ y el vector $f = (f_1, \dots, f_N) \in \mathbb{R}^N$, el problema de interpolación consiste en encontrar una función S , tal que

$S(p_i) = f_i \forall i = 1, \dots, N$. A los puntos p_i se les llama **nodos de interpolación**.

Si la función S es una combinación lineal de unas determinadas funciones básicas B_k conocidas:

$$S(x, y) = \sum_{k=1}^N \alpha_k B_k(x, y),$$

este problema es equivalente a resolver el sistema de ecuaciones lineales:

$$A\alpha = f, \tag{4.1}$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} B_1(p_1) & \dots & B_N(p_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ B_1(p_N) & \dots & B_N(p_N) \end{pmatrix}.$$

Llamamos **matriz de interpolación** a la matriz A . El siguiente resultado es bien conocido.

Proposición 1. *El problema tiene una única solución si y sólo si la matriz A es inversible.*

Comenzamos recordando lo que ocurre en el caso de interpolación en una dimensión donde se garantiza la existencia de solución del problema de interpolación para cualquier conjunto de nodos en \mathbb{R} utilizando polinomios como funciones básicas.

Teorema 1 (Interpolación polinomial en una variable [4]). *Si x_1, x_2, \dots, x_N son números reales distintos, entonces para valores arbitrarios f_1, \dots, f_N existe un único polinomio S de grado a lo sumo $N - 1$ de manera que:*

$$S(x_i) = f_i, \quad 1 \leq i \leq N.$$

Demostración. Si $S(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \dots + \alpha_N x^{N-1}$, encontrar este polinomio es equivalente a resolver el siguiente sistema:

$$\begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_N & \dots & x_N^{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix}.$$

La matriz asociada a este sistema es una matriz de Vandermonde y, como los nodos x_1, \dots, x_N son distintos, podemos garantizar que esta matriz es inversible y por lo tanto existe una única solución al problema de interpolación. \square

Podríamos intentar usar también polinomios para resolver el problema de interpolación en dos variables. Sin embargo, las funciones polinómicas no garantizan la existencia de solución para cualquier conjunto de nodos en \mathbb{R}^2 . De hecho, resulta muy sorprendente que no exista ninguna familia de funciones continuas que garantice la existencia de solución.

Teorema 2. (Haar 1918 [4]) Ningún subespacio de $\mathcal{C}(\mathbb{R}^2)$ de dimensión N sirve para interpolar conjuntos arbitrarios de N nodos.

Demostración. Dadas N funciones $B_1, B_2, \dots, B_N \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^2)$ y N nodos $p_1, \dots, p_N \in \mathbb{R}^2$, si queremos interpolar en estos nodos utilizando las funciones base B_i tendremos que resolver un sistema lineal cuyo determinante es:

$$D(p_1, \dots, p_N) = \begin{vmatrix} B_1(p_1) & B_2(p_1) & \dots & B_N(p_1) \\ B_1(p_2) & B_2(p_2) & \dots & B_N(p_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_1(p_N) & B_2(p_N) & \dots & B_N(p_N) \end{vmatrix}.$$

Aunque el determinante sea distinto de 0 para el conjunto de nodos podemos someter a los dos primeros nodos a un desplazamiento continuo en \mathbb{R}^2 , de modo que durante este movimiento los puntos nunca coincidan ni entre ellos ni con los otros nodos y que al final del desplazamiento hayan intercambiado sus posiciones originales. De esta forma las dos primeras filas del determinante se habrán intercambiado y el determinante habrá cambiado de signo. Por tanto, como D es una función continua, habrá tomado el valor cero en algún punto y, por lo tanto, habrá algún conjunto de nodos para el que no se puede garantizar que el problema de interpolación tenga solución. \square

A diferencia de lo que sucede en el plano, en \mathbb{R} no se pueden intercambiar dos nodos de forma continua sin que coincidan en algún punto. Esto explica que la interpolación en más de una dimensión no se puede abordar de la misma forma que en \mathbb{R} . Por tanto, cuando queremos interpolar datos arbitrarios en más de una dimensión, no podemos fijar de antemano la base de funciones que se va a utilizar. La elección de funciones interpolantes debe tener en cuenta el conjunto de nodos con el que se trabaja.

4.2. Funciones de base radial (RBF)

Definición 1. Dada $\phi : \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}$. Se dice que ϕ es una **función de base radial** (o RBF) si existe una función $\varphi : [0, \infty) \mapsto \mathbb{R}$ tal que

$$\phi(x) = \varphi(r) \text{ donde } r = \|x\|,$$

y $\|\cdot\|$ es cualquier norma en \mathbb{R}^2 .

Con el objetivo de tener más flexibilidad en las RBF, se introduce un parámetro, $\epsilon > 0$, conocido como **parámetro de forma**. Definimos

$$\varphi_\epsilon(r) = \varphi(\epsilon r).$$

La función interpolante utilizando RBF tiene la siguiente forma:

$$S_\epsilon(x, y) = \sum_{k=1}^N \alpha_k \varphi_\epsilon(\|(x, y) - c_k\|), \quad (4.2)$$

donde $\{c_1, \dots, c_N\}$, $c_i \in \mathbb{R}^2$, es el conjunto de **centros de las funciones RBF**, $\epsilon \in \mathbb{R}$ es el parámetro de forma y los coeficientes de la aproximación, $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)^T$, verifican el siguiente sistema:

$$A\alpha = f,$$

donde

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_\epsilon(\|p_1 - c_1\|) & \dots & \varphi_\epsilon(\|p_1 - c_N\|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_\epsilon(\|p_N - c_1\|) & \dots & \varphi_\epsilon(\|p_N - c_N\|) \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Las funciones básicas del interpolante no están fijadas de antemano, sino que dependerán del conjunto de centros y del parámetro de forma elegidos. El conjunto de datos del que se dispone influirá en esta elección. A lo largo de este trabajo veremos que se pueden tomar los centros de las RBF en los nodos o escoger otros centros diferentes, que pueden estar tanto en el dominio de la función a interpolar como fuera de él. En secciones posteriores se estudiará el efecto de la disposición de los centros en la calidad de la aproximación.

Algunas familias de RBF

Aunque existen muchas familias diferentes de RBF (ver [3]), en este trabajo se utilizarán las siguientes:

- Funciones gaussianas: $\varphi_\epsilon(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$.
- Funciones multicuadráticas inversas: $\varphi_\epsilon(r) = \frac{1}{\sqrt{1+(\epsilon r)^2}}$.

Si la matriz de interpolación es simétrica y definida positiva entonces está garantizada la existencia y unicidad de solución del problema. Además, esta condición permite el uso de la factorización de Cholesky para la resolución del problema, que es un método más eficiente y más estable que la eliminación gaussiana. Si se toman los centros de las RBF en los nodos, la matriz de interpolación será simétrica. Además, si se utilizan las funciones gaussianas o las multicuadráticas inversas, se puede garantizar que las matrices de interpolación serán definidas positivas, como se probará en el Teorema 3 .

La principal ventaja de las funciones gaussianas es que en la práctica casi tienen soporte compacto porque a distancias de su centro mayores que $\frac{6}{\epsilon}$ toman valores cercanos a cero. Por lo tanto, computacionalmente dan lugar a matrices de interpolación con muchos coeficientes nulos. Sin embargo, las matrices de interpolación asociadas a funciones multicuadráticas inversas son densas (ver [1]). Una introducción práctica a las RBF se puede encontrar en [8].

Matrices de interpolación con RBF

Teorema 3. Si $\varphi_\epsilon(r) = e^{-(\epsilon r)^2}$ o $\varphi_\epsilon(r) = \frac{1}{\sqrt{1+(\epsilon r)^2}}$, entonces la matriz de interpolación A es definida positiva, donde A es la matriz definida en (4.3) tomando $c_i = p_i$, $\forall i \in \{1, \dots, N\}$.

Demostración. A partir de ahora, podemos suponer sin pérdida de generalidad $\epsilon = 1$. Consideramos la matriz de interpolación $A = (a_{jk})_{j,k=1,\dots,N}$ donde $a_{jk} = \varphi(\|p_j - p_k\|)$.

A es definida positiva si y sólo si se verifican las siguientes condiciones:

1. $\sum_{j,k=1}^N d_j d_k a_{jk} \geq 0$, $\forall (d_1, \dots, d_N) \in \mathbb{R}^N$.
2. $\sum_{j,k=1}^N d_j d_k a_{jk} = 0 \Leftrightarrow (d_1, \dots, d_N) = (0, \dots, 0)$.

Para demostrar la primera condición utilizaremos un argumento de [9] con transformadas integrales, mientras que para probar la segunda usaremos un argumento propio.

Distinguiremos dos casos:

- Caso 1: $\varphi(r) = e^{-r^2}$

$$\sum_{j,k=1}^N d_j d_k a_{jk} \geq 0 \Leftrightarrow \sum_{j,k=1}^N d_j d_k e^{-(x_j - x_k)^2 - (y_j - y_k)^2} \geq 0. \quad (4.4)$$

Utilizando la transformada de Fourier $\mathcal{F}(f)(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ix\xi} dx$, sabemos que $\mathcal{F}(e^{-x^2})(\xi) = \sqrt{\pi} e^{-\frac{\xi^2}{4}}$. Aplicando ahora la transformada inversa de Fourier:

$$e^{-x^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} e^{-\frac{\xi^2}{4}} e^{ix\xi} d\xi, \quad e^{-y^2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\pi} e^{-\frac{z^2}{4}} e^{iyz} dz.$$

Por tanto, multiplicando ambas expresiones

$$e^{-x^2 - y^2} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{z^2 + \xi^2}{4}} e^{i(x\xi + yz)} d\xi dz$$

y

$$\begin{aligned} \sum_{j,k=1}^N d_j d_k a_{jk} &= \frac{1}{4\pi} \sum_{j,i=1}^N d_j d_k \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{z^2 + \xi^2}{4}} e^{i[(x_j - x_k)\xi + (y_j - y_k)z]} d\xi dz = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{z^2 + \xi^2}{4}} \sum_{j,i=1}^N d_j d_k e^{i[(x_j - x_k)\xi + (y_j - y_k)z]} d\xi dz. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Notando ahora que

$$\sum_{j,k=1}^N d_j d_k e^{i(x_j \xi + y_j z)} e^{-i(x_k \xi + y_k z)} = \left| \sum_{j=1}^N d_j e^{i(x_j \xi + y_j z)} \right|^2 \geq 0, \quad (4.6)$$

queda probado 1.

Falta probar que se cumple 2. Por (4.6) y (4.5),

$$\sum_{j,k=1}^N d_j d_k a_{jk} = 0 \Leftrightarrow \sum_{j=1}^N d_j e^{i(x_j \xi + y_j z)} = 0, \quad \forall \xi, z \in \mathbb{R}. \quad (4.7)$$

Aplicando la transformada inversa de Fourier:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{-1} \left(\sum_{j=1}^N d_j e^{i(x_j \xi + y_j z)} \right) (x, y) = 0 &\Leftrightarrow \sum_{j=1}^N d_j \mathcal{F}^{-1}(e^{i(x_j \xi + y_j z)})(x, y) = 0 \Leftrightarrow \\ &\sum_{j=1}^N d_j \delta(x - x_j, y - y_j) = 0, \end{aligned}$$

donde $\delta(x - x_j, y - y_j)$ es la delta de Dirac concentrada en el punto (x_j, y_j) .

Fijando $j \in \{1, \dots, N\}$ podemos definir una función continua $\psi \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^2)$ de soporte compacto en un entorno de (x_j, y_j) que no contenga al resto de puntos $(x_k, y_k) \forall k \in \{1, \dots, j-1, j+1, \dots, N\}$ y tal que $\psi(x_j, y_j) = 1$, obteniendo

$$0 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^N d_j \delta(x - x_j, y - y_j) \psi(x, y) dx dy = d_j \psi(x_j, y_j) \Rightarrow d_j = 0.$$

▪ Caso 2: $\varphi(r) = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}}$

Utilizando la transformada de Laplace, sabemos que

$$\frac{1}{\sqrt{1+s}} = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad \text{con } f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-t}.$$

Queremos probar que se cumple

$$\sum_{j,k=1}^N d_j d_k \frac{1}{\sqrt{1 + (x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2}} \geq 0.$$

Usando la expresión anterior,

$$\begin{aligned} \sum_{j,k=1}^N d_j d_k \frac{1}{\sqrt{1 + (x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2}} &= \sum_{j,k=1}^N d_j d_k \int_0^{\infty} e^{-t[(x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2]} f(t) dt = \\ &\int_0^{\infty} \underbrace{f(t)}_{>0} \left[\sum_{j,k=1}^N d_j d_k e^{-t[(x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2]} \right] dt. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Por (4.8) basta probar que $\sum_{j,k=1}^N d_j d_k e^{-t[(x_j-x_k)^2+(y_j-y_k)^2]} \geq 0, \quad \forall t \geq 0$. La demostración es equivalente a la prueba de (4.4) (en este caso se había tomado $t = 1$). Falta probar que se cumple la condición 2.

$$\sum_{j,k=1}^N d_j d_k a_{jk} = 0 \Leftrightarrow (d_1, \dots, d_N) = (0, \dots, 0).$$

En este caso,

$$\begin{aligned} \sum_{j,k=1}^N d_j d_k \frac{1}{\sqrt{1+(x_j-x_k)^2+(y_j-y_k)^2}} = 0 &\Leftrightarrow \\ \sum_{j,k=1}^N d_j d_k \int_0^\infty f(t) e^{-t[(x_j-x_k)^2+(y_j-y_k)^2]} dt = 0 &\Leftrightarrow \\ \int_0^\infty \underbrace{f(t)}_{>0} \underbrace{\sum_{j,k=1}^N d_j d_k e^{-t[(x_j-x_k)^2+(y_j-y_k)^2]}}_{\geq 0} dt = 0 &\Leftrightarrow \sum_{j,k=1}^N d_j d_k e^{-t[(x_j-x_k)^2+(y_j-y_k)^2]} = 0, \quad \forall t. \end{aligned}$$

Esta demostración es equivalente a la de (4.7) (en este caso se había tomado $t = 1$).

□

Observación 1. Esta demostración se puede extender fácilmente a funciones de la forma $\varphi(r) = \frac{1}{(1+r^2)^\beta}$ con $\beta \in (0, 1]$.

Observación 2. Podríamos pensar que cualquier matriz simétrica con unos en la diagonal y el resto de los coeficientes con valores entre 0 y 1 es definida positiva. Sin embargo, es fácil encontrar contraejemplos: la matriz

$$\begin{pmatrix} 1 & 0.1 & 0.75 \\ 0.1 & 1 & 0.8 \\ 0.75 & 0.8 & 1 \end{pmatrix}$$

no es definida positiva.

Parámetro de forma

El valor del interpolante en un punto depende principalmente de los valores que tomen las funciones básicas en los centros cercanos a ese punto. Llamando esfera de influencia a los puntos cuya distancia al centro de la RBF sea menor que $\frac{1}{\epsilon}$, se intuye que la calidad de la aproximación será mayor con valores pequeños de ϵ ya que las esferas de influencia serán más grandes, por lo que más datos influirán en el valor de la aproximación. Sin embargo, valores muy pequeños de

ϵ dan lugar a matrices de interpolación mal condicionadas. En este caso, el error que afecta al cálculo de los coeficientes del aproximante obtenidos como solución de (4.1) puede ser grande. Por lo tanto, el parámetro de forma debería ser lo suficientemente pequeño como para garantizar la buena calidad de la aproximación, pero sin perder de vista el aumento del condicionamiento de la matriz.

A continuación introducimos dos definiciones (ver [3]).

Definición 2. Se define la *distancia de llenado* como $h = \sup_{p \in \Omega} \min_{p_j \in \mathcal{X}} \|p - p_j\|_2$, donde \mathcal{X} es el conjunto de nodos y Ω es el dominio en el que se encuentran estos nodos.

Geoméricamente, esta distancia se puede entender como el radio de la mayor circunferencia que se puede situar en Ω entre los datos.

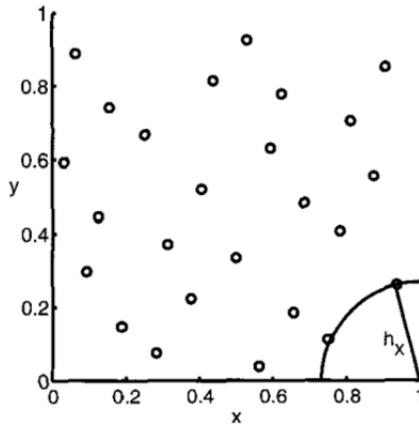


Figura 1: Distancia de llenado de un conjunto de nodos (ver [3]).

Definición 3. Se define la *distancia de separación de los centros* como $q = \frac{1}{2} \min_{i \neq j} \|p_i - p_j\|_2$.

Esta distancia de separación se puede entender como el radio de la mayor circunferencia que se puede centrar en cada dato sin que dos de ellas se solapen.

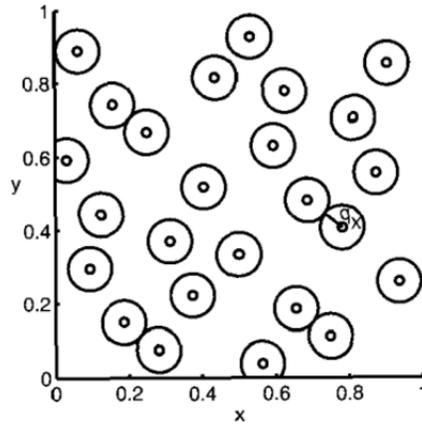


Figura 2: Distancia de separación de un conjunto de centros (ver [3]).

A continuación se establecen ciertas cotas para el condicionamiento (ver [3]). Como las matrices de interpolación con las que trabajamos son definidas positivas, usando la norma $\|\cdot\|_2$, sabemos que $cond(A) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$ donde λ_{max} y λ_{min} son el mayor y menor valor propio de la matriz respectivamente. Podemos establecer una cota superior para el mayor valor propio: $\lambda_{max} \leq N$, siendo N el número de nodos, por lo que un mal condicionamiento de la matriz será debido a la existencia de valores propios muy pequeños. Por ello es importante obtener cotas inferiores para λ_{min} en función de la disposición de los centros y del parámetro de forma. La obtención de estas cotas es muy técnica y han sido tomadas de [3]. Además varían según la familia concreta de RBF.

- Gaussianas: $\lambda_{min} \geq C(\sqrt{2}\epsilon)^{-2} e^{-162.84/(q\epsilon)^2} q^{-2}$, donde $M = 12 \left(\frac{\pi}{9}\right)^{1/3}$ y $C = \frac{M^2}{16}$.
- Multicuadrática inversa: $\lambda_{min} \geq K(\epsilon)q\epsilon^{-2M/(q\epsilon)}$, donde $K(\epsilon)$ es otra constante conocida.

El **principio de incertidumbre** afirma que es imposible construir bases de RBF que garanticen a la vez estabilidad y precisión en el ajuste (ver [8]). A medida que aumentamos el número de datos, disminuye la distancia de llenado y, con ella, el error de la aproximación. Sin embargo, también decrece la distancia de separación, lo que hace que el condicionamiento de la matriz crezca exponencialmente. De forma similar, si variamos el parámetro de forma ϵ para garantizar la buena calidad del ajuste, también crecerá el condicionamiento del problema. En los experimentos numéricos posteriores se pondrá de manifiesto este principio de incertidumbre

4.3. Experimentación numérica

En estos primeros experimentos se utiliza la interpolación mediante RBF para aproximar funciones. Denotamos las funciones test por F_i . Están definidas en $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ y toman valores reales. Se han tomado de [7] y [6] y se utilizan frecuentemente en experimentos numéricos involucrando RBF. Las funciones F_1 y F_2 son conocidas como funciones de Franke. En una primera

etapa la lectura de los valores de la función es exacta, es decir, las medidas no se ven afectadas por ningún ruido. Se comprueba que la calidad del interpolante depende del número y de la distribución de los nodos y de los centros, así como de la elección del tipo de RBF y del parámetro de forma. En estos experimentos queda patente el principio de incertidumbre previamente comentado.

Se va a determinar cuál es el parámetro ϵ que minimiza el error cometido en la aproximación para un determinado tipo de RBF y para una distribución concreta de nodos y centros. Para ello, elegimos K puntos distribuidos en una rejilla uniforme en Ω , $\{(x_i, y_i)\}_{i=1, \dots, K}$, y resolvemos el siguiente problema:

$$\min_{\epsilon \in (0,10)} ECM(\epsilon) \quad (4.9)$$

donde

$$ECM(\epsilon) = \sqrt{\frac{1}{K} \sum_{j=1}^K [S_\epsilon(x_j, y_j) - F_i(x_j, y_j)]^2} \quad (4.10)$$

es el error cuadrático medio asociado a dichos puntos. En estos experimentos se ha tomado $K = 441$.

Las funciones test utilizadas durante los experimentos son las siguientes:

- Función $F_0(x, y) = x \text{sen}^2(x) e^{-y^2}$ (ver [6])

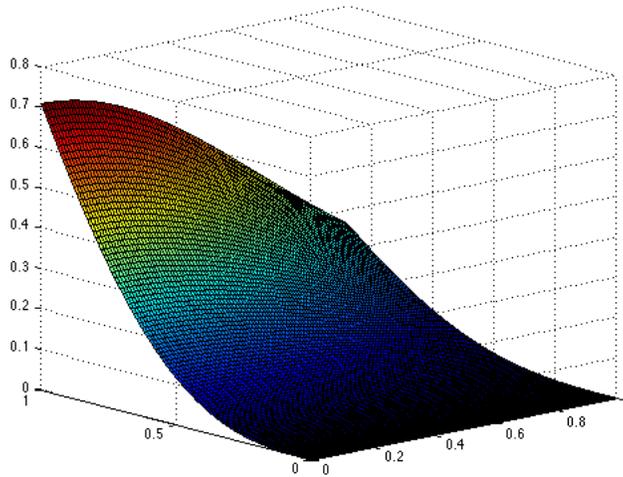
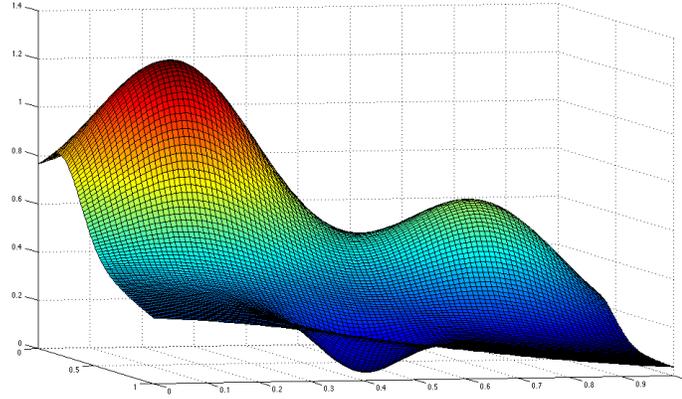
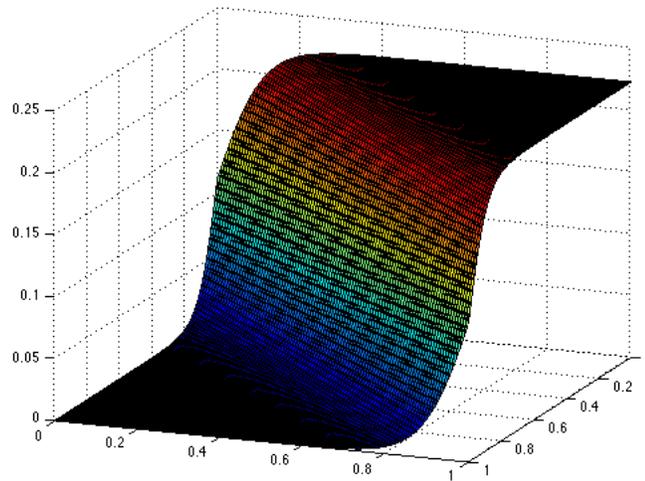


Figura 3: F_0

- Función $F_1(x, y) = \frac{3}{4}e^{-\frac{(9x-2)^2+(9y-2)^2}{4}} + \frac{3}{4}e^{-\frac{(9x+1)^2}{49} - \frac{9y+1}{10}} + \frac{1}{2}e^{-\frac{(9x-7)^2+(9y-3)^2}{4}} - \frac{1}{5}e^{-(9x-4)^2-(9y-7)^2}$ (ver [7])

Figura 4: F_1

- Función $F_2(x, y) = \frac{\tanh(9y-9x)+1}{9}$ (ver [7]).

Figura 5: F_2

Cada una de estas funciones presenta características muy diferenciadas. La función F_0 es muy suave, F_1 tiene dos máximos y un mínimo y F_2 presenta una caída brusca en la diagonal principal. Observaremos cómo se comporta el ajuste ante las diferentes características que presente la función a interpolar.

Nodos distribuidos de forma aleatoria en el dominio

En las primeras pruebas se toman 121 nodos y 121 centros. Los nodos se distribuyen aleatoriamente en el dominio y se consideran los centros en una rejilla uniforme.

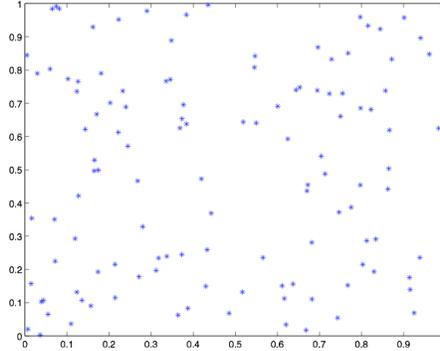


Figura 6: Distribución de los nodos

Para hallar el parámetro de forma, ϵ que minimiza el ECM hemos utilizado el optimizador de Matlab “fminbnd”. Cuando las gráficas del ECM presentan grandes oscilaciones (ver figura 7) la solución proporcionada por el optimizador no siempre es satisfactoria. Los valores óptimos calculados por fminbnd están siempre fuera de la zona de oscilaciones de la gráfica.

Las siguientes tablas contienen un resumen de los resultados obtenidos. Los resultados en rojo se corresponden con soluciones no satisfactorias tras la optimización con “fminbnd”.

Tabla 1: Centros y nodos diferentes. $N=121$.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	7.64	3.86e6	8.17	2.31	8.01e10	4.07e-1
F_1	8.21	1.53e6	3.49e1	3.39	6.24e8	1.76e1
F_2	6.26	1.60e8	7.08e1	3.84	1.88e8	5.9832

Tabla 2: Centros y nodos iguales. $N=121$.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	1.03	2.68e18	4.00e-7	0.49	2.34e18	5.84e-7
F_1	5.34	4.91e7	4.87e-3	3.29	1.83e8	2.75e-3
F_2	5.91	7.83e6	5.82e-3	4.39	7.25e6	2.48e-3

De ahora en adelante, todas las gráficas del ECM o del condicionamiento en función del parámetro de forma están en escala semilogarítmica en el eje vertical.

Se observa que la calidad del ajuste es mayor cuando se toman los centros de las RBF en los nodos. En este caso no hay grandes diferencias entre usar las funciones gaussianas o las multicuadráticas inversas. Cuando se toman centros de las RBF diferentes a los nodos es difícil determinar numéricamente el parámetro ϵ que minimiza el ECM. Esto se debe a que las gráficas del ECM en torno al verdadero mínimo presentan grandes oscilaciones como muestra la figura 7.

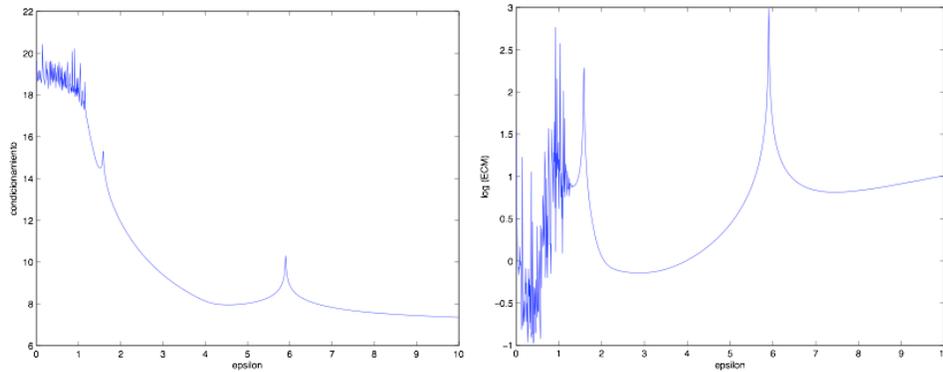


Figura 7: $\text{Cond}(A)$ y ECM frente a ϵ . F1 con multicuadrática inversa. Centros y nodos diferentes.

En cambio cuando tomamos los centros en los nodos, las gráficas tienen menos oscilaciones en torno al valor óptimo de ϵ por lo que podemos determinarlo numéricamente, como observamos en la figura 8.

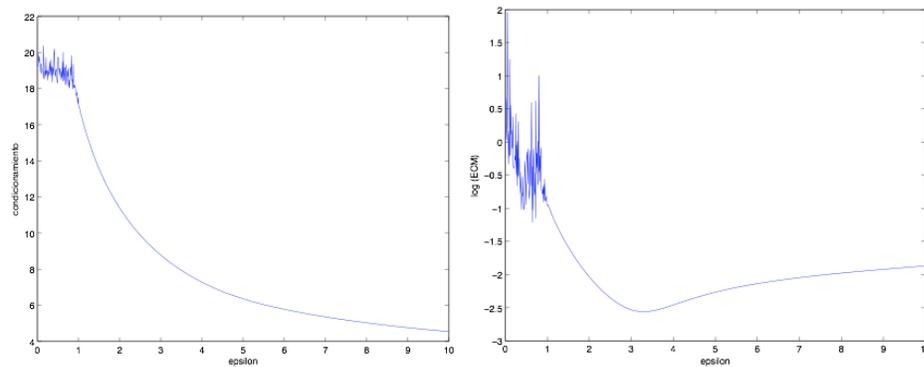


Figura 8: $\text{Cond}(A)$ y ECM frente a ϵ . F1 con multicuadrática inversa. Centros y nodos iguales.

Además se comprueba que el condicionamiento de las matrices de interpolación disminuye a medida que aumenta el valor de ϵ como muestran las figuras 7 y 8. Por último, cabe destacar que el parámetro de forma óptimo varía con la familia de RBF elegida y con la función F_i .

Si se presta atención a la disposición de los nodos en el dominio (ver figura 6) se observa que no están distribuidos de manera uniforme. Hay datos muy cercanos entre sí y zonas del dominio en las que apenas hay datos. La cercanía entre los nodos puede ser uno de los motivos del mal condicionamiento del problema y por tanto de la inestabilidad del error.

Redistribución de los nodos anteriores

En el este experimento se tomará un conjunto de nodos que cubran el dominio de forma más uniforme.

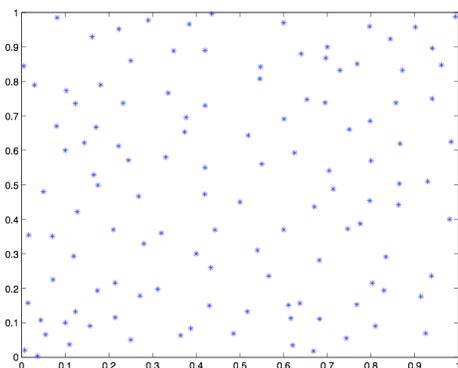


Figura 9: Nodos redistribuidos.

Repetimos los experimentos anteriores con el nuevo conjunto de nodos. Primero se realiza la interpolación tomando los centros de las RBF en una rejilla uniforme y posteriormente, tomando los centros en los nodos. Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 3: Centros y nodos diferentes. N=121.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	2.19	3.01e17	2.42e-3	5.29	3.17e8	6.57e-2
F_1	4.71	8.94e9	1.33e-1	8.27	1.16e7	1.09
F_2	5.37	6.58e8	7.74	7.74	1.372e7	1.16

Tabla 4: Centros y nodos iguales. N=121.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	0.72	1.01e19	2.82e-8	0.42	4.50e18	4.86e-7
F_1	4.93	4.31e6	2.52e-3	2.7	8.25e7	1.59e-3
F_2	5.65	3.89e5	5.19e-3	4.51	4.59e5	2.07e-3

Al igual que observábamos en las tablas 1 y 2, hacemos notar que si los centros son diferentes a los nodos, el parámetro de forma óptimo obtenido numéricamente no es el mínimo global de la función. Además, el ECM sigue siendo mayor en el caso en el que tomamos los centros distintos a los nodos. Al comparar las tablas 3 y 4 con las tablas 1 y 2, se observa que aunque se reduce el ECM, no hay diferencias significativas cuando tomamos los centros de las RBF diferentes a los nodos. Sí hay mejora entre los errores cuando los centros están en los nodos. El condicionamiento de las matrices de interpolación mejora con la redistribución de los nodos en el caso en el que centros y nodos son iguales. En conclusión, la redistribución más uniforme de los datos en el dominio aporta mejoras siempre que los centros de las RBF se tomen en los nodos.

Por otro lado, cabe destacar que el parámetro de forma óptimo ha cambiado al redistribuir los nodos en el dominio.

En vista de estos resultados parece más adecuado tomar los centros de las RBF en los nodos ya que presentan una mayor calidad en el ajuste. Además las gráficas del ECM tienen menos oscilaciones por lo que es más fácil determinar numéricamente el parámetro de forma óptimo.

Medidas con ruido

En esta sección repetimos los experimentos anteriores introduciendo ruido en las medidas de la función. En los casos prácticos, esta es la situación más habitual, ya que los datos suelen estar afectados por errores de medida. Con los mismos nodos que en la figura 9 y los centros de las RBF en una rejilla uniforme, perturbamos los valores de la función test de la siguiente forma: $\bar{f} = (1 + \delta)f$ donde $\delta \in (-0.03, 0.03)$ es un parámetro que indica el nivel de ruido, en este caso un 3%. Los resultados obtenidos son los siguientes:

Tabla 5: Medidas con ruido. Centros y nodos diferentes. $N = 121$.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	2.13	4.14e17	5.89	6.97	2.08e7	2.03
F_1	2.98	2.34e16	1.26e1	7.64	1.43e7	1.31e1
F_2	2.95	3.51e16	2.84e1	7.35	1.64e7	3.43

Tabla 6: Medidas con ruido. Centros y nodos iguales. $N = 121$.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	5.29	1.19e6	1.54e-2	3.91	1.61e6	1.54e-2
F_1	5.29	7.90e3	2.1e-2	5.28	7.90	1.40e-2
F_2	6.82	2.45e6	7.71e-3	5.60	8.53e8	4.07e-3

Al introducir ruido en las medidas, como era de esperar, el ECM aumenta con respecto al de las tablas 3 y 4. Este aumento es mayor para la función F_0 que para F_1 y F_2 . De la misma forma que en los experimentos anteriores, sigue siendo conveniente tomar los centros de las RBF en los nodos ya que el error es menor y es más fácil determinar el parámetro de forma óptimo. Por otra parte, el error es menor cuando utilizamos las RBF multicuadráticas inversas.

En conclusión, la introducción de ruido en las medidas empeora la precisión del ajuste aunque obtenemos interpolantes de una calidad aceptable en el caso en el que se tomen centros de las RBF igual a los nodos.

Variación del número de nodos

Hasta ahora se han realizado todos los experimentos con el mismo número de nodos. Se ha estudiado la influencia de la distribución de los datos en el dominio, de la introducción del ruido y del parámetro de forma. En el siguiente experimento se variará el número de nodos para estudiar su repercusión en la calidad de la aproximación y en el parámetro de forma óptimo solución de (4.9).

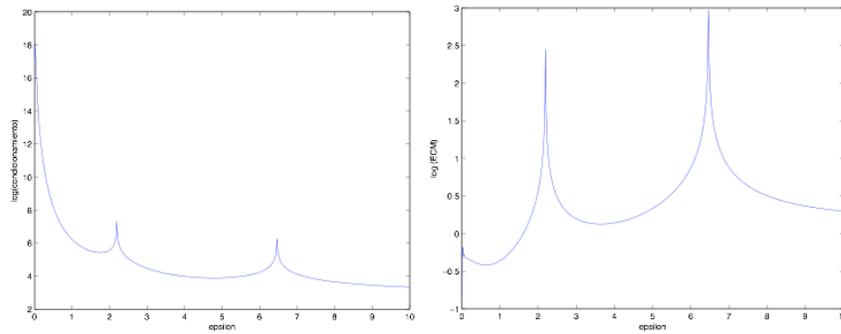
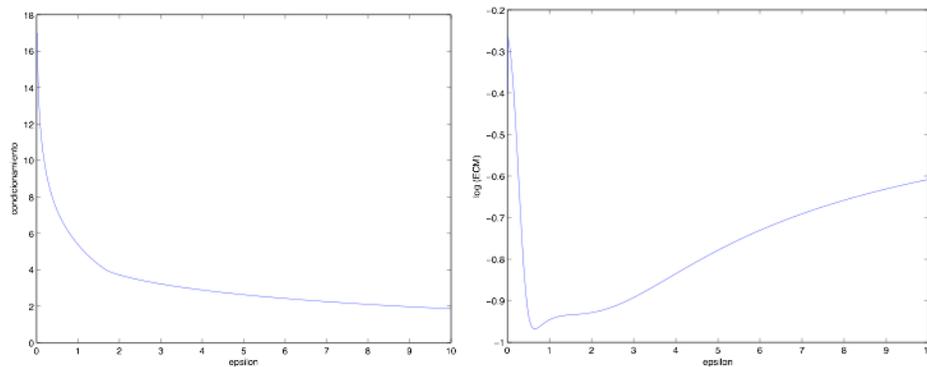
Tabla 7: Centros y nodos diferentes. $N = 10$.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	3.45	3.67e3	4.45e-1	2.83	4.26e4	1.38e-1
F_1	1.28	2.52e7	6.87e-1	3.64	1.27e4	1.34
F_2	2.51	3.57	2.24	2.52	1.04e5	1.26e-1

Tabla 8: Centros y nodos iguales. $N = 10$.

Función test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	ECM	ϵ óptimo	cond(A)	ECM
F_0	0.51	4.55e7	5.66e-3	0.25	1.17e9	5.47e3
F_1	1.86	7.57e3	9.67e-2	0.65	3.40	1.08e-1
F_2	3.24	3.64e2	5.23e-2	3.44	1.15e3	4.05e-2

Si comparamos las figuras 10 y 11 con las figuras 7 y 8, observamos que al disminuir el número de nodos el condicionamiento y el ECM son más estables.

Figura 10: Cond(A) y ECM frente a ϵ . F_1 con multicuadrática inversa. Centros y nodos diferentes.Figura 11: Cond(A) y ECM frente a ϵ . F_1 con multicuadrática inversa. Centros iguales a nodos.

En cuanto al condicionamiento de la matriz del problema, comprobamos que disminuye al reducir el número de datos (comparar con las tablas 3 y 4). Sin embargo, el ECM ha aumentado. Esto se debe al principio de incertidumbre previamente comentado. Además el valor del parámetro de forma óptimo disminuye.

Si aumentamos el número de nodos a 1024 obtenemos los resultados de la tabla 9.

Si tomamos los centros de las RBF diferentes a los nodos, el condicionamiento de las matrices es mayor que 10^{20} y el ECM es mayor que 1, por lo que no se presentarán los resultados obtenidos. Si tomamos los nodos como centros obtenemos los siguientes resultados:

Tabla 9: Nodos y centros iguales. $N = 1024$.

Función test	Gaussiana		
	ϵ óptimo	condicionamiento	ECM
F_0	1.8	$1.e20$	$2.e - 8$
F_1	6	$1.e20$	$1.e - 6$

El condicionamiento de las matrices de interpolación es mayor que en la tabla 4, aunque se observa una reducción del ECM. En este caso observamos que el parámetro de forma óptimo con 1021 nodos es mayor que el óptimo en el caso de 121 nodos.

Distribución del error

Las siguientes gráficas recogen la distribución del error relativo cometido en la aproximación para la función test F_1 . Hemos tomado los centros en los nodos. El parámetro ϵ utilizado no siempre es el que aparece en las tablas.

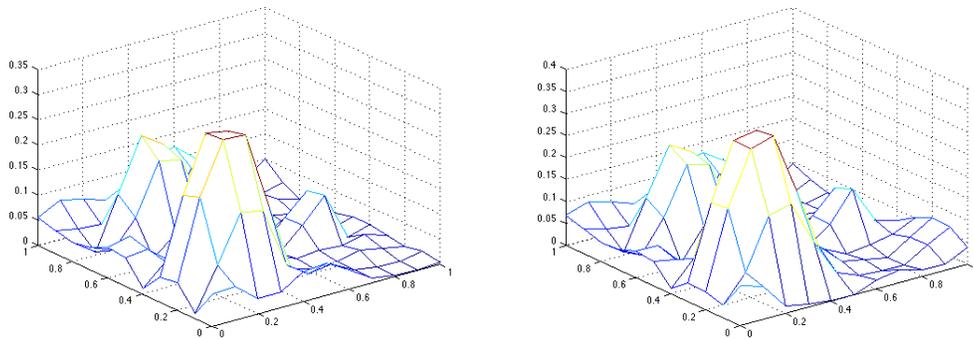


Figura 12: Distribución del error relativo para F_1 con gaussianas. $N = 10$. Izquierda: $\epsilon = 2$ y medidas sin ruido. Derecha: $\epsilon = 2$ y medidas con ruido.

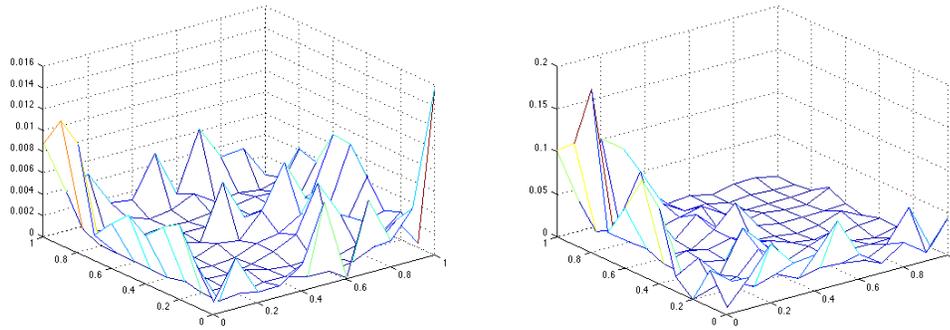


Figura 13: Distribución del error relativo para F_1 con gaussianas. $N = 121$. Izquierda: $\epsilon = 5$ y medidas sin ruido. Derecha: $\epsilon = 5.71$ y medidas con ruido.

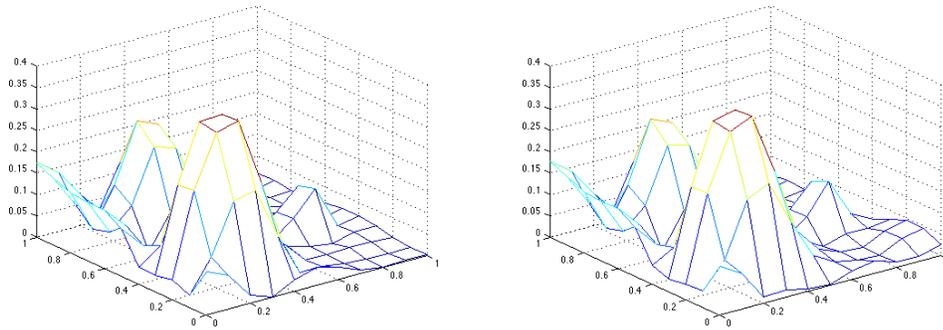


Figura 14: Distribución del error relativo para F_1 con multicuadrática inversa. $N = 10$. Izquierda: $\epsilon = 2.5$ y medidas sin ruido. Derecha: $\epsilon = 2.5$ y medidas con ruido.

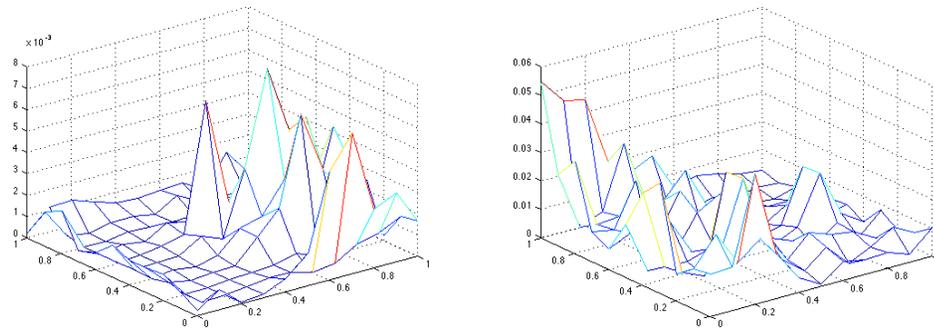


Figura 15: Distribución del error relativo para F_1 con multicuadrática inversa. $N = 121$. Izquierda: $\epsilon = 2.5$ y medidas sin ruido. Derecha: $\epsilon = 7.95$ y medidas con ruido.

Para $N = 121$ el mayor error relativo se acumula en la frontera y para $N = 10$ en las zonas donde se encuentran los extremos relativos de la función. Como solución al primer problema se puede considerar la inclusión de centros en la frontera del dominio o incluso tomarlos fuera del dominio de la función. Además se pueden colocar más centros en las zonas en que la función cambie de forma más brusca.

También se observa que el error disminuye al aumentar el número de nodos y aumenta al introducir ruido en las medidas. Por otra parte el error es menor al utilizar RBF multicuadráticas inversas en el caso $N = 121$.

Funciones recuperadas

A continuación, presentamos los interpolantes de las funciones test utilizadas durante los experimentos anteriores. Se toman los centros en los nodos y RBF multicuadráticas inversas. El parámetro de forma utilizado en cada caso es el óptimo obtenido en los experimentos anteriores.

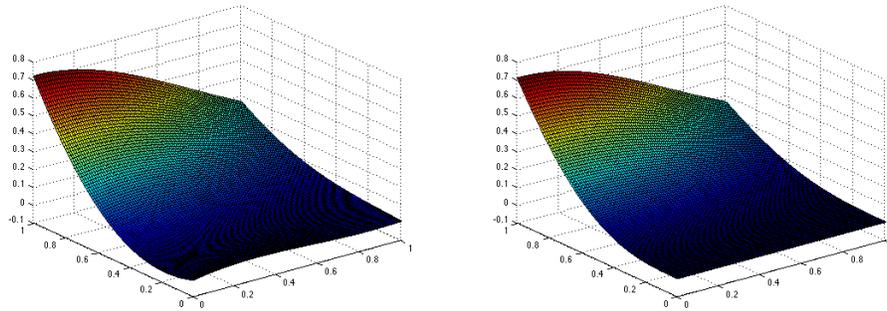


Figura 16: Interpolante de F_0 con $N = 10$ y $N = 121$, respectivamente.

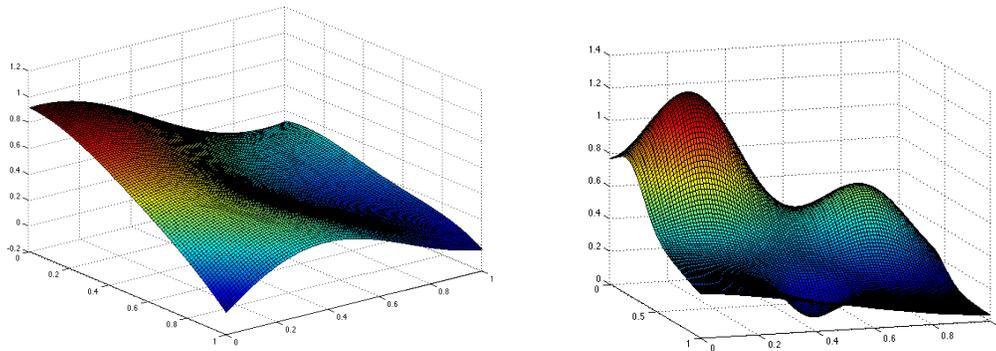


Figura 17: Interpolante de F_1 con $N = 10$ y $N = 121$, respectivamente.

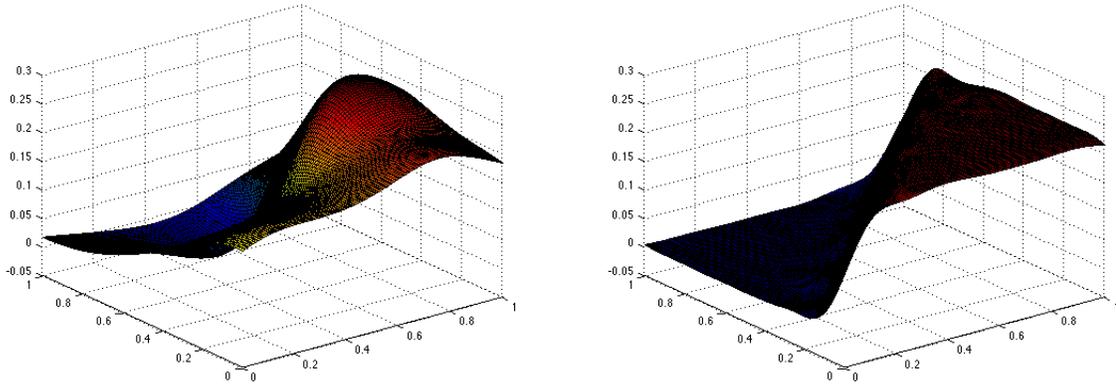


Figura 18: Interpolante de F_2 con $N = 10$ y $N = 121$, respectivamente.

Observamos que solamente con 10 nodos el interpolante para F_0 es de buena calidad. Sin embargo, los interpolantes con 10 nodos de las funciones F_1 y F_2 no son satisfactorios. Al aumentar el número de nodos a 121 recuperamos las funciones con bastante precisión.

Distribución de los centros

En esta sección estudiaremos si es necesario aumentar el número de nodos para alcanzar soluciones satisfactorias o si es posible obtener buenos ajustes con un número reducido de nodos distribuidos de forma adecuada. El siguiente ejemplo muestra que, tomando pocos nodos, podemos obtener una buena aproximación de la función si elegimos bien su localización.

Para aproximar F_1 hemos tomado los 9 nodos indicados en la siguiente figura:

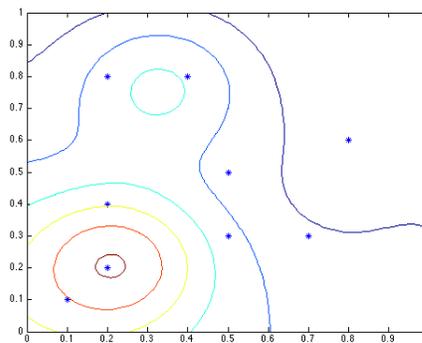


Figura 19: Nodos de interpolación y curvas de nivel de F_1

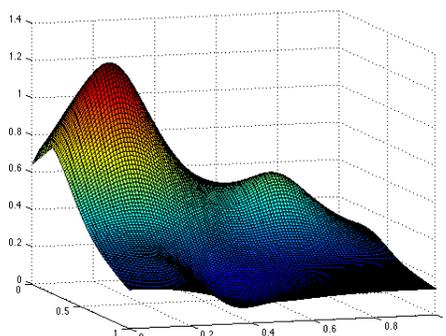


Figura 20: Aproximación de F_1 con 9 nodos y ruido en las medidas

La interpolación se ha realizado tomando RBF multicuadráticas inversas y 6.89 como parámetro de forma. El error ECM obtenido es $6.44e - 2$ que es menor que el error obtenido cuando tomábamos 10 nodos de forma aleatoria y similar al de la interpolación con 121 nodos y ruido en las medidas (ver tablas 4 y 6). Este ejemplo muestra la importancia de elegir la distribución de los nodos cuando sea posible. Trabajar con un número de nodos mucho mayor supone aumentar el tamaño de las matrices, por lo que resolver el problema de interpolación tiene un coste mucho mayor.

Conclusiones

De todos los experimentos numéricos realizados podemos extraer las siguientes conclusiones:

- La mejor estrategia en los problemas de interpolación es tomar los centros de las RBF en los nodos.
- El parámetro de forma depende de la RBF utilizada, de la distribución y cantidad de los nodos y del ruido de las medidas.
- El condicionamiento de las matrices de interpolación crece a medida que disminuye el valor del parámetro de forma.
- El aumento del número de centros disminuye el ECM pero hace aumentar el condicionamiento de la matriz de interpolación.
- Una buena elección de la distribución de los centros permite obtener soluciones de gran calidad sin aumentar su número.

4.4. Algoritmo de Rippa para determinar el parámetro de forma óptimo

Como en la práctica, en general, no disponemos de datos suficientes de la función que estamos interpolando, no podemos calcular el error cuadrático medio, ECM, para determinar el parámetro

de forma óptimo resolviendo el problema de optimización (4.9). El algoritmo de Rippa (ver [7]) selecciona un buen valor para el parámetro de forma a partir de un número pequeño de datos, minimizando una función alternativa al ECM basándose en la siguiente estrategia.

Sean $V = \{p_1, \dots, p_N\}$ un conjunto de nodos y $V^{[k]}$, con $k = 1, \dots, N$ el subconjunto de V obtenido al eliminar p_k de V . Sean $f = (f_1, \dots, f_N)^T$ los valores que toma la función en los nodos y $f^{[k]}$ el vector obtenido al eliminar f_k de f . Consideramos el interpolante:

$$S_\epsilon^{[k]}(x, y) = \sum_{j=1, j \neq k}^N \alpha^{[k]} \varphi_\epsilon(\|p_j - (x, y)\|),$$

donde $\alpha^{[k]} = (\alpha_1^{[k]}, \dots, \alpha_{k-1}^{[k]}, \alpha_{k+1}^{[k]}, \dots, \alpha_N^{[k]})^T$ es el vector de coeficientes determinado por las condiciones de interpolación:

$$S_\epsilon^{[k]}(p_i) = f_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad i \neq k,$$

que es equivalente a resolver el sistema lineal:

$$A^{[k]} \alpha^{[k]} = f^{[k]}, \quad (4.11)$$

donde $A^{[k]}$ es la matriz obtenida al eliminar la fila y la columna k -ésima de la matriz de interpolación A . Entonces se define la función *coste* como:

$$\text{coste}(\epsilon) = \|(E_1(\epsilon), \dots, E_N(\epsilon))\|_1, \text{ donde } E_k(\epsilon) = f_k - S_\epsilon^{[k]}(p_k).$$

Rippa toma como parámetro de forma el valor ϵ que minimiza esta función (ver [7]).

$$\min_{\epsilon \in (0, 10)} \text{coste}(\epsilon).$$

En principio, el coste de una evaluación de la función anterior es del orden $O(N^4)$, ya que hay que resolver N sistemas $(N-1) \times (N-1)$. El siguiente resultado nos permite evaluar la función *coste* de forma más eficiente:

Proposición 2 (Algoritmo de Rippa [7]). *Se verifica $E_k(\epsilon) = \frac{\alpha_k}{z_k^{(k)}}$, $\forall k \in \{1, \dots, N\}$, donde $z^{(k)}$ es la solución del sistema $Az^{(k)} = e^{(k)}$ siendo $e^{(k)}$ es la k -ésima columna de la matriz identidad y α la solución de (4.1).*

Demostración. Fijado $k \in \{1, \dots, N\}$, es trivial probar que si $\beta \in \mathbb{R}^N$ tal que $\beta_k = 0$ se tiene

$$A\beta = z \Rightarrow A^{[k]}(\beta_1, \dots, \beta_{k-1}, \beta_{k+1}, \dots, \beta_N)^T = (z_1, \dots, z_{k-1}, z_{k+1}, \dots, z_N)^T. \quad (4.12)$$

Consideramos el vector

$$b^{(k)} = \alpha - \frac{\alpha_k}{z_k^{(k)}} z^{(k)}.$$

Se tiene

$$Ab^{(k)} = A\alpha - \frac{\alpha_k}{z_k^{(k)}}Az^{(k)} = f - \frac{\alpha_k}{z_k^{(k)}}e^{(k)} = (f_1, \dots, f_{k-1}, f_k - \frac{\alpha_k}{z_k^{(k)}}, f_{k+1}, \dots, f_N)^T.$$

Como $b_k^{(k)} = 0$, por (4.12) y (4.11),

$$\alpha^{[k]} = (b_1^{(k)}, \dots, b_{k-1}^{(k)}, b_{k+1}^{(k)}, \dots, b_N^{(k)}).$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} S^{[k]}(p_k) &= \sum_{j=1, j \neq k}^N \alpha_j^{[k]} \varphi(\|p_j - p_k\|) = \sum_{j=1, j \neq k}^N b_j^{(k)} \varphi(\|p_j - p_k\|) = \sum_{j=1}^N b_j^{(k)} \varphi(\|p_j - p_k\|) = (Ab^{(k)})_k = \\ &= f_k - \frac{\alpha_k}{z_k^{(k)}}. \end{aligned}$$

Por tanto $E_k = f_k - S^{[k]}(p_k) = \frac{\alpha_k}{z_k^{(k)}}$. □

De esta forma el orden de evaluar la función *coste* es $O(N^3)$, ya que solo se necesita factorizar la matriz A una vez y resolver $N + 1$ sistemas de ecuaciones lineales con esa factorización.

Experimentación numérica utilizando el algoritmo de Rippa

Los siguientes experimentos tienen como objetivo verificar la calidad de la aproximación con el parámetro de forma óptimo que proporciona el algoritmo de Rippa. Los experimentos se han llevado a cabo variando el número de datos y el tipo de RBF. Las funciones test utilizadas son las mismas que en los experimentos de secciones anteriores. Las siguientes gráficas representan conjuntamente las dos funciones: ECM (en rojo) y *coste* (en azul). Todas las gráficas tienen escala semilogarítmica en el eje vertical.

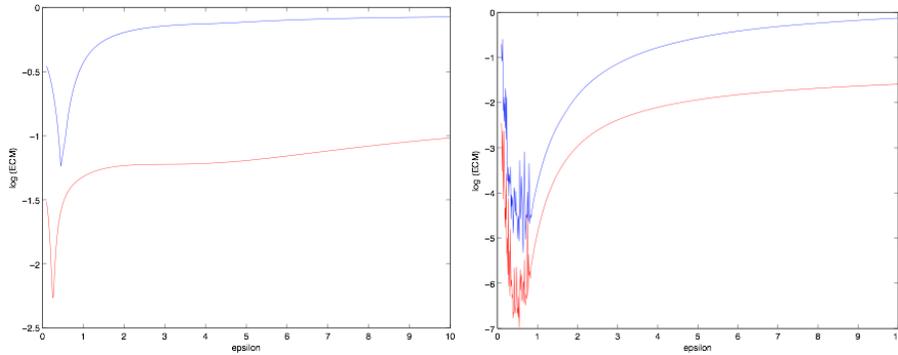


Figura 21: Función *coste* y ECM para F_0 con multicuadrática inversa. $N = 10$ (izquierda) y $N = 121$ (derecha).

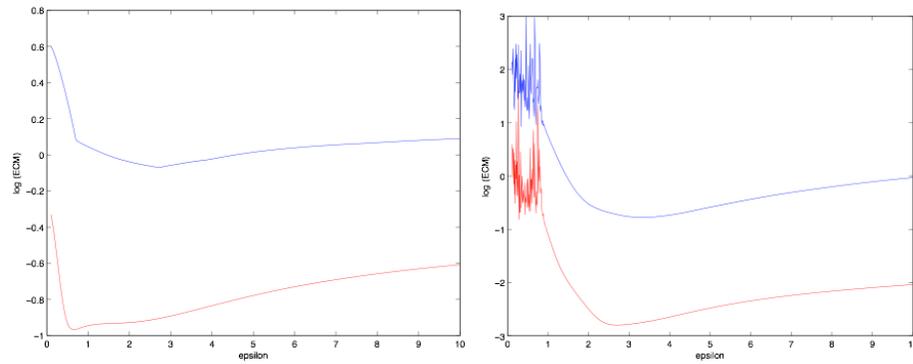


Figura 22: Función coste y ECM para F_1 con multicuadrática inversa. $N = 10$ (izquierda) y $N = 121$ (derecha).

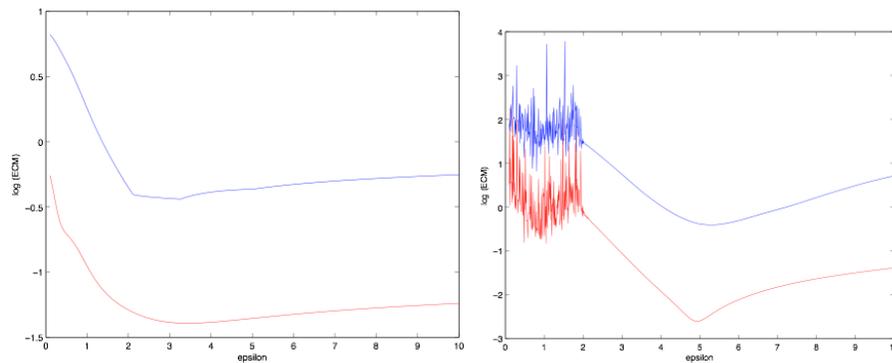


Figura 23: Función coste y ECM para F_2 con multicuadrática inversa. $N = 10$ (izquierda) y $N = 121$ (derecha).

Observamos que las funciones coste y ECM tienen perfiles similares por lo que el algoritmo de Ripppa proporciona una buena estimación del parámetro de forma óptimo. La función coste sobreestima el error aunque hay que tener en cuenta que el ECM se ha calculado con la norma euclídea y la función coste utiliza la norma $\|\cdot\|_1$.

Las siguientes tablas recogen el parámetro de forma óptimo y la estimación del error dada por la función *coste* definida anteriormente. En los experimentos hemos tomado los centros en los nodos y las medidas sin ruido.

Tabla 10: Algoritmo de Rippa. Centros en los nodos. $N = 10$.

Función Test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	<i>coste</i>	ϵ óptimo	cond(A)	<i>coste</i>
F_0	0.55	3.20e7	1.22e-1	0.48	2.34e7	6.67e-2
F_1	1.78	1.05e4	9.88e-1	2.33	3.34e3	8.80e-1
F_2	3.19	3.78e2	3.81e-1	3.46	1.13e3	3.80e-1

Al comparar con la tabla 8, vemos que el parámetro obtenido por el algoritmo de Rippa es una buena aproximación del parámetro óptimo excepto para F_1 con multicuadrática inversa.

Tabla 11: Algoritmo de Rippa. Nodos y centros iguales. $N = 121$.

Función Test	Gaussiana			Multicuadrática inversa		
	ϵ óptimo	cond(A)	<i>coste</i>	ϵ óptimo	cond(A)	<i>coste</i>
F_0	6.18	9.83e4	6.43e-1	6.59	2.84e4	4.45e-1
F_1	7.63	6.14e3	1.30	3.82	1.99e6	1.77e-1
F_2	6.67	3.44e4	4.51e-1	6.71	2.53e4	3.07e-1

Los resultados resaltados en rojo son aquellos para los que la función ‘fminbnd’ no ha obtenido una solución satisfactoria. En las gráficas se comprueba que los verdaderos valores óptimos en ambas funciones sí son similares (ver figuras 21, 22 y 23).

4.5. Elección de centros

Hemos comprobado que la calidad de la aproximación depende, entre otros factores, de la elección del conjunto de centros y nodos. Es posible obtener muy buenas aproximaciones con pocos centros si estos se encuentran en una posición determinada como hemos visto en la figura 20. Por lo tanto, merece la pena plantearse determinar la posición óptima de los centros que vamos a utilizar. Para ello, dado N un número fijo de centros y $F : \Omega \mapsto \mathbb{R}$, nos planteamos resolver el siguiente problema:

$$\begin{aligned}
 & \text{mín} && ECM(c_1, \dots, c_N, \epsilon) && (4.13) \\
 & \epsilon \in (0, \infty) \\
 & c_i \in \Omega, \forall i = 1, \dots, N
 \end{aligned}$$

donde $ECM(c_1, \dots, c_N, \epsilon)$ es el error cuadrático medio obtenido en la interpolación de la función F tomando como centros (c_1, \dots, c_N) y ϵ como parámetro de forma. Hasta donde nosotros conocemos, este enfoque es novedoso en tanto que se permite la variación de los centros y ϵ simultáneamente, mientras que en trabajos anteriores solo se consideraba la variación de centros.

La estrategia que vamos a seguir es la siguiente:

- Definimos una malla uniforme de puntos en el dominio para medir el ECM. En los experimentos se han tomado 441 puntos.
- Comenzamos tomando un pequeño número de centros ($N = 5$). Resolvemos el problema (4.13) tomando como valores iniciales para las variables este conjunto de centros y el parámetro de forma óptimo para ellos.
- Al conjunto de centros solución del problema (4.13), le añadimos como nuevo centro el punto de la malla anteriormente definida donde el error absoluto entre el interpolante y la función sea mayor. Volvemos a resolver el problema de optimización (4.13) con dos variables más partiendo de este nuevo conjunto de centros y del parámetro de forma óptimo para ellos.
- Repetimos este proceso hasta que la resolución del problema de optimización (4.13) presente un gran coste computacional o hasta que la posición de los centros apenas varíe antes y después de resolver uno de los problemas (4.13).

A continuación se recogen los resultados obtenidos al aplicar esta estrategia a la elección de los centros para la función test F_1 utilizando RBF multicuadráticas inversas.

Tabla 12: Resultados de la primera fase para la función F_1 .

N	ECM inicial	ϵ inicial	ECM final	ϵ final	Error máximo
4	1.49e-01	1.31	6.49e-02	5.63	2.71e-01
5	6.73e-02	6.40	4.47e-02	5.48	1.55e-01
6	5.87e-02	6.01	3.55e-02	5.16	1.28e-01
7	3.10e-02	5.08	2.03e-02	5.03	8.45e-02
8	2.14e-02	5.66	1.97e-02	5.66	6.87e-02
9	1.96e-02	5.41	1.53e-02	5.41	5.37e-02

A continuación se recogen las distribuciones de los centros en distintas iteraciones del proceso y los interpolantes obtenidos. Los asteriscos en azul y los puntos en rojo se corresponden respectivamente con la posición de los centros antes y después de optimizar. También se representan las curvas de nivel de la función.

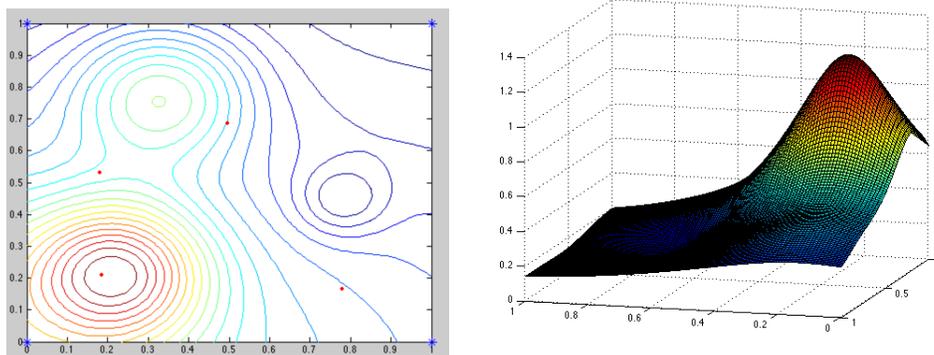


Figura 24: Distribución de los centros y aproximante con $N = 4$.

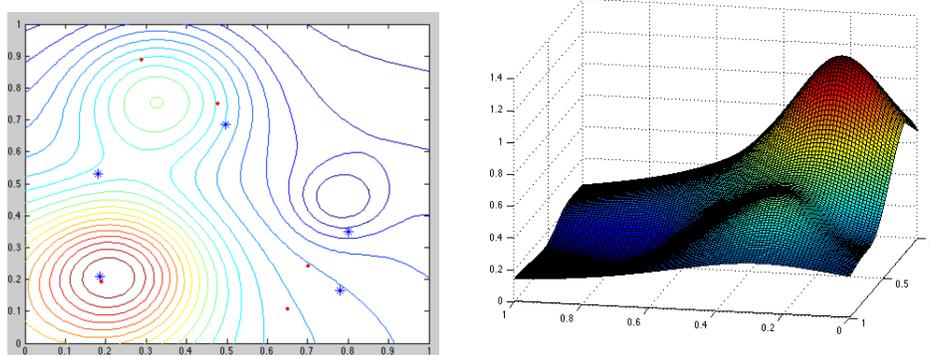


Figura 25: Distribución de los centros y aproximante con $N = 5$.

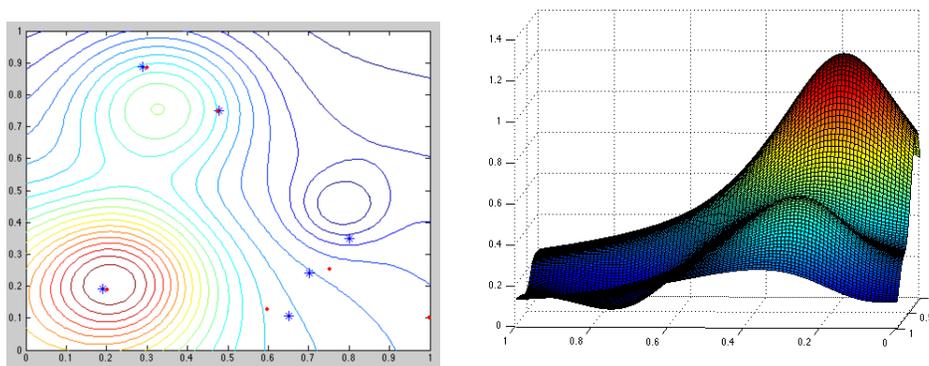


Figura 26: Distribución de los centros y aproximante con $N = 6$.

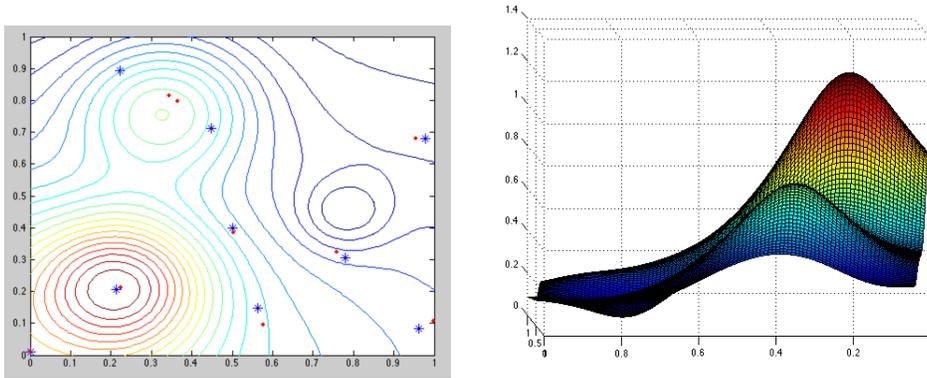


Figura 27: Distribución de los centros y aproximante con $N = 9$.

Observamos que con 4 nodos solo se recupera el máximo absoluto de la función. Al añadir otro nodo ya se recuperan los dos máximos y con 6 nodos se recupera también el mínimo, que es la zona más difícil de aproximar.

5. Aproximación

A partir de ahora vamos a resolver un problema de aproximación. A diferencia del caso de la interpolación, no exigiremos que el aproximante tome en los nodos exactamente el valor de la función y no exigiremos que el número de nodos y centros sea el mismo. Dados los nodos $p_i \in \mathbb{R}^2$ con $i = 1, \dots, N$ y $p_i \neq p_j$ si $i \neq j$, los centros $c_i \in \mathbb{R}^2$ con $i = 1, \dots, M$ y el vector $f = (f_1, \dots, f_N) \in \mathbb{R}^N$, el problema de aproximación consiste en encontrar una función S_ϵ de la siguiente forma:

$$S_\epsilon(p) = \sum_{k=1}^M \alpha_k \varphi_\epsilon(\|p - c_k\|),$$

donde los coeficientes de la expresión anterior son solución del problema mínimo-cuadrático:

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^M} \frac{1}{2} \|A\alpha - f\|_2^2 + \frac{\gamma}{2} \|\alpha\|_2^2, \quad (5.1)$$

con $\gamma \geq 0$ y

$$A = \begin{pmatrix} \varphi_\epsilon(\|p_1 - c_1\|) & \dots & \varphi_\epsilon(\|p_1 - c_M\|) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_\epsilon(\|p_N - c_1\|) & \dots & \varphi_\epsilon(\|p_N - c_M\|) \end{pmatrix}$$

Llamamos **matriz de aproximación** a la matriz rectangular A .

Proposición 3. *Supuesto que se verifica una de las siguientes condiciones:*

1. $\text{rango}(A) = M$ y $\gamma \geq 0$,

2. $\text{rango}(A) < M$ y $\gamma > 0$,

el problema (5.1) tiene una única solución.

Demostración. La matriz del problema de mínimos cuadrados tiene la forma: $B = \begin{pmatrix} A \\ \sqrt{\gamma}Id_M \end{pmatrix}$.

En ambos casos $\text{rango}(B) = M$ por lo que el problema de mínimos cuadrados tiene solución única. \square

5.1. Descomposición en valores singulares

Las matrices involucradas en los problemas de ajuste de datos con RBF suelen estar mal condicionadas. Este hecho puede afectar a la calidad de la solución obtenida. A continuación se introduce la **descomposición en valores singulares** de una matriz (sus iniciales en inglés son SVD) (ver [2]).

Teorema 4. Dada una matriz $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, existen dos matrices ortogonales $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ y $V \in \mathbb{R}^{m \times m}$ tales que $\tilde{A} = U\Sigma V^T$ donde Σ es una matriz diagonal en $\mathbb{R}^{n \times m}$.

Definición 4. Se denominan **valores singulares** de \tilde{A} a los elementos de la diagonal de la matriz Σ , que denotaremos por $\sigma_1, \dots, \sigma_p$, donde $p = \min\{n, m\}$ y $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_p \geq 0$.

Se sabe además que estos valores singulares son únicos (ver [2]).

Esta descomposición permite definir un método para aproximar las soluciones de un sistema de ecuaciones lineales cuando la matriz está mal condicionada y puede ser útil para resolver problemas de mínimos cuadrados con rango deficiente.

Aplicación al problema de mínimos cuadrados

En lo sucesivo supondremos $n > m$. Dado el siguiente problema de mínimos cuadrados:

$$\min_{\beta \in \mathbb{R}^m} \|\tilde{A}\beta - \tilde{f}\|_2^2,$$

podemos aplicar la descomposición en valores singulares para resolverlo:

$$\|\tilde{A}\beta - \tilde{f}\|_2^2 = \|U\Sigma V^T\beta - \tilde{f}\|_2^2 = \|\underbrace{\Sigma V^T\beta}_{\hat{\beta}} - \underbrace{U^T\tilde{f}}_{\hat{f}}\|_2^2 = \|\Sigma\hat{\beta} - \hat{f}\|_2^2 = \sum_{i=1}^m (\sigma_i\hat{\beta}_i - \hat{f}_i)^2 + \underbrace{\sum_{i=m+1}^n \hat{f}_i^2}_{cte}.$$

Distinguiremos dos casos:

- \tilde{A} tiene rango máximo: la solución del problema es $\hat{\beta}_i = \frac{\hat{f}_i}{\sigma_i}$ para $i = 1, \dots, m$, por lo que se tiene $\beta = V\hat{\beta} = \sum_{i=1}^m \frac{\hat{f}_i}{\sigma_i} v_i$, donde v_i es la columna i -ésima de V .

- \tilde{A} tiene rango deficiente, r : en este caso hay infinitas soluciones. Todas verifican $\hat{\beta}_i = \frac{\hat{f}_i}{\sigma_i}$ para $i = 1, \dots, r$ y tienen la expresión $\beta = \sum_{i=1}^r \frac{\hat{f}_i}{\sigma_i} v_i + \sum_{i=r+1}^m \hat{\beta}_i v_i$, siendo la solución de norma mínima la definida por: $\hat{\beta}_i = 0$ para $i = r + 1, \dots, m$.

La factorización QR es un algoritmo computacionalmente más económico que la SVD para la resolución del problema de mínimos cuadrados. Sin embargo, si \tilde{A} tiene valores singulares cercanos a cero, la descomposición en valores singulares es más estable que la factorización QR (ver [10]).

Aplicación a la resolución de un sistema lineal

En el caso $n = m$ y que la matriz \tilde{A} tenga valores singulares muy pequeños, el ruido en el término independiente de un sistema de ecuaciones lineales, $\tilde{A}\beta = \tilde{f} + \delta$, puede afectar considerablemente a la solución: $\beta = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T(\tilde{f} + \delta)}{\sigma_i} v_i$ donde u_i y v_i son las columnas i -ésimas de U y V respectivamente. Así, si σ_i es muy pequeño, valores pequeños de δ pueden provocar grandes cambios en la solución del sistema. Un procedimiento alternativo consiste en aproximar la solución resolviendo el siguiente problema de mínimos cuadrados: $\min_{\beta \in \mathbb{R}^n} \|\tilde{A}_k \beta - \tilde{f}\|_2^2$ donde $\tilde{A}_k = U \hat{\Sigma} V^T$, siendo $\tilde{A} = U \Sigma V^T$ y $\hat{\Sigma}$ la matriz diagonal obtenida al sustituir en Σ los valores singulares más pequeños por 0. Así, con pocos valores singulares se obtienen buenas aproximaciones de la solución del sistema (ver [5]).

5.2. Elección de centros

Dado un conjunto de nodos conocido, nos planteamos ahora la elección óptima de centros para la aproximación. Seguiremos dos fases. La **primera fase** es la misma que en el caso de la interpolación con la salvedad de que permitiremos que los centros puedan salir ligeramente del dominio, es decir $c_i \in [-\hat{\delta}, 1 + \hat{\delta}] \times [-\hat{\delta}, 1 + \hat{\delta}]$ con $\hat{\delta} \geq 0$ y que los coeficientes del aproximante se calcularán resolviendo 5.1. A continuación, llevamos a cabo una **segunda fase** en la que añadimos al conjunto de centros el punto de la malla previamente fijada donde el error absoluto es mayor.

Comenzamos los experimentos numéricos tomando $N = 121$ y RBF multicuadrática inversa. Los resultados de la primera fase para F_1 son los siguientes:

Tabla 13: Resultados de la primera fase para F_1 . RBF multicuadrática inversa. $N = 121$. Medidas sin ruido.

M	ECM inicial	ϵ	ECM final	Error máximo
4	6.923e-2	6.65	4.90e-2	1.46e-1
5	4.10e-2	5.49	3.63e-2	1.31e-1
6	3.62e-2	4.67	2.76e-2	1.34e-1
7	2.76e-2	5.12	2.22e-2	9.06e-2
8	2.19e-2	5.90	2.04e-2	7.52e-2
9	2.04e-2	5.66	1.61e-2	5.26e-2
10	1.61e-2	5.87	1.54e-2	4.41e-2

En la tabla anterior vemos que se ha reducido en ECM el 68 % aproximadamente. Las siguientes gráficas recogen las distribuciones inicial y final de los centros en la primera fase, con $M = 4$ y $M = 10$ respectivamente. Los asteriscos azules se corresponden con los centros antes de resolver el problema (5.1) y los puntos en rojo se corresponden con la solución del problema. El punto verde es el punto de la rejilla donde el error absoluto en la aproximación es mayor.

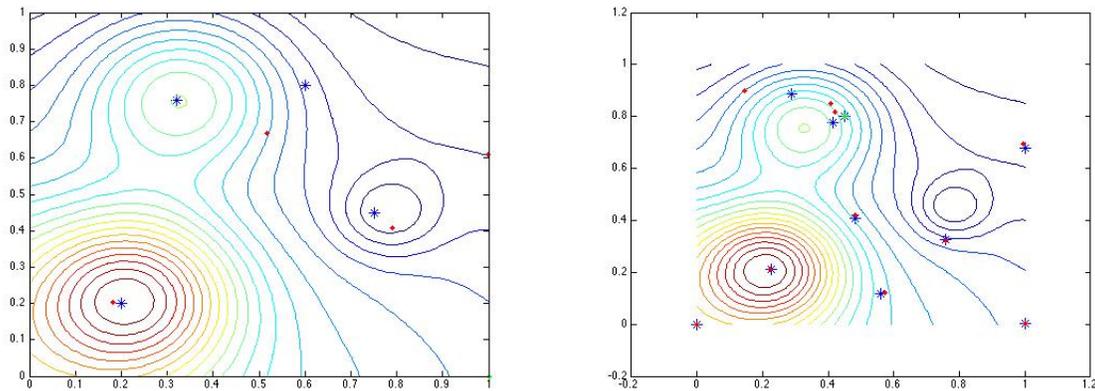


Figura 28: Distribución inicial y final de los centros para F_1 . A la izquierda $M = 4$ y a la derecha $M = 10$.

Algunos de los centros se sitúan en la frontera del dominio o incluso fuera de éste. Esto se puede deber a que el error tiende a acumularse en la frontera como se ha visto en experimentos anteriores (ver figuras 12, 13, 14 y 15).

Tabla 14: Resultados de la segunda fase para F_1 . RBF multicuadrática inversa. $N = 121$. Medidas sin ruido.

M	ECM	ϵ óptimo	Error máximo.
11	1.49e-2	7.76	4.29e-2
15	1.26e-2	5.49	3.17e-2
20	9.34e-3	5.19	2.41e-2
25	7.98e-3	5.19	1.91e-2
30	5.96e-3	4.97	1.70e-2

En esta tabla se observa que durante la segunda fase se ha reducido el ECM aproximadamente un 60%. Las siguientes gráficas recogen la distribución de los centros después de aplicar la segunda fase junto con las curvas de nivel de la función F_1 y el aproximante obtenido con estos centros.

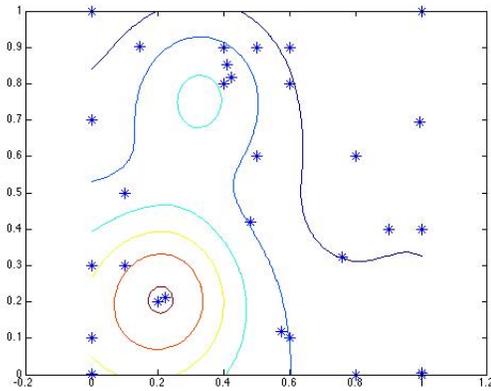


Figura 29: 30 centros

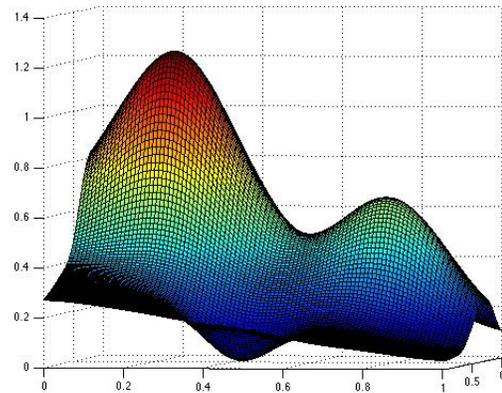


Figura 30: Aproximación de F_1 con 30 centros.

La tercera parte de los centros se ha situado en la frontera. El resto de los centros se acumula principalmente en las zonas de los máximos y del mínimo. Esta distribución de 30 centros permite obtener una buena aproximación de la función F_1 .

A continuación repetimos el mismo proceso utilizando las RBF gaussianas para comparar la calidad del ajuste. Los resultados para la primera fase son los siguientes:

Tabla 15: Resultados de la primera fase para F_1 . RBF gaussiana. $N = 121$. Medidas sin ruido.

M	ECM inicial	ϵ	ECM final	Error máximo
4	1.02e-1	2.91	4.02e-2	2.06e-1
5	3.88e-2	3.03	2.41e-2	1.11e-1
6	3.36e-2	3.12	2.84e-2	1.28e-1
7	2.79e-2	3.06	2.66e-2	1.10e-1
8	2.66e-2	3.09	2.58e-2	1.08e-1
9	2.66e-2	3.09	2.49e-2	1.16e-2
10	2.48e-2	3.14	2.39e-2	9.53e-2

Tras la primera fase se ha producido una reducción del 40% del ECM aproximadamente. Se observa que los errores cometidos en la aproximación son mayores, tanto el ECM como el error máximo (comparar con la tabla 13).

A continuación se recogen los resultados de la elección de centros para la función F_2 . En este caso no hemos realizado la primera fase, porque en su posición óptima varios centros coinciden, lo que puede dar lugar a un aumento del condicionamiento de la matriz.

Tabla 16: Resultados de la segunda fase para F_2 . RBF multicuadrática inversa. $N = 121$. Medidas sin ruido.

M	ECM	ϵ	Error máximo
5	4.50e-2	4.51e-1	1.11e-1
10	1.96e-2	3.01	6.37e-2
15	1.19e-2	4.18	4.68e-2
20	8.42e-3	4.86	2.02e-2
25	6.22 e-3	6.04	1.71e-2
30	5.09e-3	6.40	1.06e-2
35	4.38e-3	6.90	9.19e-3
40	2.66e-3	8.12	5.91 e-3

En la tabla se observa que se ha reducido el ECM un 94%. A continuación se recoge la distribución inicial de los centros. Hemos tomados 4 de estos centros en la diagonal, porque la función presenta una fuerte caída en esta zona. También respresentamos la distribución final de los centros y el aproximante obtenido con estos 41 centros.

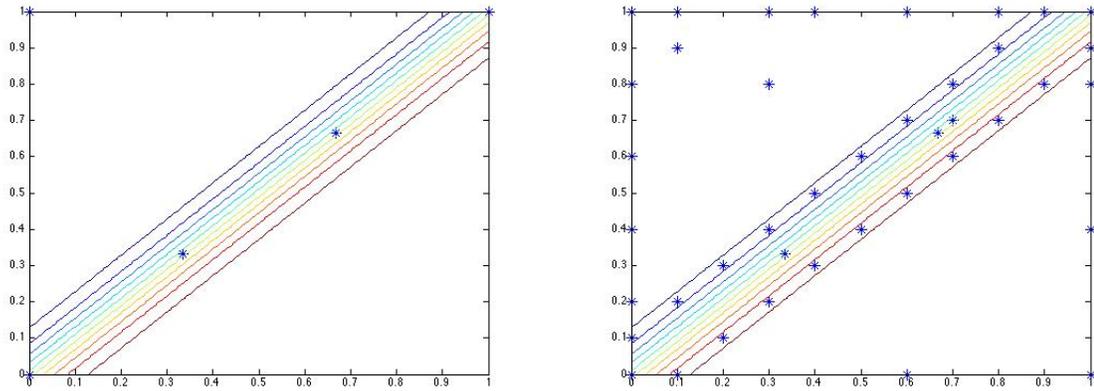


Figura 31: Distribuciones inicial y final de los centros. A la izquierda $M = 5$ y a la derecha $M = 40$.

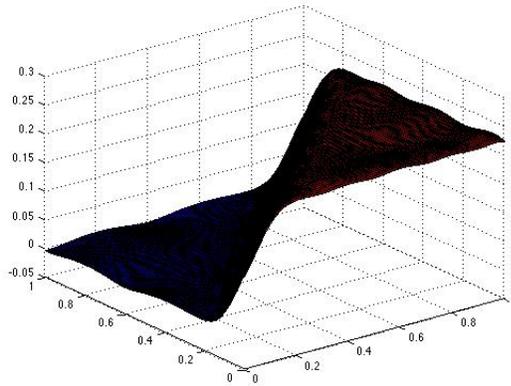


Figura 32: Aproximación de F_2 con 41 centros.

Exceptuando dos, todos los centros se sitúan en la frontera y en la diagonal principal. Este resultado coincide con lo esperado. Obtenemos una buena aproximación de la función F_2 con estos centros.

De la misma forma que con F_1 , repetimos el proceso utilizando RBF gaussianas para comparar la calidad de los resultados que son los siguientes:

Tabla 17: Resultados de la primera fase para F_2 . RBF gaussiana. $N = 121$. Medidas sin ruido.

M	ECM inicial	ϵ	ECM final	Error máximo
4	9.96e-2	7.02e-4	4.58e-2	8.72e-2
5	4.37e-2	1.81	2.0159e-2	7.58e-2
6	2.95e-2	2.32	2.51e-2	6.48e-2
7	2.51e-2	3.16	1.79e-2	4.55e-2
8	1.79e-2	3.01	1.62e-2	3.99e-2
9	1.61e-2	3.47	1.55e-2	5.04e-2
10	1.54e-2	3.85	1.35e-2	3.88e-2

Tabla 18: Resultados de la segunda para la función F_2 . RBF gaussiana. $N = 121$. Medidas sin ruido.

M	ECM	ϵ	Error máximo
15	1.17e-2	4.08	4.19e-2
20	9.97e-3	4.15	2.42e-2
25	8.44e-3	4.19	1.83e-2
30	6.78e-3	4.90	1.60e-2

Al comparar las tablas anteriores con la tabla 16, observamos que, también para F_2 el ECM y el error máximo de la aproximación son mayores utilizando RBF gaussianas. Por lo tanto, parece conveniente tomar las multicuadráticas inversas como RBF a partir de ahora.

Aproximación con ruido

Los siguientes experimentos tienen como objetivo estudiar cómo afecta la introducción de ruido en las medidas al proceso de elección de nodos. Se introduce un ruido del 3%. En primer lugar presentamos los resultados obtenidos para la función F_1 .

Tabla 19: Resultados de la primera fase para F_1 . RBF multicuadrática inversa. $N = 121$. Medidas con ruido.

M	ECM inicial	ϵ	ECM final	Error máximo
4	6.93e-2	6.68	4.89e-2	21.46e-2
5	4.12e-2	5.48	3.63e-2	1.31e-1
6	3.63e-2	4.84	2.77e-2	1.30e-1
7	2.78e-2	5.14	2.21e-2	9.21e-2
8	2.17e-2	5.87	2.04e-2	7.16 e-2
9	2.04e-2	5.78	1.61e-2	5.74e-2
10	1.61e-2	5.85	1.53e-2	4.61e-2

En la tabla observamos que el ECM se reduce aproximadamente un 68 % con la primera fase. Las siguientes gráficas recogen las distribuciones inicial y final de los centros en la primera fase.

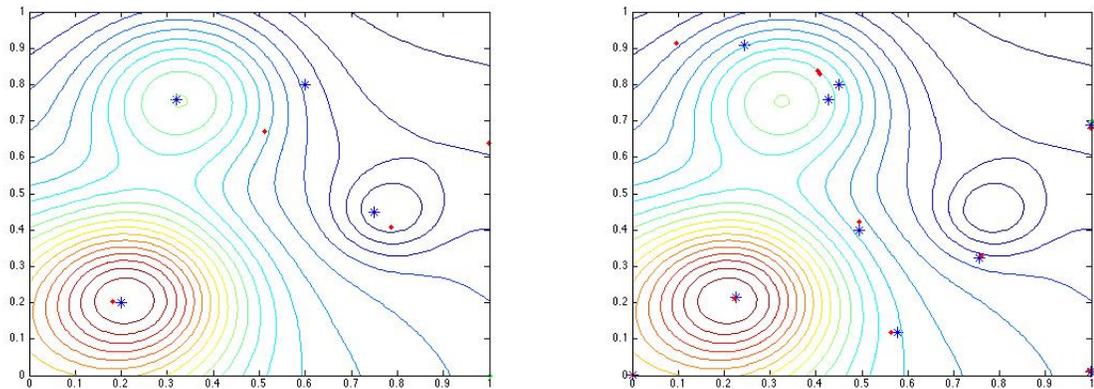


Figura 33: Disposición inicial y final de los centros para F_1 . A la izquierda $M = 4$ y a la derecha $M = 10$.

La distribución obtenida es similar al caso sin ruido en las medidas (comparar con la figura 28). A continuación se presentan los resultados de la segunda fase, en la que hemos ampliado el conjunto de centros hasta llegar a 40.

Tabla 20: Resultados de la segunda fase para F_1 . RBF multicuadrática inversa. $N = 121$. Medidas con ruido.

M	ECM	ϵ	Error máximo
15	1.29e-2	5.38	3.20e-2
20	1.12e-2	5.11	2.25e-2
25	9.91e-3	5.15	1.84e-2
30	8.01e-3	4.93	1.70e-2
35	7.55e-3	4.57	1.66e-2
40	6.42e-3	4.23	1.11e-2

En la tabla observamos que con la segunda fase se ha reducido el ECM un 58 % aproximadamente. Al comparar con la tabla 14, vemos que el ECM aumenta con la introducción del ruido. Las siguientes gráficas contienen la distribución final de los centros y el aproximante obtenido con los mismos.

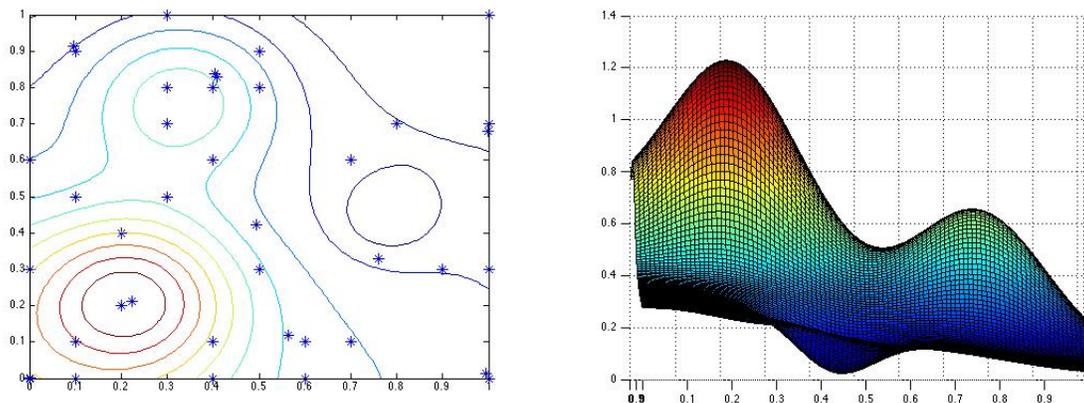


Figura 34: Distribución final de centros y aproximante obtenido para F_1 . Medidas con ruido. RBF multicuadrática inversa. $M = 40$.

Más de la cuarta parte de los centros se sitúan en la frontera. El aproximante obtenido es de buena calidad pese al ruido.

Ahora presentamos los resultados obtenidos para el proceso de elección de centros con F_2 :

Tabla 21: Resultados de la primera fase para F_2 , RBF multicuadrática inversa. $N = 121$. Medidas con ruido.

M	ECM inicial	ϵ	ECM final	Error máximo
4	9.96e-2	3.26e-2	4.58e-2	8.81e-2
5	3.90e-2	2.83	2.13e-2	6.08e-2
6	2.13e-2	2.95	2.08e-2	6.00e-2
7	2.05e-2	3.13	1.89e-2	4.87e-2
8	1.86e-2	3.34	1.78e-2	3.52e-2
9	1.60e-2	3.98	1.39e-2	4.69e-2

En la tabla observamos que tras la primera fase el error se ha reducido aproximadamente un 70%. Las siguientes gráficas recogen la distribución inicial y final de los centros en la primera fase.

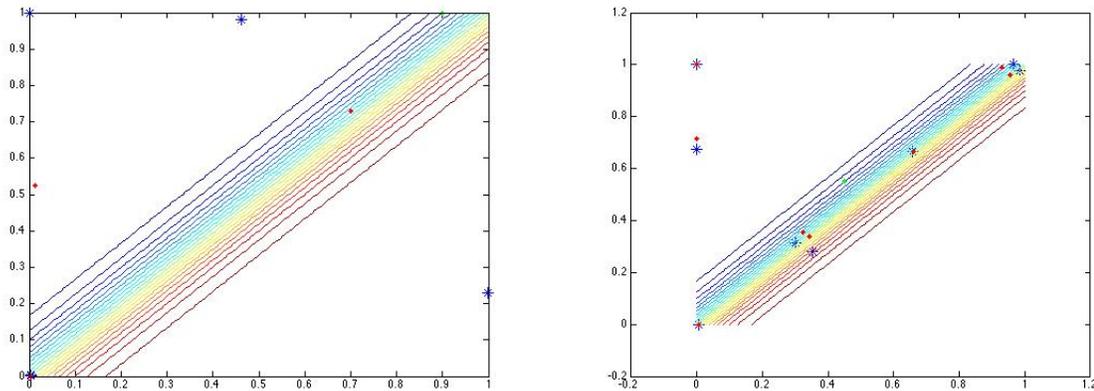


Figura 35: Distribución inicial y final de centros para F_2 . A la izquierda $M = 5$ y a la derecha $M = 9$.

Los centros están en la frontera y en la diagonal principal, de la misma forma que en el caso sin ruido en las medidas.

Tabla 22: Resultados de la segunda fase para F_2 . RBF multicuadrática inversa. $N = 121$. Medidas con ruido.

M	ECM	ϵ	Error máximo
15	8.17e-3	4.74	2.07e-2
20	7.75e-3	5.01	1.86e-2
25	4.73e-3	6.24	1.42e-2
30	3.04e-3	7.26	9.79e-3
35	2.93e-3	7.30	8.02e-3
40	2.90e-3	7.35	4.96e-3

En la tabla observamos que el ECM se ha reducido aproximadamente el 68%. En el caso de F_2 también aumenta el ECM con respecto al caso sin ruido (comparar con la tabla 16). A continuación, se presenta la distribución final de los centros y el aproximante asociado a los mismos.

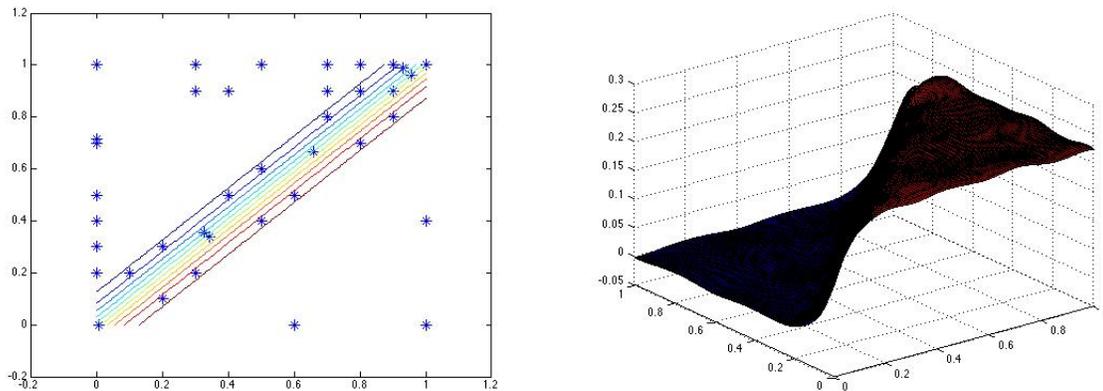


Figura 36: Distribución final de centros y aproximante para F_2 . Medidas con ruido. RBF multicuadráticas inversas. $M = 40$.

La mayor parte de los centros se sitúan en la frontera y en la diagonal principal, de la misma forma que en otras disposiciones de centros para esta función. En conclusión, niveles de ruido del 3% no afectan demasiado a la calidad de las aproximaciones obtenidas. El ECM aumenta pero no significativamente. Sin embargo, si seguimos aumentando el nivel de ruido hasta llegar al 10% la aproximación empeora considerablemente.

6. Aplicación industrial: aproximación de la temperatura en la placa de una cocina de gas

En esta sección se utilizan las técnicas estudiadas en secciones anteriores para aproximar la temperatura en placas de cocinas de gas. Los datos experimentales que vamos a utilizar han sido suministrados por la empresa BSH Electrodomésticos España S.A., localizada en Santander, a quien agradecemos su colaboración, así como el permiso para su utilización.

Los experimentos corresponden a una placa de $75\text{cm} \times 52\text{cm}$ que dispone de cinco quemadores situados en cruz, el más potente de los cuales (wok) está situado en el centro. Cuando se apaga la cocina, tras haberla mantenido encendida durante casi una hora, se puede obtener una termografía de la placa completa, cuyos datos nos han sido suministrados en un fichero Excel. Nuestro objetivo es determinar un aproximante RBF para la temperatura de la placa excluyendo la zona de los quemadores porque las oscilaciones de la temperatura son muy bruscas. Se estudiarán dos casos. En el primero solo estará encendido el wok central de la cocina y en el segundo, todos los quemadores estarán en funcionamiento.

6.1. Wok central

Después de haber estado funcionando durante 55 minutos se obtiene la termografía de la figura 37. En el lateral derecho se observa la localización de los mandos de la cocina.

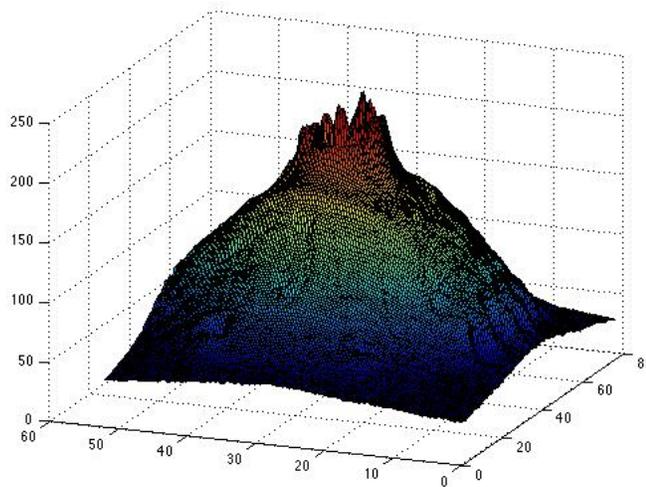


Figura 37: Termografía de la placa con el wok central encendido.

Para medir el ECM tomamos los nodos en una malla uniforme de la que excluimos el wok central, obteniendo un total de 876 puntos. Para comenzar la primera fase, se ha tomado un centro RBF en el wok y tres en la zona de los mandos de la cocina. En esta última la temperatura

alcanza valores mínimos y, como se ha comprobado en experimentos anteriores, será la parte más difícil de aproximar. A continuación presentamos los resultados de la primera fase del proceso de elección de centros RBF descrita en la sección anterior.

Tabla 23: Resultados de la primera fase. Wok encendido. RBF multicuadrática inversa. $N = 876$.

M	ECM inicial	ϵ	ECM final	Error máximo
4	1.50e-1	1.80e10	1.43 e-1	8.70e1
5	1.42e-1	1.36 e1	1.39 e-1	8.44e1
6	1.38e1	1.37 e1	1.38 e-1	8.94e1
7	1.37e-1	1.92e1	1.30e-1	7.02e1
8	1.16e-1	1.76e-1	9.28e-2	3.28e1
9	9.29e-2	1.81e-1	9.20e-2	2.73 e1

Vemos en la tabla que durante la primera fase se ha reducido el ECM aproximadamente un 38 %. Las siguientes gráficas contienen las curvas de nivel de las temperaturas y la distribución de los centros iniciales y finales de la fase en cuestión. En la parte inferior central, observando las variaciones de las curvas de nivel, se puede reconocer la localización de los cinco mandos de la cocina.

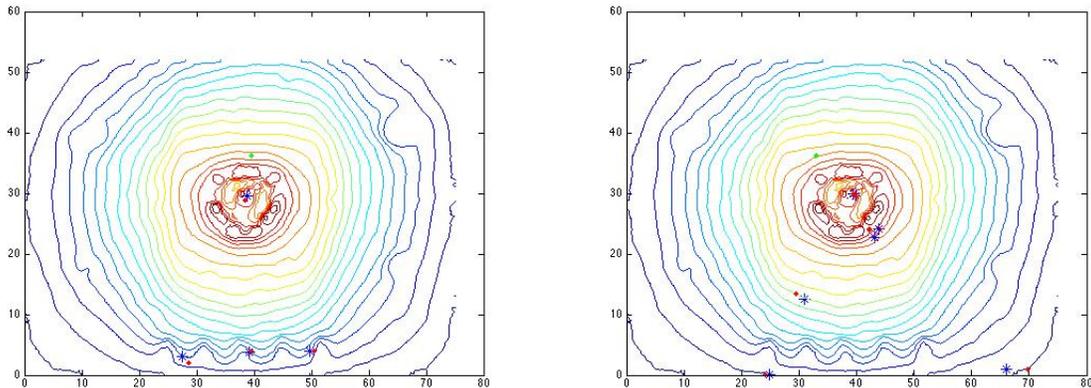


Figura 38: Distribución inicial y final de centros en la primera fase. RBF multicuadrática inversa. A la izquierda, $M = 4$ y a la derecha, $M = 9$.

Hemos observado que los centros tienen tendencia a acumularse en el mismo punto del wok, lo que provoca que el condicionamiento de la matriz de aproximación sea grande, por ejemplo, para $M = 8$ el condicionamiento es 10^9 . Además debido a que esta primera fase consume mucho tiempo solo se han realizado 6 iteraciones antes de pasar a la siguiente fase. Aquí el conjunto

inicial de centros está formado por los 9 obtenidos como resultado de la primera fase y por otros 15 puntos donde la empresa ha situado unos termopares que monitorizan la temperatura en esos puntos durante todo el proceso. Durante la segunda fase evitamos añadir más centros en la zona del wok.

Tabla 24: Resultados de la segunda fase. Wok central. RBF multicuadrática inversa. $N = 876$.

M	ECM	Error máximo	ϵ
30	3.77e-02	1.12e+01	6.78e-02
35	3.34e-02	7.01	5.35e-02
40	3.12e-02	4.76	4.99e-02
46	2.83e-02	4.27	5.02e-02
50	2.80e-02	3.87	4.99e-02

En la tabla anterior vemos que se ha reducido el ECM un 26 % y que el resultado obtenido es muy satisfactorio ya que el máximo error absoluto cometido en la aproximación es menor que $4^{\circ}C$ (del orden del error de medida de los termopares que es $\pm 2.5^{\circ}C$).

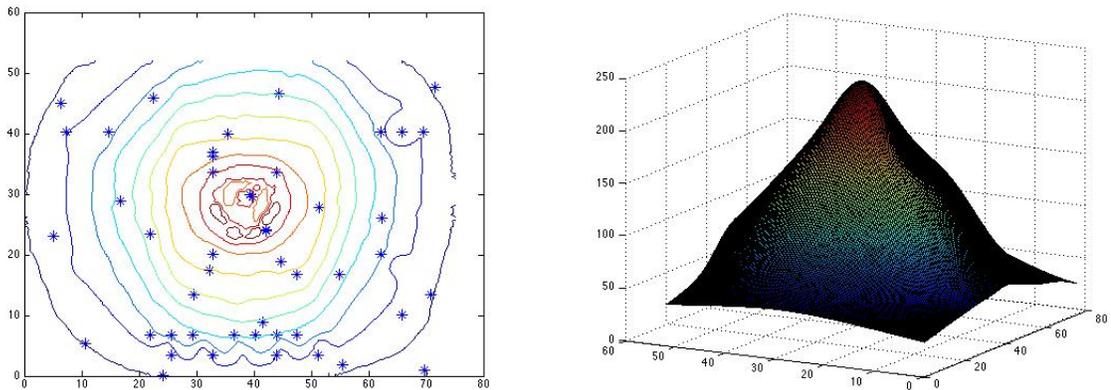


Figura 39: Distribución final de los centros y aproximante con un sólo wok encendido.

En la figura 39 se observa que la zona de los mandos acumula aproximadamente el 25 % del total de los centros y casi un 50 % de los que se han añadido durante la segunda fase.

Las siguientes gráficas presentan el error absoluto cometido por la aproximación en toda la placa:

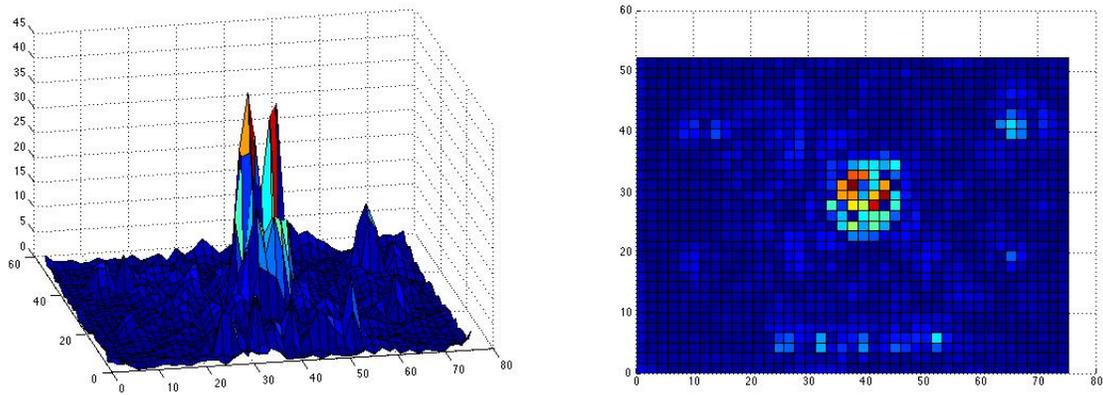


Figura 40: Distribución del error. Wok. RBF multicuadrática inversa. $M = 50$.

Como era de esperar, los mayores errores están concentrados en el wok y, ciñéndonos a la zona de estudio, el mayor error se produce en el área de los mandos.

6.2. Todos los quemadores

En el segundo caso bajo estudio todos los quemadores han estado encendidos durante 55 minutos antes de obtener la siguiente termografía:

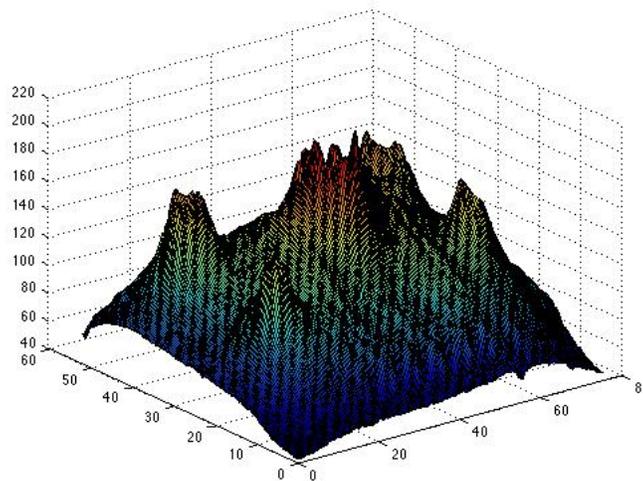


Figura 41: Termografía de la placa con todos los quemadores encendidos.

Para este experimento numérico, tomamos los nodos en una malla uniforme de la que eliminamos los quemadores, obteniendo un total de 770 nodos. En este caso solo realizaremos la segunda

fase del proceso de elección de centros, ya que en el experimento del wok la primera fase fue muy costosa computacionalmente y la mejora obtenida en esta fase con respecto a la segunda fase no fue muy significativa. Como conjunto inicial de centros se toma un centro por quemador y uno en la zona de mandos a los que luego añadiremos los puntos donde estaban situados los termopares.

Tabla 25: Resultados de la elección de centros con todos los quemadores encendidos. RBF multi-cuadráticas inversas. $N = 770$.

M	ECM	Error máximo	ϵ
22	3.95e-02	1.94e+01	5.64e-02
25	3.92e-02	1.12e+01	5.70e-02
30	3.80e-02	8.01e	5.57e-02
35	3.64e-02	7.28e	4.92e-02
40	3.49e-02	6.12e	5.61e-02
45	3.41e-02	5.61e	5.95e-02
50	3.29e-02	5.58	3.50e-02

Aunque en este caso la reducción del ECM ha sido menor del 20%, los resultados son satisfactorios ya que el máximo error absoluto cometido en la aproximación es de aproximadamente $5.5^{\circ}C$. Las siguientes gráficas recogen la distribución final de los centros y el aproximante correspondiente a los mismos.

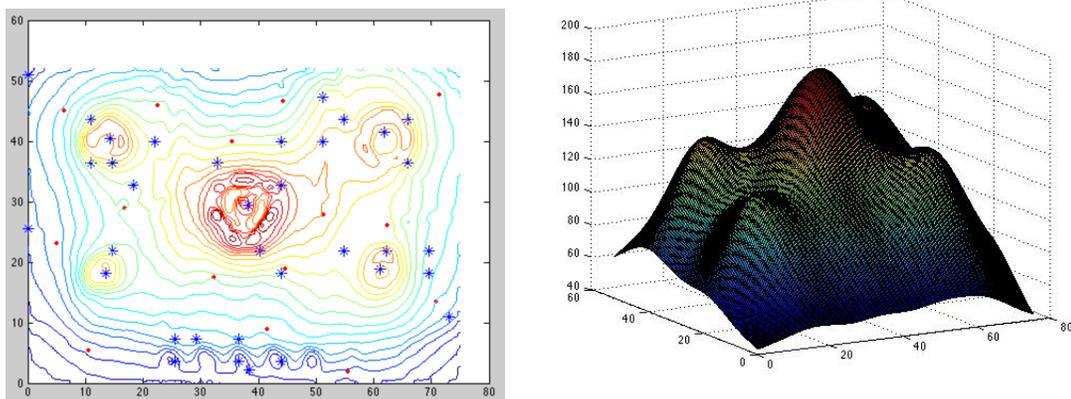


Figura 42: Distribución final de los centros y aproximante. Todos los quemadores. RBF multi-cuadrática inversa. $M = 50$.

Se puede observar en este caso que los centros también se acumulan en la zona de los mandos

y alrededor de los quemadores. Las siguientes gráficas recogen la distribución de los errores absolutos en la placa, observándose de nuevo que, dentro de la zona de interés, el error es mayor en la zona de los mandos.

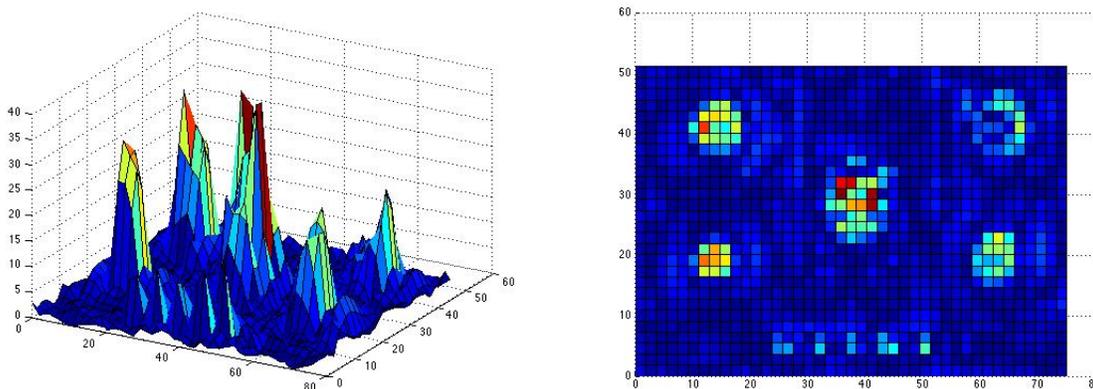


Figura 43: Distribución del error. Todos los quemadores. RBF multicuadrática inversa. $M = 50$.

6.3. Variación del número de nodos

En la sección anterior hemos obtenido una distribución adecuada para 50 centros RBF en cada uno de los casos bajo estudio. Para ello, hemos utilizado la termografía de la placa, que nos permitía conocer la temperatura en cada punto. Sin embargo, mientras la cocina está en funcionamiento solo es posible obtener los datos de la temperatura, por medio de los termopares, en ciertos puntos de la placa. El objetivo de estos últimos experimentos es determinar el número adecuado de termopares que habría que colocar para que el aproximante RBF generado a partir de los 50 centros seleccionados sea suficientemente preciso para el ajuste de la temperatura de la placa.

En cada experimento los nodos se van a situar en una rejilla uniforme. Hay que tener en cuenta que no se pueden colocar sensores dentro del quemador, por lo que eliminaremos esa zona de la malla. Hemos realizado los experimentos con un número N variable de nodos entre 19 y 400. En los experimentos en los que N es mayor que 50 el conjunto de centros también formará parte del conjunto de nodos. De esta forma garantizamos que la matriz de aproximación tenga rango máximo y no es necesaria la regularización en el problema (5.1) (tomamos $\gamma = 0$). A continuación se recogen los resultados del ECM y del error máximo obtenidos, así como las gráficas de los aproximantes y de la distribución de los errores.

Wok central encendido

Tabla 26: Wok central encendido. RBF multicuadrática inversa.

N	ECM	ϵ	Error máximo
19	8.1543e-2	4.7258e-2	2.0071e1
41	4.6468e-2	4.7258e-2	1.8182e1
98	4.4628e-2	2.6985 e-2	1.2918e1
196	4.2654e-2	5.5192e-2	1.4819e1
393	3.2114 e-2	4.6115 e-2	1.4399e1

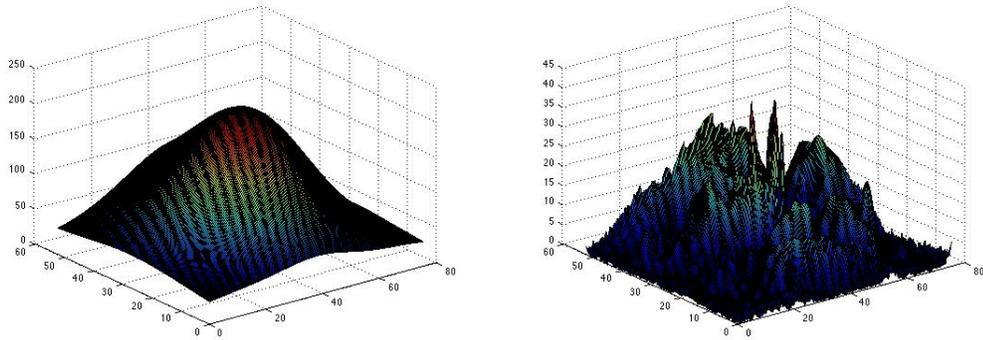


Figura 44: Aproximante y distribución del error. $N = 19$.

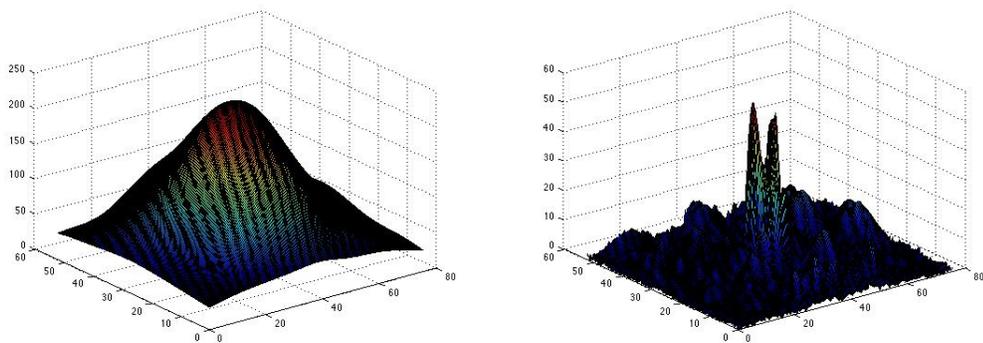


Figura 45: Aproximante y distribución del error. $N = 98$.

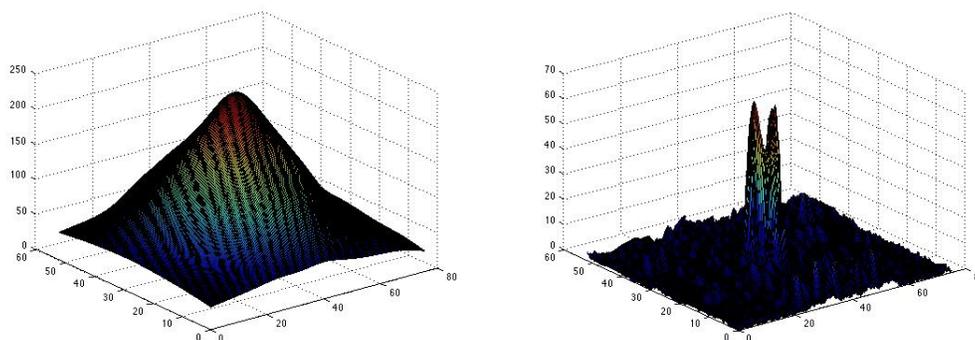


Figura 46: Aproximante y distribución del error. $N = 393$.

Todos los quemadores encendidos

Tabla 27: Resultados con todos los quemadores encendidos. RBF multicuadrática inversa.

N	ECM	ϵ	Error máximo
21	1.4521e-1	3.7597e-2	7.0012e1
40	1.0953e-1	3.7597e-2	5.5392e1
99	5.7526e-2	2.1375 e-1	2.1502e1
200	4.3844e-2	3.7740e-2	2.035e1
391	3.25269e-2	3.7505e-2	2.1692e1

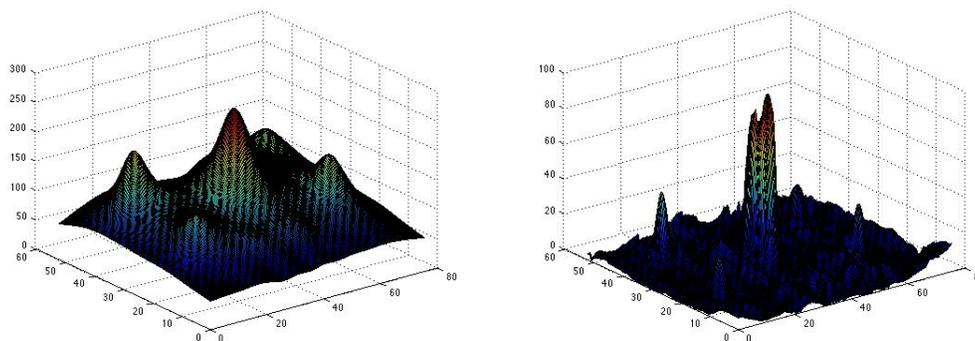


Figura 47: Aproximante y distribución del error. $N = 99$.

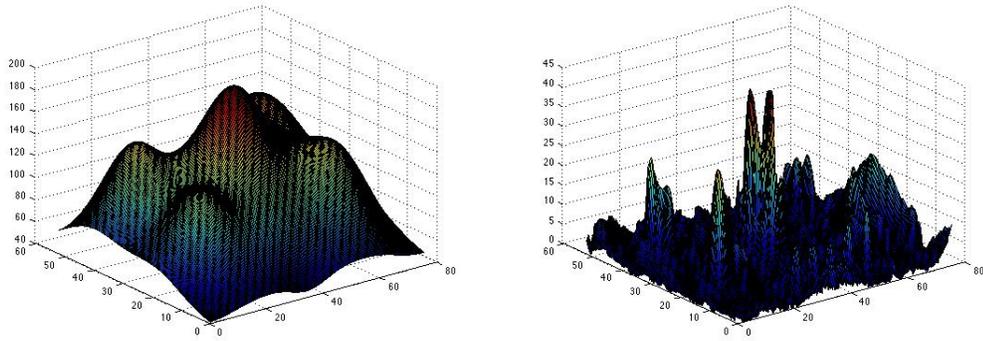


Figura 48: Aproximante y distribución del error. $N = 200$.

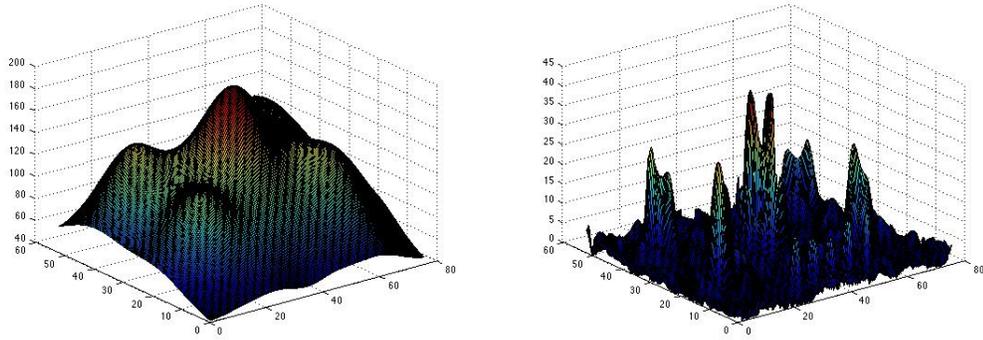


Figura 49: Aproximante y distribución del error. $N = 391$.

Para el caso en que solo está encendido el wok se obtiene una buena aproximación a partir de 98 nodos, mientras que cuando están todos los quemadores encendidos hacen falta al menos 200 nodos para conseguir una aproximación de calidad similar.

Bibliografía

- [1] ALGLIB. Introduction to RBF's. <http://www.alglib.net/interpolation/introductiontorbfs.php>.
- [2] DATTA, B. *Numerical Linear Algebra and Applications*. SIAM, 2010.
- [3] FASSHAUER, G. E. *Meshfree Approximation Methods with MATLAB*. World Scientific, 2007.
- [4] KINCAID, D., AND CHENEY, W. *Análisis numérico: las matemáticas del cálculo científico*. Addison-Wesley, 1994.
- [5] MOLER, C. Professor SVD. The MathWorks News & Notes (2006) http://www.mathworks.com/tagteam/35906_91425v00_clevescorner.pdf.
- [6] MONGILLO, M. Choosing basis functions and shape parameters for radial basis function methods. *SIAM Undergraduate Research Online* 4 (2011), 190–209.
- [7] RIPPA, S. An algorithm for selecting a good value for the parameter c in radial basis function interpolation. *Advances in Computational Mathematics* 11, 2-3 (1999), 193–210.
- [8] SCHABACK, R. A practical guide to radial basis functions. <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.117.3537&rep=rep1&type=pdf>, 2007.
- [9] SCHOENBERG, I. J. Metric spaces and positive definite functions. *Transactions of the American Mathematical Society* 44, 3 (1938), 522–536.
- [10] TREFETHEN, L. N., AND BAU, D. *Numerical Linear Algebra*. SIAM, 1997.