Funzioni definite positive

Abbiamo sempre in mente il problema di interpolazione di una funzione in più variabili. Nelle lezioni precedenti abbiamo visto che sotto certe condizioni esiste un polinomio di riproduzione locale che approssima una data funzione, e nell'ultima lezione abbiamo visto il metodo dei minimi quadrati locali che ci consente di costruire tale approssimante. Tale metodo però, in generale, è un metodo di approssimazione piuttosto che di interpolazione. Quello di cui ci occuperemo, a partire da ora, è di un metodo molto promettente che consente l'interpolazione in un numero arbitrario di dati e per spazi di dimensione arbitraria.

1. Definizioni e proprietà di base

Il problema è sempre quello di interpolare i valori $f_1, \ldots, f_N$ nei siti dati da $X = \{x_1, \ldots, x_N\} \subseteq \mathbb{R}^d$. L'approccio è quello di scrivere l'interpolante come

$$s_{f,X}(x) = \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \Phi(x - x_j),$$

dove $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ è una funzione fissata e i coefficienti $\{\alpha_j\}$ sono determinati dalle condizioni di interpolazione

$$s_{f,X}(x_j) = f_j, \qquad 1 \leq j \leq N.$$

Se per un attimo immaginiamo che Φ sia una funzione a campana centrata nell'origine, allora le $\Phi(\cdot - x_j)$ sono funzioni centrate in x_j. Motivati da questo chiameremo spesso x_j centro e $X = \{x_1, \ldots, x_N\}$ insieme di centri.
Sarebbe carino se Φ potesse essere scelta per tutti i tipi di insiemi di dati, ovvero per ogni numero N e per ogni $X = \{x_1, \ldots, x_N\}$.
Ora le condizioni di interpolazione imposte sulla funzione $s_{f,X}(x)$ ci forniscono la matrice di interpolazione invertibile

$$A_{\Phi,X} := (\Phi(x_j - x_k))_{1 \leq j,k \leq N}$$

relativa al sistema

$$A_{\Phi,X} \cdot \vec{\alpha} = \vec{f}.$$

Per l'esistenza della soluzione risulta desiderabile che la matrice $A_{\Phi,X}$ abbia delle buone proprietà, per esempio che sia definita positiva. La matrice A sarà definita positiva se lo è la funzione Φ, diamo quindi la nozione di funzione definita positiva.

Definizione 1.1. *Una funzione continua* $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ *è detta* ***semi-definita positiva*** *se, per ogni* $N \in \mathbb{N}$, *per ogni insieme di centri a due a due distinti* $X = \{x_1, \ldots, x_N\} \subseteq \mathbb{R}^d$ *e per ogni* $\alpha \in \mathbb{C}^N$, *la forma quadratica*

$$\alpha^T \Phi \, \overline{\alpha} = \sum_{j=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \alpha_j \overline{\alpha_k} \, \Phi \left(x_j - x_k\right)$$

è non negativa. La funzione è detta ***definita positiva*** *se la forma quadratica è positiva per ogni* $\alpha \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$.

Abbiamo dato una definizione generale per funzioni a valori complessi. Il motivo è che questo consente di usare tecniche come la trasformata di Fourier in modo più naturale. Vedremo comunque che per funzioni pari a valori reali è sufficiente indagare la forma quadratica solo per $\alpha \in \mathbb{R}^N$.
Vediamo ora le principali proprietà delle funzioni definite positive:

Teorema 1.1. *Supponiamo* Φ *sia una funzione semi-definita positiva. Allora valgono le seguenti proprietà:*

(1) $\Phi(0) \geq 0$.
(2) $\Phi(-x) = \overline{\Phi(x)}$ *per ogni* $x \in \mathbb{R}^d$.
(3) Φ *è limitata , cioè* $|\Phi(x)| \leq \Phi(0)$ *per ogni* $x \in \mathbb{R}^d$.
(4) $\Phi(0) = 0$ *se e solo se* $\Phi \equiv 0$.
(5) se $\Phi_1, \ldots, \Phi_n$ *sono funzioni semi-definite positive e* $c_j \geq 0$ *per* $1 \leq j \leq n$, *allora* $\Phi := \sum_{j=1}^{n} c_j \Phi_j$ *è ancora semi-definita positiva. Se una delle* Φ_j *è definita positiva e il corrispondente* c_j *è positivo, allora* Φ *è definita positiva.*
(6) Il prodotto tra due funzioni definite positive, è una funzione definita positiva.

Torniamo ora alla questione di funzioni definite positive a valori reali e loro caratterizzazione.

Osservazione 1.1. *Da questo teorema ci è chiaro che una funzione semi-definita positiva è a valori reali se e solo se è pari.*
Infatti, se Φ *semi-definita positiva è a valori reali, cioè* $\Phi = \overline{\Phi}$, *allora per (2)* $\Phi(-x) = \Phi(x)$, *quindi* Φ *è pari. Viceversa, se* Φ *semi-definita positiva è pari, allora* $\Phi(x) = \Phi(-x)$, *e quindi per (2) possiamo concludere* $\Phi(x) = \overline{\Phi(x)}$, *cioè* Φ *è a valori reali.*

Vediamo ora la caratterizzazione per le funzioni definite positive a coefficienti reali, per la quale ci possiamo restringere a vettori di coefficienti reali $\alpha \in \mathbb{R}^N$ nella forma quadratica.

TEOREMA 1.2. *Supponiamo che $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ sia continua. Allora Φ è definita positiva se e solo se Φ è pari e se per ogni $N \in \mathbb{N}$, per ogni $\alpha \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$ e per ogni serie di punti $x_1, \ldots, x_N$ a due a due distinti,*

$$\sum_{j=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \alpha_j \alpha_k \Phi\left(x_j - x_k\right) > 0.$$

DIMOSTRAZIONE. Sia Φ definita positiva, siccome è a valori reali, per il teorema precedente allora è pari. Inoltre soddisfa ovviamente la seconda condizione.
Viceversa, supponiamo che Φ sia pari e soddisfi la seconda condizione. Preso $\alpha_j = a_j + ib_j$ otteniamo

$$\begin{aligned}
&\alpha^T \Phi\, \overline{\alpha} = \sum_{j,k=1}^{N} \alpha_j \overline{\alpha_k}\; \Phi\left(x_j - x_k\right) = \\
&= \sum_{j,k=1}^{N} \left(a_j + ib_j\right)\left(a_k - ib_k\right) \Phi\left(x_j - x_k\right) \\
&= \sum_{j,k=1}^{N} \left(a_j a_k + b_j b_k\right) \Phi\left(x_j - x_k\right) + i \sum_{j,k=1}^{N} \left(a_k b_j - a_j b_k\right) \Phi\left(x_j - x_k\right) \\
&= \sum_{j,k=1}^{N} \alpha_j \alpha_k \Phi\left(x_j - x_k\right) + i \sum_{j,k=1}^{N} a_k b_j \left[\Phi\left(x_j - x_k\right) - \Phi\left(x_k - x_j\right)\right].
\end{aligned}$$

Siccome Φ è pari, la seconda sommatoria si annulla. La prima è positiva per ipotesi e si annulla solo se tutti gli a_j e i b_j sono nulli, quindi Φ è definita positiva. □

2. Caratterizzazione di Bochner

Uno dei risultati più significativi che riguarda le funzioni semidefinite positive è la loro caratterizzazione in termini di trasformate di Fourier. Questo risultato è una delle ragioni per cui si considerano le funzioni definite positive a valori complessi. L'idea che ci sta dietro è facilmente descrivibile.
Supponiamo che $\Phi \in C(\mathbb{R}^d) \cap L_1(\mathbb{R}^d)$ abbia trasformata di Fourier integrabile $\widehat{\Phi} \in L_1(\mathbb{R}^d)$. Allora, per la formula di inversione di Fourier possiamo ricavare Φ dalla sua trasformata di Fourier:

$$\Phi\left(x\right) = \left(2\pi\right)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{\Phi}\left(\omega\right) e^{ix^T \omega} d\omega.$$

Questo significa che la forma quadratica relativa a Φ può essere espressa come segue:

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\alpha_j\overline{\alpha_k}\ \Phi\left(x_j-x_k\right)=\\
&=(2\pi)^{-d/2}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\alpha_j\overline{\alpha_k}\int_{\mathbb{R}^d}\widehat{\Phi}\left(\omega\right)e^{i\omega^T\left(x_j-x_k\right)}d\omega\\
&=(2\pi)^{-d/2}\int_{\mathbb{R}^d}\left(\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\alpha_j\overline{\alpha_k}e^{i\omega^T x_j}e^{-i\omega^T x_k}\right)\widehat{\Phi}\left(\omega\right)d\omega\\
&=(2\pi)^{-d/2}\int_{\mathbb{R}^d}\left(\sum_{j=1}^{N}\alpha_j e^{i\omega^T x_j}\overline{\sum_{k=1}^{N}\alpha_k e^{i\omega^T x_k}}\right)\widehat{\Phi}\left(\omega\right)d\omega\\
&=(2\pi)^{-d/2}\int_{\mathbb{R}^d}\widehat{\Phi}\left(\omega\right)\left|\sum_{j=1}^{N}\alpha_j e^{i\omega^T x_j}\right|^2 d\omega.
\end{aligned}$$

Quindi, se $\widehat{\Phi}$ è non negativa, la funzione Φ è semi-definita positiva.
Nel caso di funzioni integrabili, abbiamo che ogni funzione definita positiva ha una trasformata di Fourier integrabile. Nel caso di funzioni non integrabili ciò non vale. Per una caratterizzazione completa dobbiamo rimpiazzare la misura con densità di Lebesgue $\widehat{\Phi}$ con una più generale misura di Borel μ. Vedremo che questo basta per caratterizzare ogni funzione semi-definita positiva come trasformata di Fourier di tale misura.
Per dimostrare tale caratterizzazione, nota come teorema di Bochner, abbiamo bisogno di due risultati ausiliari. Il primo è una caratterizzazione delle funzioni semi-definite positive come funzioni semi-definite positive *integralmente*.

Proposizione 2.1. *Una funzione continua $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ è semi-definita positiva se e solo se è limitata e soddisfa*

$$\int_{\mathbb{R}^d}\int_{\mathbb{R}^d}\Phi\left(x-y\right)\gamma\left(x\right)\overline{\gamma\left(y\right)}\,dxdy\geq 0$$

per ogni funzione test γ nello spazio di Schwartz S.
(Dove uno spazio di Schwartz è uno spazio funzionale di funzioni che decrescono velocemente, più di un polinomio)

Il secondo risultato importante è una generalizzazione del teorema della rappresentazione di Riesz. Per applicare questo teorema in $\mathbb{R}^d$, non è necessario avere un funzionale lineare limitato. Basta che il funzionale sia limitato solo localmente. Inoltre il funzionale ha bisogno di essere definito solo su funzioni $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Proposizione 2.2. *Supponiamo che* $\lambda : C_0^\infty(\mathbb{R}^d) \to \mathbb{C}$ *sia un funzionale lineare non negativo, cioè* $\lambda(f) \geq 0$ *per ogni* $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ *con* $f \geq 0$. *Allora* λ *può essere esteso a* $C_0(\mathbb{R}^d)$ *e esiste una misura di Borel non negativa* μ *tale che*

$$\lambda(f) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x)\, d\mu(x)$$

per ogni $f \in C_0(\mathbb{R}^d)$.

Dopo questi passi preparatori siamo in grado di formulare il teorema di Bochner.

Teorema(Bochner) 2.1. *Una funzione continua* $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ *è semi-definita positiva se e solo se è la trasformata di Fourier di una misura di Borel* μ *su* $\mathbb{R}^d$ *non negativa e finita, cioè:*

$$\Phi(x) = \widehat{\mu}(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix^T\omega} d\mu(\omega), \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Tenendo sempre a mente il problema di interpolazione, siamo più interessati alle funzioni definite positive piuttosto che a quelle semi-definite positive. Una caratterizzazione completa delle funzioni definite positive porta però a una discussione molto tecnica delle misure di Borel coinvolte. Fortunatamente tutte le funzioni Φ che incontreremo avranno una misura discreta o una misura con densità di Lebesgue. In questa situazione risulterà piuttosto semplice decidere se una funzione semi-definita positiva è anche definita positiva. Vedremo infatti che tutte le funzioni semi-definite positive che hanno una misura con una densità di Lebesgue continua che non sia identicamente nulla, sono definite positive. Deriveremo ora condizioni sufficienti sulla misura μ che ci assicurino che Φ sia definita positiva.

Lemma 2.1. *Sia* $U \subseteq \mathbb{R}^d$ *un aperto. Supponiamo inoltre che* $x_1, \ldots, x_N \in \mathbb{R}^d$ *siano punti a due a due distinti e che* $c \in \mathbb{C}^N$. *Allora, se* $\sum_{j=1}^N c_j e^{-ix_j^T\omega} = 0$ *per ogni* $w \in U$, *ciò implica* $c \equiv 0$ *(ovvero gli esponenziali sono linearmente indipendenti).*

Sapendo ora che gli esponenziali sono linearmente indipendenti possiamo fornire una condizione sufficiente affinchè una funzione sia definita positiva.

Teorema 2.2. *Una funzione semi-definita positiva* Φ *è definita positiva se il supporto della misura* μ *nella rappresentazione*

$$\Phi(x) = \widehat{\mu}(x) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix^T\omega} d\mu(\omega)$$

contiene un sottoinsieme aperto.

Siamo quindi in grado di costruire funzioni definite positive semplicemente scegliendo una opportuna misura. Ciò è ancora più semplice se μ ha densità di Lebesgue.

COROLLARIO 2.1. *Se* $f \in L_1(\mathbb{R}^d)$ *è continua, non negativa e non identicamene nulla, allora*

$$\Phi\left(x\right) := \int_{\mathbb{R}^d} f\left(\omega\right) e^{-ix^T\omega} d\omega, \qquad x \in \mathbb{R}^d,$$

è definita positiva.

DIMOSTRAZIONE. Definiamo, per ogni insieme di Borel B, la misura

$$\mu\left(B\right) = \int_B f\left(x\right) dx.$$

Il supporto di μ è chiaramente uguale al supporto di f. Siccome f è continua, non negativa e non identicamente nulla, il suo supporto deve contenere un punto interno, e quindi una palla aperta. Perciò, per il teorema precedente, la trasformata di Fourier di f, Φ, è definita positiva. $\square$

E' arrivato ora il momento di fare un esempio.

TEOREMA 2.3. *La funzione Gaussiana* $\Phi\left(x\right) = e^{-\alpha\|x\|_2^2}$, $\alpha \geq 0$, *è definita positiva su ogni* $\mathbb{R}^d$.

DIMOSTRAZIONE. Dimostro nel caso unidimensionale. Dimostro che la matrice $[e^{-\alpha(x_i-x_j)^2}]_{1\leq i,j\leq N}$ è definita positiva.
Considero le funzioni $f_i = e^{-\beta(x-x_i)^2}$ e $f_j = e^{-\beta(x-x_j)^2}$ e scrivo

$$\begin{aligned}
\langle f_i, f_j\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta(x-x_i)^2} e^{-\beta(x-x_j)^2} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta\left(x^2-2xx_i+x_i^2+x^2-2xx_j+x_j^2\right)} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta\left(x^2-2x\left(\frac{x_i+x_j}{2}\right)+\frac{x_i^2+x_j^2}{2}\right)} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta\left(x^2-2x\left(\frac{x_i+x_j}{2}\right)+\left(\frac{x_i+x_j}{2}\right)^2-\left(\frac{x_i+x_j}{2}\right)^2+\frac{x_i^2+x_j^2}{2}\right)} dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta\left(x-\frac{x_i+x_j}{2}\right)^2} e^{-2\beta\left(\frac{x_i^2+x_j^2}{2}-\frac{x_i^2+x_j^2+2x_ix_j}{4}\right)} dx
\end{aligned}$$

$$= e^{-\frac{\beta}{2}\left(x_i^2+x_j^2-2x_ix_j\right)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta\left(x-\frac{x_i+x_j}{2}\right)^2} dx \tag{1}$$

$$= e^{-\frac{\beta}{2}(x_i-x_j)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta\left(x-\frac{x_i+x_j}{2}\right)^2} dx$$

$$= c_\beta e^{-\frac{\beta}{2}(x_i-x_j)^2}.$$

Quindi, per $\beta = 2\alpha$, ho:

$$[\langle f_i, f_j\rangle]_{1\le i,j\le N} = c_\beta [e^{-\alpha(x_i-x_j)^2}]_{1\le i,j\le N}$$

Ora, $[\langle f_i, f_j\rangle]_{1\le i,j\le N}$ è una matrice di Gram. Tale matrice è sempre semidefinita positiva, ed è definita positiva se le f_i sono indipendenti. Gli esponenziali $e^{-\beta(x-x_i)^2}$ sono indipendenti, quindi $[e^{-\alpha(x_i-x_j)^2}]_{1\le i,j\le N}$ è definita positiva. □

Lemma 2.2. *Gli esponenziali $\{e^{-\alpha\|x-x_i\|_2^2}\}_{i=1}^n$ sono linearmente indipendenti, per $\alpha \neq 0$ e x_i distinti.*

Dimostrazione. Ciò equivale a dimostrare che $\{e^{\beta x^T x_i}\}_{i=1}^n$ sono indipendenti, con $\beta = 2\alpha$. Infatti:

$$\sum_{i=1}^n a_i e^{-\alpha\|x-x_i\|_2^2} = \sum_{i=1}^n a_i e^{-\alpha\left(\|x\|_2^2 - 2x^T x_i + \|x_i\|_2^2\right)}$$

$$= e^{-\alpha\|x\|_2^2} \sum_{i=1}^n \left(a_i e^{-\alpha\|x_i\|_2^2}\right) e^{2\alpha x^T x_i}.$$

Dimostro per induzione. Per $n = 1$ non c'è niente da dimostrare. Supponiamo che valga per $n-1$. Per assurdo sia $a \in \mathbb{R}^n$ tale che $\sum_{i=1}^n a_i e^{\beta x^T x_i} = 0$, con $a \neq 0$. Possiamo assumere senza perdita di generalità che $a_1 \neq 0$. Quindi:

$$a_1 e^{\beta x^T x_1} + \sum_{i=2}^n a_i e^{\beta x^T x_i} = 0$$

$$\Leftrightarrow \; e^{\beta x^T x_1}\left(a_1 + \sum_{i=2}^n a_i e^{\beta x^T (x_i - x_1)}\right) = 0$$

$$\Leftrightarrow \; a_1 + \sum_{i=2}^n a_i e^{\beta x^T (x_i - x_1)} = 0$$

Per $\omega \in \mathbb{R}^n$, prendiamo la derivata direzionale D_ω e otteniamo

$$\sum_{i=2}^{n} a_i \beta \omega^T (x_i - x_1) e^{\beta x^T (x_i - x_1)} = 0$$

Per ipotesi induttiva abbiamo che $a_i \beta \omega^T (x_i - x_1) = 0$ per $i = 2, \ldots, n$, ovvero $a_j = 0$ per $i = 2, \ldots, n$ dato che i punti a_i sono distinti. Ma quindi anche $a_1 = 0$, il che porta a una contraddizione. $\square$

Osservazione 2.1. *La Gaussiana è definita positiva per ogni parametro $\alpha \geq 0$. Tuttavia la scelta corretta di α in un particolare problema di interpolazione risulta cruciale.*
Da una parte, se α è troppo grande, la Gaussiana acquista sempre più pendenza e la ricostruzione della superficie risulta piuttosto grossolana; la matrice di interpolazione però è all'incirca diagonale ed ha un numero di condizionamento molto basso. Al contrario, un valore basso di α, porta a una migliore ricostruzione della superficie, ma corrisponde a un valore molto elevato del numero di condizionamento della matrice.

Ora, il corollario risulta utile quando dobbiamo costruire funzioni definite positive. Se invece la funzione Φ è data, potrebbe essere utile avere uno strumento per vedere se è definita positiva.

Teorema 2.4. *Supponiamo che $\Phi \in L_1(\mathbb{R}^d)$ sia una funzione continua. Allora Φ è definita positiva se e solo se Φ è limitata e la sua trasformata di Fourier è non negativa e non identicamente nulla.*

Corollario 2.2. *Se $\Phi \in C(\mathbb{R}^d) \cap L_1(\mathbb{R}^d)$ è definita positiva, allora la sua trasformata di Fourier non negativa sta in $L_1(\mathbb{R}^d)$.*

Vediamo ora un altro esempio di classe di funzioni definite positive, precisamente le funzioni multiquadratiche inverse. La loro trasformata di Fourier coinvolge le funzioni di Bessel modificate K_ν.

Teorema 2.5. *La funzione $\Phi(x) = \left(c^2 + \|x\|_2^2\right)^{-\beta}$, $x \in \mathbb{R}^d$, con $c > 0$ e $\beta > d/2$ è definita positiva. La sua trasformata di Fourier è:*

$$\widehat{\Phi}(\omega) = \frac{2^{1-\beta}}{\Gamma(\beta)} \left(\frac{\|\omega\|_2}{c}\right)^{\beta - d/2} K_{d/2-\beta}\left(c \|\omega\|_2\right).$$

Enunciamo ora una importante proprieta delle funzioni definite positive riguardante la loro regolarità/continuità.

Teorema 2.6. *Supponiamo che Φ sia una funzione definita positiva e che $\Phi \in C^{2k}$ in un qualche intorno dell'origine. Allora $\Phi \in C^{2k}$ dappertutto.*

3. Funzioni radiali

Richiamiamo ora il concetto di funzione radiale.

DEFINIZIONE 3.1. *Una funzione* $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ *si dice* ***radiale*** *se esiste una funzione* $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ *tale che* $\Phi(x) = \phi(\|x\|_2)$ *per ogni* $x \in \mathbb{R}^d$.

La Gaussiana e la multiquadratica inversa sono esempi di funzioni radiali. Una funzione radiale ha il vantaggio di avere una struttura semplice. Forniamo ora una nuova definizione di funzioni definite positive che coinvolge le funzioni radiali.

DEFINIZIONE 3.2. *La funzione in una variabile* $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ *si dice* ***definita positiva*** *su* $\mathbb{R}^d$ *se la corrispondente funzione in più variabili* $\Phi(x) := \phi(\|x\|_2)$, $x \in \mathbb{R}^d$, *è definita positiva.*

La regolarità della funzione in più variabili Φ è determinata dalla regolarità dell'estensione pari $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ della funzione in una variabile $\phi : [0, \infty)$. Ogni funzione radiale è ovviamente pari. Quindi sappiamo che per il teorema 1.2 possiamo restringerci ai coefficienti α reali nelle forma quadratica.

LEMMA 3.1. *Supponiamo che la funzione in una variabile* ϕ *sia definita positiva su* $\mathbb{R}^d$. *Allora* ϕ *è definita positiva su* $\mathbb{R}^k$ *per ogni* $k \leq d$.

La trasformata di Fourier di una funzione radiale, è ancora una funzione radiale e quindi può essere espressa come una funzione in una variabile. Quindi la caratterizzazione di Bochner può essere ridotta in insiemi unidimensionali. Per esempio, la versione radiale del teorema 2.4 diventa:

TEOREMA 3.1. *Supponiamo che* $\phi \in C[0, \infty)$ *sia tale che* $r \mapsto r^{d-1}\phi(r) \in L_1[0, \infty)$. *Allora* ϕ *è definita positiva su* $\mathbb{R}^d$ *se e solo se è limitata e l'operatore*

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

è non negativo e non identicamente nullo.
(dove J_ν *è la funzione di Bessel di ordine* $\nu \in \mathbb{C}$, *definita da*

$$J_\nu(z) := \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (z/2)^{2m+\nu}}{m!\,\Gamma(\nu + m + 1)},$$

per $z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$.*)*

OSSERVAZIONE 3.1. *Notiamo che l'operatore* $\mathcal{F}_d$ *definito da* $\mathcal{F}_d\, \phi = \widehat{\Phi}$ *agisce sulle funzioni in una variabile. Lavorando sulle funzioni in* *una variabile possiamo fare la maggiorparte della nostra analisi in uno spazio unidimensionale, rendendo tutto più semplice. Basterà mostrare che la funzione $\mathcal{F}_d \phi$ è non negativa invece che mostrare che la funzione in più variabili $\widehat{\Phi}$ è non negativa.*

Mostriamo ora un altro esempio di funzione definita positiva. La funzione che analizzeremo è diversa da quelle considerate finora. Infatti ha supporto compatto e non è definita positiva su ogni $\mathbb{R}^d$, come invece accadeva per la Gaussiana e la multiquadratica inversa. Vedremo che queste due proprietà non si presentano insieme per caso, anzi, le prima implica la seconda.

LEMMA 3.2. *Considero le funzioni* $f_0(r) = 1 - \cos(r)$ *e*

$$f_n(r) = \int_0^r f_0(t) f_{n-1}(r-t)\, dt$$

per $n \geq 1$. *Sia*

$$B_n = \frac{2^{n+1/2} n! (n+1)!}{\sqrt{\pi}}.$$

Allora f_n *si può scrivere come:*

$$\int_0^r (r-t)^{n+1} t^{n+1/2} J_{n-1/2}(t)\, dt = B_n f_n(r).$$

L'integrale che compare in questa formula rappresenta la trasformata di Fourier di una funzione radiale. E sappiamo che tale trasformata di Fourier è non negativa e non identicamente nulla. Prima di fornire la formula per ϕ introduciamo la funzione di cut-off $(\cdot)_+$, definita da

$$(x)_+ := \begin{cases} x & per\ x \geq 0 \\ 0 & per\ x < 0, \end{cases} \tag{2}$$

e la notazione $\lfloor x \rfloor$, che denota il più grande numero intero inferiore o uguale a x.

TEOREMA 3.2. *La funzione troncata di potenza:*

$$\phi_l(r) = (1-r)_+^l$$

è definita positiva su $\mathbb{R}^d$, *per* $l \in \mathbb{N}$ *e* $l \geq \lfloor d/2 \rfloor + 1$.

Un modo generale per costruire funzioni definite positive è di integrare una funzione definita positiva fissata, rispetto a una misura non negativa. E' esattamente questo il modo in cui agisce la trasformata di Fourier nella caratterizzazione di Bochner.

TEOREMA 3.3. *Supponiamo che la funzione continua* $\phi : [0, \infty) \to \mathbb{R}$ *sia data da*

$$\phi(r) := \int_0^\infty (1 - rt)_+^{k-1} f(t)\, dt \ ,$$

dove $f \in C[0, \infty)$ *è non negativa e non identicamente nulla. Allora* ϕ *è definita positiva su* $\mathbb{R}^d$ *se* $k \geq \lfloor d/2 \rfloor + 2$.

Una funzione ϕ di questa forma sicuramente appartiene a C^{k-2} e le derivarte soddisfano $(-1)^l \phi^{(l)}(r) \geq 0$ per ogni $0 \leq l \leq k-2$. Tali funzioni sono dette **funzione monotone multiple**.

DEFINIZIONE 3.3. *Supponiamo che* $k \in \mathbb{N}$ *soddisfi* $k \geq 2$. *Una funzione* $\phi : (0, \infty) \to \mathbb{R}$ *è detta* ***k-volte monotona*** *se* $(-1)^l \phi^l$ *è non negativa, non crescente e convessa. Se* $k = 1$ *richiediamo che* ϕ *sia non negativa e non crescente.*

Ora, la rappresentazione di ϕ nel precedente teorema non è abbastanza generale da caratterizzare tutte le funzione k-volte monotone. La soluzione è ancora quella di considerare una misura più generale.

TEOREMA 3.4. *Una condizione necessaria e sufficiente perchè* $\phi : (0, \infty) \to \mathbb{R}$ *sia k-volte monotona è che* ϕ *sia della forma*

$$\phi(r) = \int_0^\infty (1 - rt)_+^{k-1} d\gamma(t),$$

dove γ *è una misura di Borel non negativa.*

4. Funzioni, nuclei e altre norme

La nostra discussione sulle funzioni definite positive è stata motivata dal problema di interpolazione iniziale. La scelta di queste funzioni particolari è stata conveniente per la nostra analisi, in quanto abbiamo ristretto l'intero problema alla discussione della singola funzione Φ. Quello usato finora non è però ovviamente l'unico approccio. Un altro approccio sarebbe quello di partire da funzione $\Phi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ e cercare di costruire un interpolante della forma

$$s_{f,X} = \sum_{j=1}^N \alpha_j \Phi(\cdot, x_j).$$

Se siamo interessati solo a insiemi di centri $X = \{x_1, \ldots, x_N\}$ che sono contenuti in un certo sottoinsieme Ω di $\mathbb{R}^d$, allora basta che consideriamo $\Phi : \Omega \times \Omega \to \mathbb{C}$. Per differenziarci dall'approccio precedente chiameremo tale Φ un **nucleo** piuttosto che una funzione.

Definizione 4.1. *Un nucleo continuo* $\Phi : \Omega \times \Omega \to \mathbb{C}$ *è detto* ***definito positivo*** *su* $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ *se per ogni* $N \in \mathbb{N}$*, per ogni insieme di punti a due a due distinti* $X = \{x_1, \ldots, x_N\} \subseteq \Omega$ *e per ogni* $\alpha \in \mathbb{C}^N \setminus 0$ *abbiamo*

$$\alpha^T \Phi \, \overline{\alpha} = \sum_{j=1}^{N} \sum_{k=1}^{N} \alpha_j \overline{\alpha_k} \, \Phi\left(x_j, x_k\right) > 0.$$

Osservazione 4.1. *Tale definizione non è del tutto precisa in quanto non abbiamo specificato l'insieme* Ω*. Se tale insieme fosse finito potrebbe essere impossibile trovare per ogni* $N \in \mathbb{N}$ *un insieme* X *di punti a due a due distinti. In tale situazione dovranno essere considerati solo quegli* N *che consentono di poter scegliere* N *punti a due a due distinti.*

Le funzioni radiali di base rientrano in questo insieme più generale di funzioni, i nuclei, se poniamo $\Phi\left(x, y\right) := \phi\left(\|x-y\|_2\right)$ che definisce un nucleo a valori reali. Molti dei nuclei che incontreremo saranno radiali, ma possiamo anche usare il prodotto tensoriale per creare funzioni definite positive in più variabili da funzioni definite positive in una variabile.

Proposizione 4.1. *Supponiamo che* $\phi_1, \ldots, \phi_d$ *siano funzioni definite positive e integrabili su* $\mathbb{R}$*. Allora*

$$\Phi\left(x\right) := \phi_1\left(x_1\right) \cdots \phi_d\left(x_d\right), \qquad x = \left(x_1, \ldots, x_d\right)^T \in \mathbb{R}^d,$$

è una funzione definita positiva su $\mathbb{R}^d$*.*

Un motivo per considerare le funzioni radiali è che permettono una computazione più semplice. Potremmo decidere di investigare anche le funzioni l_p-radiali, cioè le funzioni $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ della forma $\Phi\left(x\right) = \phi(\|x\|_p)$, $x \in \mathbb{R}^d$. In realtà queste funzioni non hanno giocato un ruolo notevole nell'interpolazione con funzioni radiali, quindi non le discuteremo in dettaglio. Ciò nonostante, esistono applicazioni che necessitano di funzioni radiali in questa forma particolare. In questa situazione è anche possibile caratterizzare tutte le funzioni semi-definite positive.

Teorema 4.1. *Una funzione* $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ *definita da* $\Phi\left(x\right) = \phi(\|x\|_1)$*,* $x \in \mathbb{R}^d$*, è semi-definita positiva se e solo se esiste una misura di Borel finita* α *su* $[0, \infty)$ *tale che*

$$\phi\left(r\right) = \int_0^\infty \phi_0\left(rt\right) d\alpha(t),$$

dove ϕ_0 *è data da:*

$$\phi_0\left(r\right)=\frac{2^{d/2}\Gamma^2\left(d/2\right)}{\sqrt{\pi}\Gamma((d-1)/2)}r^{-(d-2)/2}\int_0^\infty(t^2-1)^{(d-3)/2}t^{-(3d-4)/2}J_{(d-2)/2}\left(rt\right)dt.$$