arXiv:2602.06284v1 [math.NA] 6 Feb 2026

几何核插值与回归

PATRICK GUIDOTTI

Abstract. 利用核插值的变分解释，我们展示了插值与回归之间的直接联系，其中插值是回归的一种极限情形。将这一框架应用于点云或光滑流形（尤其是超曲面）的采样点时，我们说明了如何使用基于核的（近似）水平集函数（通常为定义函数）对光滑超曲面的切平面、主曲率等基本几何量进行数值计算。对于点云，该方法会生成一个插值超曲面；当点云是底层流形的采样点时，这个超曲面就是对底层流形的近似。我们还说明了如何按照基于核的无网格方法的思路，利用所得几何量对曲面梯度或拉普拉斯-贝尔特拉米算子等几何算子进行数值近似或计算。基于核的插值可能会有严重的病态问题，尤其是在使用光滑核时；而回归近似提供了一种自然的正则化方法，在处理受误差或噪声影响的几何数据或函数数据时也相当有用。

1. Introduction

核方法在插值理论中发挥着重要作用，因为它们巧妙地弥合了无限维函数空间与其有限维近似之间的鸿沟。下文将着重阐述核插值的优化视角，以更精确地说明这一点。核方法是有坚实理论基础的无网格方法 [10, 34]。它们既可用于插值，也可用于多种其他用途，从微分方程和（初始）边值问题的数值求解，到分类和统计学习[28]。我们将简要讨论与高斯过程回归的一项特别重要的联系，因为它为正则化的、基于核的“准”插值提供了另一种理论依据，而这种插值在处理含噪数据时很有用。

据我们所知，本文的主要贡献在于首次实现并进一步利用了这样一个事实：核方法（以及相关的回归方法）可以直接用于构造超曲面（或更一般的子流形）的可行“定义”（水平集）函数，进而直接获得对其几何属性（法向量和曲率）的全局（可局部化）插值；所需输入仅为这些曲面上的点的样本（点云），且样本不必均匀。借助这些结果，还可以按照无网格方法的思路，仅凭定义在非结构化（采样）点云上的函数值，稳定地计算函数的几何算子。点云（样本）被视为一种离散嵌入，而将核方法与以环境空间坐标表示的公式相结合，则可得到外在坐标下的数值离散化。换言之，可以直接从点云计算几何量和算子，并将其应用于定义在点云上的函数。流形上曲率和微分算子的近似计算与应用数学及数值分析密切相关，因为它们可直接用于数值求解各类自然的流形上的偏微分方程。不过，这项工作在计算机图形学和视觉领域也发挥着重要作用（[21, 31, 23]）。几何算子也可用于处理含噪或受损的样本。沿袭最初在全空间背景下开创的思路，例如可以通过平均曲率法向运动对（曲面）网格进行去噪（见 [8]）。

Key words and phrases. 基于核的插值与回归、点云插值与分析、点云上的函数与算子。

本文采用的方法处理受损或含噪点云时，无需显式演化含噪样本，因为去噪是隐式且自动完成的：产生近似插值或回归结果的正则化，会使近似插值函数的等值集更加光滑。除去噪之外，在应用中获取几何信息也很有价值。这类应用包括网格简化（[14, 18]）、曲面建模 [24], 以及网格光顺 [6], ，其中采用了将坐标表示为拉普拉斯-贝尔特拉米扩散的形式。其他应用还包括曲面重建 [2], 、形状识别或配准 [15], 、皮层形态学和器官形状分析（例如见 [11, 7, 29]），等等。值得一提的是，与文献中的常见做法相反 [4, 34, 10, 27], ，我们直接使用点云本身，不额外添加两层位于曲面两侧、沿法向量和反法向量方向与曲面保持固定距离的点（这需要额外掌握法向量信息，还会引入影响方法精度的其他参数）。最后，该方法是无网格的，因此无需对所关注的曲面进行复杂的结构化表示；事实上，在光滑情形下，即使离散化或采样点不密集或不规则，该方法仍然适用，正如最后一节将展示的那样。

本文提出的分析带来了一些新见解，同时也整合了核插值和径向基函数文献（包括其在偏微分方程中的应用）、曲线和曲面的重建、表示与处理方面的可视化应用，以及统计文献中已有的诸多观察结果。

早在 [13] 中就已指出，正定全空间核 $K : \mathrm{R}^d \times \mathrm{R}^d \to \mathrm{R}$可用于对定义在嵌入流形 $\mathcal{M} \subset \mathrm{R}^d$上的函数进行插值，而这些流形不一定具有余维数一。 [27] 展示了如何成功运用径向基函数计算曲面上偏微分方程的数值解。 [34], 也讨论了将核插值用于散乱数据，其中还全面论述了正核、核插值理论、逼近结果等诸多内容。最后， [32] 中提出的基于样条的回归也利用了通用核方法所提供的结构与框架，尽管其形式较为具体； [4] 则以与本文类似的方式，利用该方法处理含噪曲面数据。我们将在后续章节中补充更多细节。此外，这项工作还与流形学习存在天然联系；关于这一方面的深入讨论，请参阅 [17] 。

2. Kernel Interpolation

关于核方法的全面介绍，读者可参阅文献 [33, 10] ；此处我们仅作简要介绍，旨在揭示引言中所述几何应用背后的见解。

定义 2.1。 至少连续的核 $K : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 称为正定 ，当且仅当矩阵

$$K(\mathbb{X}, \mathbb{X}) = [K(x_j - x_k)]_{1 \leqslant j,k \leqslant |\mathbb{X}|} \in \mathbb{R}^{|\mathbb{X}| \times |\mathbb{X}|}$$

对于任意选取的一组$\mathbb{X} = \{x^1, \dots, x^{|\mathbb{X}|}\}$ 包含 $|\mathbb{X}| < \infty$ 个互不相同的点，该矩阵均为对称正定。

这样便可以将 $\big\{K(\cdot - x_k) \,\big|\, k = 1, \dots, |\mathrm{X}|\big\}$ 用作“基函数”，来处理如下插值问题：求一个函数 f: $\mathrm{R}^d \to \mathrm{R}$，使其满足 $f(x^j) = y^j \in \mathrm{R}$（对 $j = 1, \dots, |\mathrm{X}|$而言），简写为 $f(\mathrm{X}) = \mathrm{Y}$。事实上，相应的方程组形式为

$$\Big(\sum_{k=1}^{|\mathbb{X}|} K(\cdot - x^k)\lambda_k\Big)\Big|_{\mathbb{X}} = K(\mathbb{X}, \mathbb{X})\Lambda = \mathbb{Y}$$

只要 K 是正定的，该方程组就有解。由此便可得到一个处处有定义的插值函数

$$u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} = K(\cdot,\mathbb{X})K(\mathbb{X},\mathbb{X})^{-1}\mathbb{Y}. \tag{2.1}$$

该方法之所以实用且强大，是因为可以为 K关联一个由函数 $\mathcal{H}_K$ 构成的无限维希尔伯特空间，即所谓的再生核希尔伯特空间（通常称为原生空间），它具有一个显著的性质：

$$u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} = \operatorname{argmin}_{u(\mathbb{X})=\mathbb{Y}} E_0(u),\ E_0(u) = \frac{1}{2}\|u\|^2_{\mathcal{H}_K}. \tag{2.2}$$

希尔伯特空间 $\mathcal{H}_K$ 是有限线性组合 $K(\cdot,\ \mathrm{X})\alpha = \sum_{k=1}^{|\mathbb{X}|}\alpha_k K(\cdot - x^k)$ 的完备化，其范数定义为

$$\big(K(\cdot,\mathbb{X}_1)\alpha^1\big|K(\cdot,\mathbb{X}_2)\alpha^2\big) = (\tilde{\alpha}^1)^\top K(\mathbb{X},\mathbb{X})\tilde{\alpha}^2,$$

其中 $\mathrm{X} = \mathrm{X}_1 \cup \mathrm{X}_2$，且 $\tilde{\alpha}_i \in \mathrm{R}^{|\mathbb{X}|}$是向量 $\alpha_i \in \mathrm{R}^{|\mathbb{X}_i|}$ 的平凡扩展：将对应于 $\mathrm{X}_i\backslash\mathrm{X}j$ $(j \neq i)$ 的缺失分量设为零，其中 $i = 1,\ 2$。

注释 2.2。 *(a)* 极小化函数具有形式 $K(\cdot,\ \mathbb{X})\Lambda$，其中某个 $\Lambda \in \mathbb{R}^{|\mathbb{X}|}$，这一事实在应用领域的文献中称为表示定理。

（*b*）再生核希尔伯特空间（*RKHS*）这一名称的合理性，源于其核心性质：

$$\int K(x-y)u(y)\,dy = u(x),\ x \in \mathbb{R}^d,$$

对每个 $u \in \mathcal{H}_K$。若将 u 替换为核的平移函数，积分便会还原出核本身。该公式还表明 $\delta_x \in \mathcal{H}_K^*$。

为了介绍所提出的扩展，我们现在反其道而行之，从优化问题 (2.2) 入手；自然地，我们可以考虑一个与之密切相关的问题：

$$\operatorname{argmin}_{u\in\mathcal{H}_K}\frac{1}{2}\left\{\|u\|^2_{\mathcal{H}_K} + \frac{1}{\alpha}|u(\mathbb{X}) - \mathbb{Y}|^2\right\} = \operatorname{argmin}_{u\in\mathcal{H}_K} E_\alpha(u) \tag{2.3}$$

对于 $\alpha > 0$。可以将问题 (2.2) 看作纯插值问题，而将 (2.3) 看作近似插值或回归问题。关于这些问题，我们有以下基本结果。

命题 2.3。 优化问题 (2.3)、 $\alpha > 0$ 和 (2.2) 均存在唯一极小化函数$u^\alpha_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}} \in \mathcal{H}_K$。对于 $\alpha > 0$，极小化函数 $u^\alpha_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}}$ 是方程的一个弱解

$$\mathcal{A}_K u = \frac{1}{\alpha}[\mathbb{Y} - u(\mathbb{X})]^\top\delta_{\mathbb{X}} = \frac{1}{\alpha}\sum_{k=1}^{|\mathbb{X}|}[y^k - u(x^k)]\delta_{x^k}, \tag{2.4}$$

即 $\mathcal{H}_K^*$中方程的一个解。若 $\alpha = 0$，则有

$$\mathcal{A}_K u^0_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} = \Lambda^\top\delta_{\mathbb{X}} = \sum_{k=1}^{|\mathbb{X}|}\lambda_k\delta_{x^k}$$

对某个拉格朗日乘子 $\Lambda \in \mathbb{R}^{|\mathbb{X}|}$。算子 $\mathcal{A}_K$ 由恒等式$(u|\varphi)_{\mathcal{H}_K} = \langle\mathcal{A}_K u,\ \varphi\rangle_{\mathcal{H}_K^*,\ \mathcal{H}_K}$对 $u,\ \varphi \in \mathcal{H}_K$成立来定义，即它与黎斯同构一致。系数向量 Λ 由增广拉格朗日函数 $E_0(u) - \Lambda^\top\big(u(\mathbb{X}) - \mathbb{Y}\big)$得到。

证明。 由于这些泛函是凸的，存在性和唯一性可直接得出（对于 $\alpha = 0$，如前文所述，这一点已为人所知）。沿着满足 $\varphi(\mathrm{X}) = 0$ 的函数 $\varphi \in \mathcal{H}_K$ 的方向取变分，可得 $\mathcal{A}_K u^0_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}} \in N^\perp{}_{\mathbb{X}}$，其中 $N_{\mathbb{X}} = \big\{\varphi \in \mathcal{H}_K\,\big|\,\varphi(\mathrm{X}) = 0\big\},$，由此得到表示公式。也可以对增广拉格朗日函数中的 u 变量取变分，得到

$$0 = (u|\varphi)_{\mathcal{H}_K} - \Lambda^\top\varphi(\mathbb{X}) = \langle\mathcal{A}_K u - \Lambda^\top\delta_{\mathbb{X}},\varphi\rangle,\ \varphi \in \mathcal{H}_K.$$

对 E_α、 $\alpha>0$ 取变分，可得

$$0=(u|\varphi)_{\mathcal{H}_K}+\frac{1}{\alpha}\big(u(\mathbb{X})-\mathbb{Y}\big)\cdot\varphi(\mathbb{X})=\big\langle\mathcal{A}_Ku+\frac{1}{\alpha}(u(\mathbb{X})-\mathbb{Y})^\top\delta_{\mathbb{X}},\varphi\big\rangle,\ \varphi\in\mathcal{H}_K,$$

这就是所需的弱方程。 □

注 2.4. 该恒等式

$$\big(\mathcal{A}_K^{-1}\delta_x\big)(\tilde{x})=\big(\mathcal{A}_K^{-1}\delta_x|k(\cdot,\tilde{x})\big)_{\mathcal{H}_K}=\big\langle\mathcal{A}_K\mathcal{A}_K^{-1}\delta_x,k(\cdot,\tilde{x})\big\rangle=k(x,\tilde{x})$$

将该核识别为算子 $\mathcal{A}_K$ 的基本解，从而得到试探形式

$$u=\Lambda^\top\mathcal{A}_K^{-1}\delta_{\mathbb{X}}=K(\cdot,\mathbb{X})\Lambda,$$

以及方程 $\mathbb{Y}=u(\mathbb{X})=K(\mathbb{X},\mathbb{X})\Lambda$。

注 2.5. 拉普拉斯核 $L(x)=e^{-|x|},\ x\in\mathbb{R}^d$ 是算子$c_d(1-4\pi^2\Delta)^{\frac{d+1}{2}}$对 $c_d=\frac{\pi^{\frac{d+1}{2}}}{\Gamma(d+1)}$ 的基本解，因此是正定核（根据傅里叶变换对正定性的刻画，即得益于 *Bochner* 定理，参见例如 [34]），其原生空间为 $\mathrm{H}^{\frac{d+1}{2}}(\mathbb{R}^d)$。它是一个低正则性的核，属于一类称为 *Mat´ern* 核函数 [22] 的核函数族，该族还包括正则性越来越高的核函数。

证明。例如，可以根据 [1] 中关于贝塞尔势的结果推导得出。 . □

推论 2.6。 *(2.2)* 的极小化函数$u_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}}$ 具有如下形式

$$u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}=K(\cdot,\mathbb{X})K(\mathbb{X},\mathbb{X})^{-1}\mathbb{Y}.$$

The 试探形式 $u^\alpha_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}}=K(\cdot,\mathbb{X})\Lambda$ 也可用于 *(2.3)* 的极小化函数，并得到

$$\Lambda=(\alpha+K(\mathbb{X},\mathbb{X})^{-1}\mathbb{Y}.$$

证明。 将试探形式代入$u^\alpha_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}}$ 所满足的方程，得到

$$\Lambda^\top\delta_{\mathbb{X}}+\frac{1}{\alpha}[K(\cdot,\mathbb{X})\Lambda]^\top\delta_{\mathbb{X}}=\Lambda^\top\delta_{\mathbb{X}}+\frac{1}{\alpha}[K(\mathbb{X},\mathbb{X})\Lambda]^\top\delta_{\mathbb{X}}=\frac{1}{\alpha}\mathbb{Y}^\top\delta_{\mathbb{X}},$$

由不同点处求值的线性无关性可知,

$$\alpha\Lambda+K(\mathbb{X},\mathbb{X})\Lambda=\mathbb{Y},$$

正如所声称的。 □

请注意，上述结果表明，在这一特定设置下，可以将确定无限维问题的解归结为求解一个有限矩阵问题。

注 2.7。 [17] 中指出，在特殊情形 $K=L$ 下，优化问题 (2.2) 和 (2.3) 具有无限维对应问题，也可以进行类似的“缩减规模”。事实上，令 $\mathcal{M}\subset\mathbb{R}^d$ 为一个可定向紧致光滑子流形，则可以考虑

$$\mathrm{argmin}_{u\in\mathcal{H}_K}\frac{1}{2}\left\{\|u\|^2_{\mathcal{H}_K}+\frac{1}{\alpha}\int_{\mathcal{M}}(u-f)^2\,d\sigma_{\mathcal{M}}\right\}$$

对于 $\alpha\geqslant0$，需要注意的是，当 $\alpha=0$ 时，泛函会失去其第二项，而该项由约束条件 $u\big|_{\mathcal{M}}=f$取代。沿用上述论证可得约化方程

$$\alpha u(x)+\int_{\mathcal{M}}L(x-y)u(y)\,d\sigma_{\mathcal{M}}(y)=f(x),\ x\in\mathcal{M},$$

在流形 $\mathcal{M}$ 上（取代点云 $\mathbb{X}$），对应于 $f:\ \mathcal{M}\to\mathbb{R}$ （取代 $\mathbb{Y}$）。这种类比一方面表明，核插值相当于求解第一类弗雷德霍姆积分方程（即一个相当不适定的问题），而近似插值则对应于求解一个条件更好的第二类弗雷德霍姆积分方程。从这个角度看，回归似乎是精确插值的一种自然正则化。

（2.3）与（2.2）之间存在自然的联系。

命题 2.8. 令 $u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}$ 为 $\alpha > 0$ 下 (2.3) 以及 $\alpha = 0$下 (2.2) 的极小化函数。将相应的极小值记为 e_α, $\alpha \geqslant 0$, 并令 $0 < \alpha_0 < \alpha_1$。则有：

(i) $u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} \to u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}$ 当 $\alpha \searrow 0$ 属于 $\mathcal{H}_K$时。*(ii)* $0 \leqslant e_{\alpha_1} \leqslant e_{\alpha_0} \leqslant \frac{1}{2}\|u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K}$ 以及 $|u^{\alpha_0}(X,Y) - Y|^2 \leqslant |u^{\alpha_1}(X,Y) - Y|^2$。*(iii)* $\|u^{\alpha_1}(X,Y)\|_{\mathcal{H}_K} \leqslant \|u^{\alpha_0}(X,Y)\|_{\mathcal{H}_K} \leqslant \|u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|_{\mathcal{H}_K}$*(iv)* $|u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} - Y|^2 \leqslant \alpha[\|u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} - \|u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K}]$。

证明。 注意到 $e_\alpha \leqslant e_0$ 对 $\alpha > 0$ 成立，因为$u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} \in \mathcal{H}_K$ 且$E_\alpha(u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) = e_0$ 其中 E_α 表示(2.3)的目标泛函。由此可得$\|u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|_{\mathcal{H}_K} \leqslant C < \infty$ 与 $\alpha > 0$无关。特别地，我们有

$$0 \leqslant \frac{1}{2\alpha}|u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(\mathbb{X}) - \mathbb{Y}|^2 \leqslant e_\alpha - \frac{1}{2}\|u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} \leqslant e_0 - \frac{1}{2}\|u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} = \frac{1}{2}\big[\|u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} - \|u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K}\big]$$

给定任意零序列 $(\alpha_k)_{k\in\mathbb{N}}$，弱紧性给出一个极限为$u^{\infty}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} \in \mathcal{H}_K$的弱收敛子列；由范数的弱下半连续性，该极限必须满足$\|u^{\infty}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} \leqslant e_0$，因此是唯一极小化子$u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}$。现定义$d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u) = |u(\mathbf{X}) - \mathbf{Y}|^2$ 并注意到

$$\begin{aligned} e_{\alpha_0} &= \frac{1}{2\alpha_0}d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) + \|u^{\alpha_0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} \leqslant [\frac{1}{2\alpha_0} - \frac{1}{2\alpha_1}]d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_1}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) + \|u^{\alpha_1}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} + \frac{1}{2\alpha_1}d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_1}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) \\ &\leqslant [\frac{1}{2\alpha_0} - \frac{1}{2\alpha_1}]d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_1}_{\mathcal{M}}) + \|u^{\alpha_0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} + \frac{1}{2\alpha_1}d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) \end{aligned}$$

可得$d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_0}{}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) \leqslant d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_1}{}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}})$。由于

$$e_{\alpha_1} = \frac{1}{2\alpha_1}d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_1}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) + \|u^{\alpha_1}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} \leqslant \frac{1}{2\alpha_1}d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u) + \|u\|^2_{\mathcal{H}_K} \leqslant \frac{1}{2\alpha_0}d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u) + \|u\|^2_{\mathcal{H}_K},$$

t对 $u \in \mathcal{H}_K$ 取下确界即得所断言的 $e_{\alpha_1} \leqslant e_{\alpha_0}$。接下来我们有

$$\|u^{\alpha_1}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} \leqslant \|u^{\alpha_0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K} - \frac{1}{2\alpha_1}\big[d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_1}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) - d^2_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}(u^{\alpha_0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}})\big] \leqslant \|u^{\alpha_0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|^2_{\mathcal{H}_K}$$

得益于针对 $d^2_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}}(u^{\alpha}_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}})$ 已经确立的不等式。最后，可得（沿用上述同一子序列，无需引入额外记号）

$$\|u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|_{\mathcal{H}_K} = \|u^{\infty}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|_{\mathcal{H}_K} \leqslant \liminf_{k\to\infty}\|u^{\alpha_k}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|_{\mathcal{H}_K} \leqslant \limsup_{k\to\infty}\|u^{\alpha_k}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|_{\mathcal{H}_K} \leqslant \|u^{0}_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\|_{\mathcal{H}_K}$$

所有论断均已得证，因为在希尔伯特空间中，收敛等价于弱收敛以及范数收敛；我们还证明了每个序列都有一个收敛到相同极限的子序列。□

注 2.9。 尽管上述讨论围绕正定核的使用展开，但考察两个极端情形——拉普拉斯核和高斯核——既有用又能带来启发。它们分别代表了光滑度最低的核（甚至不连续可微）和光滑度最高的核（解析的）。后者能提供更高阶的方法（相应地，条件也更差），而前者则有助于缓解精确插值固有的病态性。正因如此，数值计算中将使用略经正则化的拉普拉斯核版本。我们还注意到，在 [17], 中提出了一种基于热方程推导高斯核插值的方法；从纯形式的角度看，这相当于将(2.2)和(2.3) 中的贝塞尔势范数替换为强得多的范数

$$\frac{1}{2}\|e^{-\Delta}u\|^2_{\mathrm{L}^2} = \frac{1}{2}\|e^{|\cdot|^2}\hat{u}\|^2_{\mathrm{L}^2}.$$

虽然使用任意（正定）核是可行且有用的，但有时这会掩盖生成再生核希尔伯特空间上范数的微分算子的确切性质。

正是注 2.7 促使我们将问题 (2.2) 和 (2.3) 理解为流形 $\mathcal{M}$上定义的函数 f 的插值和近似插值问题，其中 $\mathcal{M}$ 只能通过点云/样本 X 获知，而 f 则通过与 $f(\mathbb{X})$ 一致或对其进行近似的值 Y 获知。为了从 X 获取有关 $\mathcal{M}$ 的几何信息，自然可以使用$u^{\alpha}_{\mathbb{X},\,\mathbb{1}}$，即选择$f\equiv 1$作为定义函数（或至少是局部水平集函数）的替代。在本文其余部分进行数值实验时，我们将使用高斯核和拉普拉斯核；必要时，则采用正则化形式 $L_\varepsilon(x)=e^{-\sqrt{|x|^2+\varepsilon}}$, $x\in\mathbb{R}^n$。前者是许多非常光滑的核函数的典型代表，而后者的正则性最低，即使采用其正则化形式 L_ε，也能显著缓解插值矩阵的病态性，正如上文所述。处于这两种极端情形之间、具有任意中间正则性的核函数，例如已经提到的 Mat´ern 族中的核函数。

3. Hypersurfaces

给定紧致光滑超曲面 $\mathcal{M}$的一个点云或样本 X，我们选择一个核 K，它至少具有二阶连续可微性，并计算函数

$$u_{\mathbb{X}}=u_{\mathbb{X},\mathbb{1}}=K(\cdot,\mathbb{X})K(\mathbb{X},\mathbb{X})^{-1}\mathbb{1},$$

这相当于将定义在 X 上、值为 1 的常函数光滑延拓到环境空间。由于核已知，因此可以在任意位置解析地计算与该函数相关的微分量。只要 $[u_{\mathbb{X}}=1]$ 在其某个点附近定义了一个超曲面，我们就可以通过下式定义该曲面的隐含法向量

$$\nu_{\mathbb{X}}(x)=\frac{\nabla u_{\mathbb{X}}(x)}{|\nabla u_{\mathbb{X}}(x)|},$$

其中，同样，唯一的数值计算是求系数 $K(\mathbb{X},\,\mathbb{X})^{-1}\mathbb{1}$，因为 $\nabla K(\cdot,\,\mathbb{X})$可以精确计算。类似地，可以得到

$$D\nu_{\mathbb{X}}=\frac{1}{|\nabla u_{\mathbb{X}}|}\big(D^2u_{\mathbb{X}}-D^2u_{\mathbb{X}}\nu_{\mathbb{X}}\nu_{\mathbb{X}}^{\mathsf{T}}\big),$$

也就是说，按照无网格方法的思路，对法向量的导数 $D\nu_{\mathbb{X}}$ 进行数值近似。出于稳定性考虑和／或存在噪声时，可以用$u^{\alpha}_{\mathbb{X}}=u^{\alpha}_{\mathbb{X},\mathbb{1}}$ 替代 $u_{\mathbb{X}}$，其中$\alpha>0$ 较小，或者在已知噪声水平时与之相关。我们将在讨论与高斯过程回归之间联系的章节中，重新探讨含噪数据下 $\alpha>0$ 的选择。量 $\nu_{\mathbb{X}}$ 和 $D\nu_{\mathbb{X}}$将使我们能够数值求得曲面的切平面及其主曲率。进而，这将为数值计算作用于定义在 X 上的函数的几何算子铺平道路。请注意，采用$u_{\mathbb{X},\mathbb{1}}$ 取代了更常见的（曲面）有符号距离函数；然而，要正确插值有符号距离函数，需要知道法向量。对于本文选用的核函数（其峰值位于中心），这是可行的。该方法还为含噪数据情形提供了一种自然的解决方案：通过启用正则化（$\alpha>0$），使几何量的估计更稳健。离散曲面的曲率估计在许多应用中都很重要。关于光滑（多边形）数据的情形，参见 [9] ；关于含噪情形，参见 [20] ，其中还提供了进一步背景资料的相关参考文献。

3.1. 插值结果。文献 [13] 指出，将全空间正定核 K 限制在任意维数、无边界的光滑紧致嵌入子流形 $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^d$ 上，所得的仍是正定核 $K_{\mathcal{M}}$： $\mathcal{M} \times \mathcal{M} \to \mathbb{R}$。该文还为已知有限光滑性的核确定了相应的 $\mathcal{M}$ 上函数的原生空间，并推导了定义在 $\mathcal{M}$上的函数之插值问题的 Sobolev 误差估计。本文采用更直接的方法得出相同结论。概括而言，当 $\mathbf{X}$ 是具有上述性质的光滑流形的一个样本时，全空间插值函数$u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}$ 可解释为 $\mathcal{H}_K$中的一个函数，其迹$\gamma_{\mathcal{M}}(u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}})$是 u 上的插值函数： $\mathcal{M} \to \mathbb{R}$，对应于数据 $(\mathbf{X},\mathbf{Y})$。请注意，只要 K的正则性至少与拉普拉斯核 L相同，这种方法就是合理的，因为相应的原生空间包含于 $\mathrm{H}^{\frac{d+1}{2}}(\mathbb{R}^d) \hookrightarrow \mathrm{BUC}(\mathbb{R}^d)$中。因此，对定义在流形上的数据进行全空间插值，自然会得到属于原生空间迹空间的函数近似。这与文献 [13] 的结果一致，同时也提供了略有不同的视角。本文与文献 [13] 的一个区别在于，我们还希望利用数据 $\mathbf{X}$ 对流形本身进行插值，以便推导其几何量和几何算子的近似。这正是我们仍倾向于从全空间核插值角度思考的主要原因： $\mathcal{M}$ 的定义函数确实属于全空间。我们还注意到，拉普拉斯核的最小光滑性情形为有效处理非光滑流形打开了大门，因为 $\mathrm{H}^{\frac{d+1}{2}}(\mathbb{R}^d)$ 函数的等值集并不具备很强的正则性。采用正则化（$\alpha > 0$）后，即使存在噪声，该方法也能变得稳健。

—

注记 3.1. 我们指出，即便在拉普拉斯核仅具最低光滑性的情形下，当在低正则性子流形 $\mathcal{M}$ 的背景下工作时，水平集函数 $u_{\mathbb{X},\mathbb{1}}$ 仅为最低~光滑，且仅仅在 $\mathcal{M}/\mathbb{X}$ 上如此，因为 $\mathcal{A}_K u_{\mathbb{X},\mathbb{1}} = 0$ 在远离 $\mathcal{M}/\mathbb{X}$ 处成立，这表明 $u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} \in \mathrm{dom}(\mathcal{A}_K^n)^{\sim}$对每一个 $n \in \mathbb{N}$ 成立，其中 $\mathcal{A}_K$ 是 $\mathcal{A}_K$ 到开集 $\mathcal{M}^{\mathsf{c}}/\mathbb{X}^{\mathsf{c}}$ 的限制。因此，特别地，除取值为 *1* 的那个等值集之外，其余等值集通常更为光滑。这使得即使该核缺乏必要的正则性，仍可计算几何量的近似值。

设 $u \in \mathrm{H}^m(\mathbb{R}^d)$ 对 $m > \frac{d}{2}$ 为满足 $u = f$ 的任意函数，其中 $f \in \mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})$ 已给定，并假定 $\mathcal{M}$ 要么是 $\mathbb{R}^d$ 中无边界的紧致光滑超曲面，要么是有限集 $\mathbf{X} \subset \mathcal{M}$。$\mathrm{H}^m(\mathbb{R}^d)$- 范数泛函 E_m 的极小化函数，例如

$$E_m(u) = \frac{1}{2}\|u\|^2_{\mathrm{H}^m(\mathbb{R}^d)}$$

满足约束条件 $u = f$ on $\mathcal{M}$ is 是我们所讨论情境中的一个相关示例。当 $\mathcal{M}$ 是一个流形时，极小化函数记为 $u_{\mathcal{M},f}$ ，与之前在 $\mathcal{M}$ =$\mathbf{X}$,$f = \mathbf{Y}$ 情形下使用的记号一致。请注意，由于 $m > \frac{d}{2}$，可以进行逐点求值；迹定理保证 $\{u \in \mathrm{H}^m(\mathbb{R}^d) \,|\, u = f \text{on } \mathcal{M}\} \neq \varnothing$。我们尤其关注 $\mathbf{Y} = f(\mathbf{X})$ 的情形，这一情形是合理的，因为根据假设，可以对 f进行求值，且 $m - \frac{1}{2} > \frac{d-1}{2}$。极小化函数$u_{\mathcal{M},f}$ 和 $u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})} = u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}$均存在，其中 $\mathbf{Y} = f(\mathbf{X}) = \gamma_{\mathcal{M}}(u)(\mathbf{X})$；这是因为由约束条件确定的凸集非空，且二者都属于 $\mathrm{H}^m(\mathbb{R}^d)$。因此有

$$u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\big|_{\mathcal{M}} \in \mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M}) \text{ and } u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}\big|_{\mathcal{M}}(\mathbb{X}) = f(\mathbb{X})$$

由此可知，函数 $u_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}}\big|_{\mathcal{M}} - f$ 在 $\mathbf{X} \subset \mathcal{M}$ 上为零。因此，我们可以使用关于索obolev函数在存在散布零点时的行为的结果，这些结果可见于 [3] 中（针对 $\frac{d}{2} < m \in \mathbb{N}$），或见于[34]中（针对 $m \in (\frac{d}{2}, \infty)\backslash\mathbb{N}$）。虽然这些结果适用于 $p \in [1, \infty)$的一般情形，但我们将采用$p = 2$ 和 $m > \frac{d}{p} = \frac{d}{2}$，此时有

$$|u|_{\mathrm{H}^k(\Omega)} \leqslant c\, h^{m-k}_{\mathbb{X},\Omega} |u|_{\mathrm{H}^m(\Omega)} \text{ and } \|u\|_\infty \leqslant c\, h^{m-d/2}_{\mathbb{X},\Omega} |u|_{\mathrm{H}^m(\Omega)}, \tag{3.1}$$

对于 $u\in \mathrm{H}^m(\Omega)$，其中 $u(\mathrm{X})\equiv 0$，假设 Ω 满足一种几何性质，该性质对于球总是成立；而$h_{\mathbb{X},\ \Omega}$ 是 X 的所谓填充距离，定义为

$$h_{\mathbb{X},\Omega}=\sup_{x\in\Omega}\min_{\tilde{x}\in\mathbb{X}}|x-\tilde{x}|.$$

它衡量集合 X 对 Ω 的逼近程度。估计中出现的范数是贝波·列维空间 $BL_k=\left\{u\in\mathcal{D}'(\Omega)\,\middle|\,\partial^\alpha u\in \mathrm{L}_2(\Omega)\ \forall|\alpha|=k\right\}$ 的半范数，定义如下：

$$|u|^2_{\mathrm{H}^k(\Omega)}=\sum_{|\alpha|=k}\|\partial^\alpha u\|_2^2.$$

当 $k>\frac{d}{2}$ 时，它们是范数。该结果基于局部多项式逼近。将这一结果推广到超曲面 $\mathcal{M}$，即可得到下面的定理。

注 3.2. 请注意，文献[13] 中表述并证明了一个关于索伯列夫范数的更一般结果，该结果允许 $\mathcal{M}$ 为任意维数的子流形，且正则性也可以是分数阶。为求完整起见，这里我们仅简要概述专为当前情形设计的证明。虽然该结果是针对超曲面表述的，但可以原封不动地推广到任意维数的子流形情形。

定理 3.3. 设 $\mathcal{M}\subset\mathbb{R}^d$ 是一个光滑紧致超曲面，且给定 $f\in \mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})$，满足$m>\frac{d}{2}$。令 $\mathbb{X}\subset\mathcal{M}$，并且

$$h_{\mathbb{X},\mathcal{M}}=\sup_{x\in\mathcal{M}}\min_{\tilde{x}\in\mathbb{X}}d_{\mathcal{M}}(x,\tilde{x})$$

为流形 $\mathcal{M}$ 上集合 $\mathbb{X}$ 的填充距离。若 $f(\mathbb{X})\equiv 0$，则有

$$|f|_{\mathrm{H}^k(\mathcal{M})}\leqslant c\,h_{\mathbb{X},\mathcal{M}}^{m-1/2-k}|f|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})}\ and\ \|f\|_\infty\leqslant ch_{\mathbb{X},\mathcal{M}}^{m-d/2}|f|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})}.$$

证明。由于假设 $\mathcal{M}$ 是紧的，因此可以找到有限个开图域$U_j\subset\mathcal{M}$, $j=1,\dots,J$，以及双射坐标图（局部坐标）

$$\varphi_j:U_j\to\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1),$$

使得 $\varphi_j^{-1}\colon \mathrm{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1)\to\mathrm{R}^d$ 是光滑的，且 $\varphi_j^{-1}\big(\mathrm{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1)\big)=\mathcal{M}\cap U_j=U_j$。选择一个从属于该坐标图域覆盖的光滑单位分解 $\left\{\psi_j\colon \mathcal{M}\to\mathrm{R}\,\middle|\,j=1,\dots,J\right\}$，即可在 $\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})$ 上得到一个（等价的）范数，其定义为

$$\|v\|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})}\sim\Big(\sum_{j=1}^J\|(v\psi_j)\circ\varphi_j^{-1}\|^2_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}(0,1)})}\Big)^{1/2},$$

其中 $v\in\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})$。接下来定义 $\mathrm{X}j=\mathrm{X}\cap U_j$ 和 $\mathrm{Z}_j=\varphi_j(\mathrm{X}_j)$，其中 $j=1,\dots,J$。有

$$h_{\mathbb{Z}_j,\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}(0,1)}}=\sup_{z\in\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}(0,1)}}\min_{\tilde{z}\in\mathbb{Z}_j}|z-\tilde{z}|=\sup_{x\in U_j}\min_{\tilde{x}\in\mathbb{X}_j}|\varphi_j(x)-\varphi_j(\tilde{x})|\leqslant c_jh_{\mathbb{X}_j,U_j}\leqslant c\,h_{\mathbb{X},\mathcal{M}},$$

其中$h_{\mathbb{Z}_j}$，$\mathrm{B}_{\mathbb{R}^{d-1}(0,\ 1)}$ 是$\mathrm{Z}j$ 在$\mathrm{B}_{\mathbb{R}^{d-1}(0,\ 1)}$中相应的填充距离。最后一个不等式可按如下方式得到：我们可以不失一般性地假设集合 U_j 是在p_j处中心化、半径为r_j的测地球，并且$h_{\mathbb{X}},\ _{\mathcal{M}}<\min_{j=1,\ \dots,\ J}r_{j_\circ}$ 于是，若 $x\in\mathrm{B}_{\mathcal{M}}(p_j,\ r_j-h_{\mathbb{X}},\ _{\mathcal{M}})$，我们可以找到 $\tilde{x}\in\mathrm{X}$，使得 $d(x,\ \tilde{x})\leqslant h_{\mathbb{X}},\ _{\mathcal{M}}$，此时 $\tilde{x}\in\mathrm{X}j$。否则，若$r_j-h_{\mathbb{X}},\ _{\mathcal{M}}\leqslant d_{\mathcal{M}}(x,\ p_j)<r_j$，我们可以沿连接$p_j$与 x 的测地线找到一点 $\bar{x}$，满足 $d(p_j,\ \bar{x})=r_j-h_{\mathbb{X}},\ _{\mathcal{M}}$ 以及 $\tilde{x}\in\mathrm{X}j$，且$d(\bar{x},\ \tilde{x})\leqslant h_{\mathbb{X}},\ _{\mathcal{M}}$，此时我们有

$$d_{\mathcal{M}}(x,\tilde{x})\leqslant d_{\mathcal{M}}(x,\bar{x})+d_{\mathcal{M}}(\bar{x},\tilde{x})\leqslant r_j-(r_j-h_{\mathbb{X},\mathcal{M}})+h_{\mathbb{X},\mathcal{M}}\leqslant 2h_{\mathbb{X},\mathcal{M}}.$$

注意到 $|\mathbb{X}_j| = |\mathbb{Z}_j|$ ，因为φ_j 是双射，并且

$$h_{\mathbb{X}_j,U_j} = \sup_{x\in U_j}\inf_{\tilde{x}\in\mathbb{X}_j} d_{\mathcal{M}}(x,\tilde{x}) = \sup_{z\in\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1)}\inf_{\tilde{z}\in\mathbb{Z}_j} d_{\mathcal{M}}\big(\varphi^{-1}(z),\varphi^{-1}(\tilde{z})\big)$$
$$\leqslant c\sup_{z\in\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1)}\inf_{\tilde{z}\in\mathbb{Z}_j}|z-\tilde{z}| = c\,h_{\mathbb{Z}_j,\mathbb{R}^{d-1}(0,1)}.$$

对每个 $j=1$，……， J应用 (3.1)，可得

$$\|(f\psi_j)\circ\varphi_j^{-1}\|_{\mathrm{H}^k(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1))} \leqslant c_j h^{m-1/2-k}_{\mathbb{Z}_j,\mathrm{H}^k(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1))}\|(f\psi_j)\circ\varphi_j^{-1}\|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1))}$$

and

$$\|(f\psi_j)\circ\varphi_j^{-1}\|_{\infty} \leqslant c_j h^{m-1/2-(d-1)/2}_{\mathbb{Z}_j,\mathrm{H}^k(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1))}\|(f\psi_j)\circ\varphi_j^{-1}\|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathbb{B}_{\mathbb{R}^{d-1}}(0,1))},$$

结合这些不等式，并利用流形上的填充距离与坐标球中的填充距离之间的关系，即可得出所述结论。□

推论 3.4。 定义$u_{\mathbb{X},\ f(\mathbb{X})}$ 为满足约束条件$u_{\mathbb{X},\ f(\mathbb{X})}(\mathbb{X}) = f(\mathbb{X})$的$\mathrm{H}^m(\mathbb{R}^d)$-范数极小化函数。则函数

$$u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}\big|_{\mathcal{M}} - f \in \mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})$$

在$\mathbb{X}$上为零，且有

$$\|u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}\big|_{\mathcal{M}} - f\|_{\mathrm{H}^k(\mathcal{M})} \leqslant c h^{m-1/2-k}_{\mathbb{X},\mathcal{M}}\Big|u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}\big|_{\mathcal{M}} - f\Big|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})}.$$

以及

$$\|u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}\big|_{\mathcal{M}} - f\|_{\infty} \leqslant c h^{m-d/2}_{\mathbb{X},\mathcal{M}}\Big|u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}\big|_{\mathcal{M}} - f\Big|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})}.$$

此外，由于 $u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}$ 和 $u_{\mathcal{M},f}$ 是$\mathrm{H}^m(\mathbb{R}^d)$对 $u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}\big|_{\mathcal{M}}$ 和 f 的延拓，且根据构造具有连续依赖性，因此也成立：

$$\|u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})} - u_{\mathcal{M},f}\|_{\mathrm{H}^{k+1/2}(\mathbb{R}^d)} \leqslant c\,h^{m-1/2-k}_{\mathbb{X},\mathcal{M}}\|u_{\mathbb{X},f(\mathbb{X})}\big|_{\mathcal{M}} - f\|_{\mathrm{H}^{m-1/2}(\mathcal{M})}.$$

在核插值中，有时会使用一个正定核 $K:\ \Omega\times\Omega\ \to\mathrm{R},\ \Omega\ \subset\mathrm{R}^d$，而不明确刻画其对应的原生空间 $\mathcal{H}_K$。如前所述，$u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} = K(\cdot,x)K(\mathrm{X},\mathrm{X})^{-1}\mathrm{Y}$ 是在参数 $\mathrm{X}\ \subset\Omega$ 处取值为 $\mathrm{Y}\ \subset\mathrm{R}^{|\mathbb{X}|}$ 的插值函数，并且在所有插值函数中具有最小的 $\mathcal{H}_K$-范数。只要知道 $\mathcal{H}_K\ \hookrightarrow\mathrm{H}^m(\Omega)$，便可在此情形下推导出针对具有上述散布零点的函数的估计。因此，只要 f 是足够光滑、能够确保插值问题可解的函数，上述估计也可用于例如高斯核 G 。这是因为对于每个$m\in\mathrm{N}$，都有 $\mathcal{H}_G\hookrightarrow\mathrm{H}^m(\mathrm{R}^d)$ 。由于高斯核是解析的，当流形和数据均为解析的时，人们会期待沿着 [34, 第 11 节4]的思路获得更好的收敛结果。

如果只关注 $\mathcal{M}$ 及其几何性质，那么只要对 $\mathcal{M}$ 作出适当的正则性假设，就能得到 $f\equiv 1$ 和相应的估计。虽然上述理论结果显然适用于拉普拉斯核，但它不够光滑，无法实现高阶近似。数值实验将表明，改用前文提到的正则化核 L_ε，既能恢复高阶精度，同时也能在一定程度上缓解系统的病态性。

注 3.5. 核插值能够实现高阶方法，但不可避免地要以病态性为代价。过去，人们认为病态性限制了可处理的点云规模。后来发现，使用紧支撑径向基函数 [25, 26], 、采用光滑核函数的多极子方法 [4, 5], ，或采用单位分解方法 [35] ，都能有效缓解这一缺陷。

注 3.6. 文献中也研究了特殊流形上的核方法（例如参见 [34]），其采用的方法基于定义在流形本身上、并与其几何相关的核函数。由于只有非常特殊的流形才有已知的显式核函数，因此这种方法存在固有的局限。

3.2. **几何量的计算**。 接下来，我们考虑如何数值近似定义在光滑紧致超曲面 $\mathcal{M}$上的函数 $f:\mathcal{M}\to\mathrm{R}$ 的曲面梯度 $\nabla_{\mathcal{M}} f$ 和拉普拉斯–贝尔特拉米算子 $\Delta_{\mathcal{M}} f$ 。这一问题受到广泛关注，因为它在许多领域都有应用：曲面整饰/平滑/去噪、特征检测、网格优化与简化、几何压缩、形状分析与识别、三维重建、曲面配准、医学成像、基于曲面的形态学、渲染以及流形上的偏微分方程。文献中针对曲面的各种离散表示对此进行了广泛研究（例如参见 [31, 23]）。径向基函数表示法也曾用于研究这一问题 [27]。然而，如前所述，公认的方法是增广数据集 $\mathbf{X}$，在距离 $\mathbf{X}$ 为 $\delta>0$处、沿正向和负向法线* 方向添加两层等距点 $\mathbf{X}\pm\delta\nu_{\mathcal{M}}(\mathbf{X})$ ，并在这些点上施加取值约束，力求使插值函数成为流形“有符号距离函数”的近似。插值函数的等值集中出现不连通分量，以及由此增加的稳定性，常被用作增广必要性的理由[27]。我们认为（并将在最后一节提供证据），不连通现象是由使用过于光滑（解析的）核函数造成的：这类核函数在设计上试图用高度正则的函数去插值稀疏、光滑性较差或含噪的超曲面，因此往往会采用复杂的多分量等值集来适应样本，同时保持正则性。我们将说明，使用低正则性（或接近低正则性）的核函数和/或本文所倡导的正则化方法（通过回归），能够解决这一问题。还需指出，要有效实施增广策略，必须掌握一些曲面法向量的信息。此外，还会引入外生参数，影响近似质量和所得系统的条件性；这些参数也需要通过某种方式确定。虽然这种方法会损失精度（除非精确掌握法向量），但它将几何算子的计算转化为环境空间算子的计算：将这些算子作用于环境空间函数，而此类函数是沿法向将函数常值延拓至曲面外点得到的（例如参见 [27]）。

我们再次假设， $\mathcal{M}$ 只能通过其点的样本集 $\mathbf{X}\subset\mathcal{M}$ 获知，而 f 的取值仅在 $\mathbf{X}$ 上可用，即假设已知 $f(\mathbf{X})=\mathbf{Y}$。出发点是，我们已经能够通过点的离散样本及其对应的符号函数 $u_{\mathbb{X}}$，获取超曲面的几何信息。该算法基于对插值函数$u_{\mathbb{X},\ \mathbb{Y}}$ 进行计算，并将其视为延拓$u_{\mathcal{M},\ f}$ 在整个空间上的近似，其中 f定义在整个空间上。因此，我们需要推导一个关于嵌入 $\mathcal{M}\subset\mathrm{R}^d$（或关于 $\mathbf{X}$）的曲面算子公式，以便将其应用于延拓，然后再考虑相应的“离散”对应物。由于我们未能在标准微分几何教科书中找到拉普拉斯-贝尔特拉米算子的这类公式，因此在此简要推导。

定义 3.7. 设 $U,V\colon\ \mathcal{M}\to T\mathcal{M}$ 为切丛的光滑截面（即$\mathcal{M}$上的向量场）。则 D_V 表示沿向量场 V的导数，即

$$D_V f(x)=\frac{d}{dt}\Big|_{t=0} f\big(\varphi_V(t,x)\big),\ D_V U(x)=\frac{d}{dt}\Big|_{t=0} U\big(\varphi_V(t,x)\big),\ x\in\mathcal{M},$$

其中 $\varphi_V(t,\cdot)$ 是由 V 生成的流，也就是说，它满足常微分方程

$$\begin{cases}\dot\gamma=V(\gamma), & t>0,\\ \gamma(0)=x\end{cases}$$

*由于 [19], 法向量通常是基于每个点的（k-）最近邻邻域，通过对切平面进行主成分分析估计来近似的。

其中 $\gamma\colon\ [0,\infty)\to\mathcal{M}$ 是 $\mathcal{M}$ 上的一条曲线。由于对每个 $x\in\mathcal{M}$, $V(x)\in T_x\mathcal{M}$，因此这是良定义的。即使 U 是一个切向量场，通常也不成立 $D_VU(x)\in T_x\mathcal{M}$。这促使我们定义协变导数（联络）

$$\nabla_V U=\partial_V U=D_VU-\big(\nu\cdot D_VU\big)\nu,$$

将正交投影 $\mathbb{1}_d-\nu\nu^\top$ 应用于 $\mathcal{M}$ 的切空间 $T\mathcal{M}$ 上的方向导数 D_VU所得。

现在取 $u_{\mathcal{M},\ f}\colon \mathrm{R}^d\to\mathrm{R}$，或所关注函数 $f\colon\mathcal{M}\to\mathrm{R}$ 的任何其他（光滑）延拓。于是有

$$\nabla_{\mathcal{M}}u(y)=\nabla u(y)-\big(\nu_{\mathcal{M}}(y)\cdot\nabla u(y)\big)\nu_{\mathcal{M}}(y),$$

其中 $\nabla=\nabla_{\mathbb{R}^d}$ 是环境空间中的标准梯度。为了计算 $\mathcal{M}$的拉普拉斯–贝尔特拉米算子，

$$\Delta_{\mathcal{M}}=\operatorname{div}_{\mathcal{M}}\nabla_{\mathcal{M}}$$

用环境空间 R^d的坐标表示，我们需要以下引理。

引理 3.8. 对于光滑函数 $u\colon\ \mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$，有

$$\Delta_{\mathcal{M}}u(x)=\operatorname{tr}(D^2u(x))-\nu(x)^\top D^2u(x)\nu(x)+(d-1)H(x)\partial_{\nu(x)}u(x),\ x\in\mathcal{M}.$$

证明。若 $X\colon\mathcal{U}\to\mathrm{R}^{d-1}$ 是点 $y\in\mathcal{M}$附近 $\mathcal{M}$ 的局部坐标系，则切空间由以下向量张成

$$\frac{\partial}{\partial x^j}=\big(\frac{\partial}{\partial x^j}X^{-1}\big)\big(X(y)\big),\ j=1,\dots,d-1,$$

其中通常假设，当在 y 的邻域 $\mathcal{U}$ 中工作时，$X(y)=0$。由此可得

$$\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^j}}\frac{\partial}{\partial x^k}=\frac{\partial}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial x^k}-\big(\frac{\partial}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial x^k}\cdot\nu\big)\nu,$$

但 $\frac{\partial}{\partial x^k}\cdot\nu=0$，因此

$$\frac{\partial}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial x^k}\cdot\nu=-\frac{\partial}{\partial x^j}\nu\cdot\frac{\partial}{\partial x^k}.$$

由此可得

$$\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^j}}\frac{\partial}{\partial x^k}=\frac{\partial}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial x^k}+\frac{\partial}{\partial x^k}\cdot\frac{\partial}{\partial x^j}\nu=\frac{\partial}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial x^k}+\frac{\partial}{\partial x^j}\cdot\frac{\partial}{\partial x^k}\nu,$$

其中，最后一个等式根据 $\frac{\partial}{\partial x^j}\cdot\nu=0$得出，这是因为正则导数具有可交换性，并由此可得

$$\frac{\partial}{\partial x^k}\cdot\big(\frac{\partial}{\partial x^j}\nu\big)=-\frac{\partial}{\partial x^k}\frac{\partial}{\partial x^j}\cdot\nu=\frac{\partial}{\partial x^j}\cdot\big(\frac{\partial}{\partial x^k}\nu\big).$$

综上，我们得到 t

$$\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^j}}\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^k}}u=\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^j}}\frac{\partial}{\partial x^k}u=\frac{\partial}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial x^k}u+\big(\frac{\partial}{\partial x^j}\cdot\frac{\partial}{\partial x^k}\nu\big)\partial_\nu u.$$

现在，取一组局部坐标，使其在 y 处为切空间的一组正交归一基。注意，加入 $\nu(y)$ 后，可将其扩充为 R^d的一组正交归一基。因此，在 y处用这些坐标取迹，可得

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathcal{M}}u=\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^j}}\nabla_{\frac{\partial}{\partial x^j}}u&=\frac{\partial}{\partial x^j}\frac{\partial}{\partial x^j}u+\big(\frac{\partial}{\partial x^j}\cdot\frac{\partial}{\partial x^j}\nu\big)\partial_\nu u\\&=\operatorname{tr}(D^2u)-\nu^\top D^2u\nu+(d-1)H\partial_\nu u,\end{aligned}\tag{3.2}$$

（其中使用了 求和约定），注意到平均曲率 H 满足

$$(d-1)H=\operatorname{tr}(D\nu),$$

因为 $\partial_\nu\nu=0$。 □

为了获得可行的数值算法，只需计算与数据集 (X,Y) 相对应的插值函数 $u_{\mathbb{X}}$ and$u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}$。如前所述，第一个插值函数用于计算隐含的法向量 $\nu_{\mathbb{X}}$ 和隐含的平均曲率 $H_{\mathbb{X}} = \frac{1}{d-1}\mathrm{tr}(D\nu_{\mathbb{X}})$；第二个则给出 $f\big|_{\mathbb{X}}$ 在整个环境空间上的光滑延拓，它是上一小节中所述 f 的延拓 $u_{\mathcal{M},f}: \mathrm{R}^d \to \mathrm{R}$ 的数值近似。随后，曲面梯度和拉普拉斯-贝尔特拉米算子的公式可直接得出如下数值离散化：

$$\nabla_{\mathbb{X}}\mathbb{Y} = \nabla_{\mathbb{X}} u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} = \nabla u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} - \big(\nabla u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} \cdot \nu_{\mathbb{X}}\big)\nu_{\mathbb{X}},$$

and

$$\Delta_{\mathbb{X}}\mathbb{Y} = \Delta_{\mathbb{X}} u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} = \mathrm{tr}(D^2 u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}) - \nu_{\mathbb{X}}^{\top} D^2 u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} \nu_{\mathbb{X}} + (d-1) H_{\mathbb{X}} \nabla u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}} \cdot \nu_{\mathbb{X}},$$

其中涉及的所有导数均通过解析计算得出。由于这些表达式是处处有定义的函数的组合，因此可以在任意位置求值。在 X 处对表达式 $\nabla_{\mathbb{X}}\mathrm{Y}$ 和 $\Delta_{\mathbb{X}}\mathrm{Y}$ 求值，即可得到矩阵离散化。也可以通过在其他离散集合 X 处求值来获得非方阵表示$\widetilde{\quad}$，和/或将 Y 替换为 $u_{\mathbb{X},\mathbb{Y}}$(X) to$\widetilde{\quad}$，从而替换“网格”X，得到近似这些算子的矩阵；这些算子以定义在 X 上的输入为输入，并产生定义在同一网格上的输出。

4. Connection to Regression

在转向数值实验之前，我们先讨论与高斯过程回归的联络，这有助于解释正则化参数 $\alpha > 0$。

定义 4.1. 如果 $E = E(\Omega) \subset \mathrm{C}(\Omega)$ 是一个函数巴拿赫空间，那么随机向量 $W \in E$ 称为服从高斯分布，若对每个 $e^* \in E^*$，$e^*W = \langle e^*, W\rangle_{E^*,E}$ 都服从正态分布。若对每个 $e^* \in E^*$，$\mathbb{E}[e^*W] = 0$，则称其为中心化。

R^d 上的多元高斯随机变量是其有限维对应形式。相关的协方差函数为

$$K(x,\tilde{x}) = \mathbb{E}[W(x)W(\tilde{x})],\ x,\tilde{x} \in E,$$

并且唯一确定中心化高斯随机元素的分布。它自然是非负定的，因为

$$0 \leqslant \mathbb{E}\big([\sum_{i=1}^{m} a_i W(x_i)]^2\big) = \sum_{i,j=1}^{m} a_i a_j \mathbb{E}\big[W(x_i)W(x_j)\big] = \sum_{i,j=1}^{n} a_i a_j K(x_i,x_j) = a^{\top} K(\mathbb{X},\mathbb{X}) a,$$

对于任意 $\mathrm{X} \subset \Omega$。因此，可以从一个正定核 $K: \mathrm{R}^d \times \mathrm{R}^d \to \mathrm{R}$ 出发，得到相应的高斯随机向量 $W \in \mathrm{C}(\Omega)$。对于数据集 (X，Y)，其中 $\mathrm{X} \subset \Omega$，可以作出如下假设：

$$y = f(x) + \varepsilon$$

其中 $f \sim N(0,\ K)$，也就是说，可以采用先验 f，其形式为均值为零、协方差函数为 K 的随机函数，并通过加性白噪声项 ε（与 f独立）来模拟噪声，其方差为 $\sigma^2 > 0$。给定参数集合 $\mathrm{X} \in \Omega$ 上的取值集合 Y 后，可以尝试根据观测数据，计算新参数 $x \in \Omega$ 处的条件值 Y

$$y\big|\big(x, f(\mathbb{X}) = \mathbb{Y}\big).$$

根据多元高斯分布在条件化和求和运算下的标准性质可知，在上述假设下，随机变量 Y 也服从高斯分布，其期望值可计算为

$$\mathbb{E}[Y] = K(x,\mathbb{X})\big[\sigma^2 + K(\mathbb{X},\mathbb{X})\big]^{-1}\mathbb{Y},$$

当 $\sigma = 0$ 时，这是精确的核插值公式；而选择 $\alpha = \sigma^2 > 0$时，它与近似插值公式一致。因此，如果已知数据的不确定性，就可以将所需的正则化程度视为由数据不确定性的大小决定。这也表明，

高斯过程回归中的先验选择（即相关函数的选择）决定了近似插值函数的正则性性质（即后验分布的期望）。

注 4.2。 关于高斯过程回归的统计学视角的介绍，例如可参阅在线书籍 [28]，其中该内容是在机器学习的背景下介绍的。对于上述问题，也可以求出 Y 的方差，其表达式为

$$\mathbb{E}\big[\big|Y - \mathbb{E}[Y]\big|^2\big] = K(x,x) + \sigma^2 - K(x,\mathbb{X})[\sigma^2 + K(\mathbb{X},\mathbb{X})]^{-1}K(\mathbb{X},x).$$

参见 [28]，其中包含填补本节论证中缺漏所需的材料 .

5. Numerical Experiments

注 5.1。 虽然符号函数几乎总是一个定义函数，至少在局部如此，但在某些情况下并非如此。有趣的是，对于曲线，当曲率为零时会出现这种情况；对于曲面，当平均曲率为零时也会如此。在这些情况下，流形的局部对称性会使法向量在解析意义上“消失”（如下例所述），并且在数值上几乎消失。下一小节将说明，这种情况只会在缺少全局信息时发生，因此，即便存在一定的平坦性，也不妨碍使用该方法。

5.1. 曲线。 本节展示该方法在闭曲线上的表现。在所有图中，除非另有说明，我们用白点表示数据集 X，用红线表示符号函数 $u_{\mathbb{X}}$ 的水平值 1，用不同深浅的绿色表示其水平区域，并用黑色箭头表示隐含法向量 $\nu_{\mathbb{X}}$。我们先完成上述讨论。取一条闭光滑曲线 $\Gamma \subset \mathrm{R}^2$，其参数化形式为

$$\big(\sin(t), \sin^3(t) + .5\cos(t)\big),\ t \in [0, 2\pi),$$

它有两个拐点。图 1（左）展示了从 $u_{\mathbb{X}}$ 中恢复的信息，其中 X

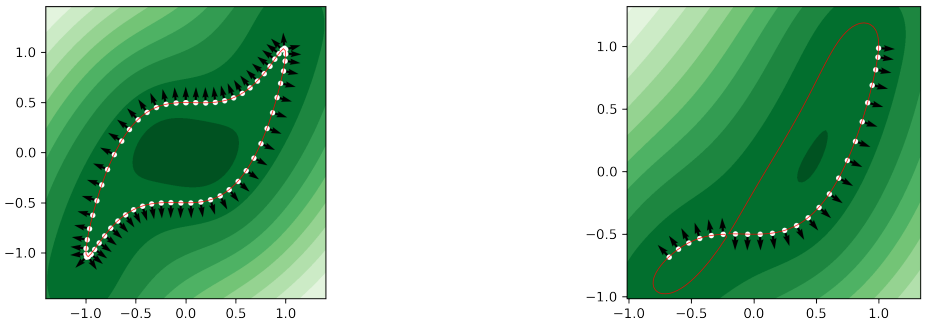

Figure 1. 左图展示了利用曲线上的 64 个点（白点）重建闭曲线。右图展示了基于不完整子样本的重建，该子样本由 24 个点组成。

由 64 个参数值等距分布的点组成。可以看到，所有法向量都指向曲线外侧，并与曲线正交。然而，如果我们去掉闭曲线的一部分，显然就无法定义曲线的内部区域和外部区域；这也反映在该曲线这一段上的一个拐点处 $u_{\mathbb{X}}$ 的梯度消失上，正如从图 1（右）中可以推断的那样。正如根据 $u_{\mathbb{X}}$ 的构造所预期的那样，仅基于局部信息计算出的诱导法向量，会指向曲线（局部）呈凸形的区域，因此在经过拐点时，其方向实际上会翻转，仿佛采用了不连续参数化。在这个例子中，我们使用了插值

方法，采用拉普拉斯核和 $\varepsilon = 1$。还要注意，使用光滑核仍会得到一条光滑闭曲线，而它必然是某个解析函数的水平集。

接下来我们考虑一条非光滑曲线——三角形。这个例子表明，高斯核也可用于简单非光滑曲线的采样点，但它会（如前一个例子所示）生成复杂的水平线，从而将曲线分解为若干光滑部分。使用拉普拉斯核则可避免这一问题，因为该集合或其采样点上的符号函数仅为 H¨older 连续，因此能够轻松适应曲线中的急转弯。即使在更复杂的非光滑例子中，高斯插值也会产生复杂且大多无用的等值集，但同时仍能像三角形的例子那样，在采样集上提供有用的法向量。图2展示了高斯核（左）和拉普拉斯核（右）的结果，其中使用了48个采样点，且 $\varepsilon = 10^{-5}$。我们通过两个例子说明了解析核插值的高精度及其相关伪影

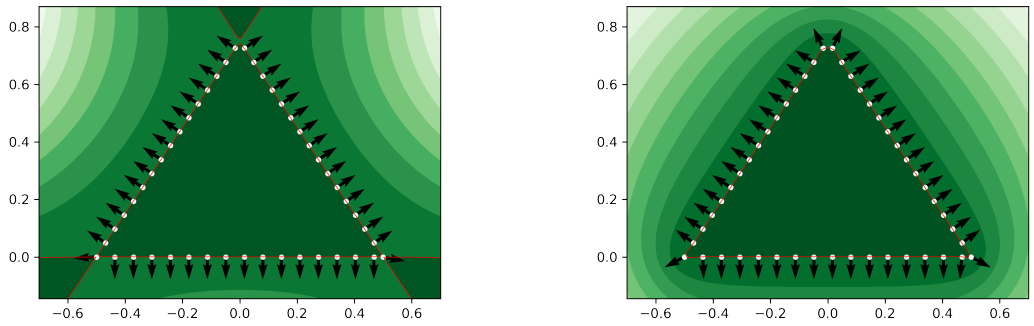

FIGURE 2. 使用高斯核插值和拉普拉斯核插值分别从48个采样点重建三角形，结果分别见左图和右图。

曲线示例。在第一个示例中（见图3），我们计算了由一组样本点的符号函数所隐含的水平集，这些点位于一个椭圆的一半上；在第二个示例中（图4），我们计算了完整正方形以及缺角正方形所隐含的水平集。第一个示例展示了该方法进行解析延拓的能力。第二个示例展示了解析函数的等值集如何尝试适应非光滑曲线的样本。这些示例进一步说明了

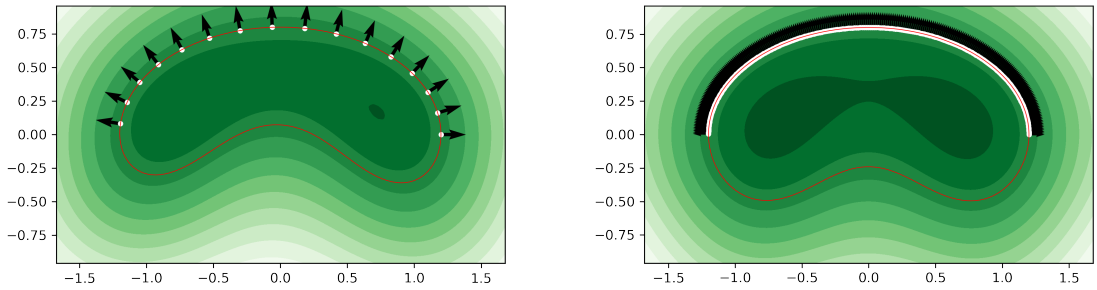

FIGURE 3. 由沿半个椭圆的 m 个点组成的精确样本的隐含曲线。左：$m = 16$。右：$m = 256$。

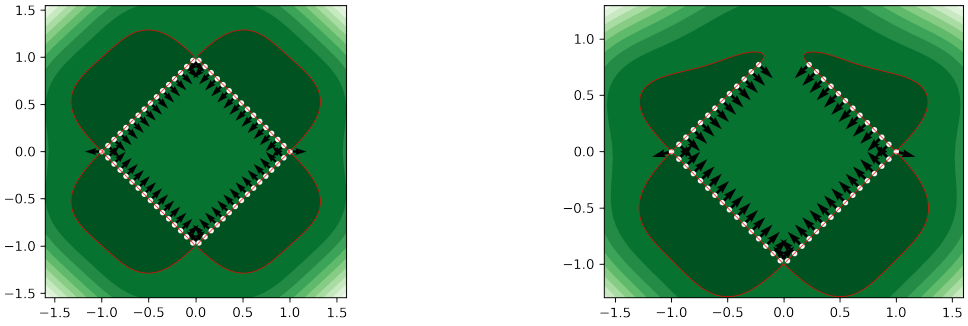

FIGURE 4. 完整正方形及去掉一个角后的正方形中精确样本点所对应的曲线。

文献中报告、且使用径向基函数对散乱数据进行插值时观察到的断连问题，在很大程度上是由所选核函数的正则性（以及插值函数隐含的正则性）导致的，而非如有时所说，是由核函数的局部性（即快速衰减）导致的。事实上，采用正则性较低的核函数，或按前文所述进行正则化，几乎可以彻底解决这一问题。

5.2. 二次曲面。 我们简要考虑（局部）二次曲面的情形，以重新讨论关于“平坦”点的评论，并展示当对称性被打破时，该方法能够恢复实际主曲率的近似值。我们考虑由 $z = \frac{a}{2}x^2 - \frac{b}{2}y^2 (a,\ b > 0)$ 定义的曲面，并聚焦于原点。当 $a \neq b$ 时，该方法可以恢复主曲率的近似值。事实上，取位于 $[-.5,\ .5] \times [-.5,\ .5]$ 上方的曲面片，并使用 16×16 个点的规则离散化，高斯和正则化的（$\varepsilon = 1$）拉普拉斯算子得到了表1中的结果。使用 $a = b = 1$ 进行相同计算，得到的结果为

核	κ_1	κ_2
高斯	1.000×10^0	-2.000×10^0
拉普拉斯	1.003×10^0	-1.992×10^0

TABLE 1. 二次曲面。使用高斯核和拉普拉斯核计算原点处的主曲率，针对 $a = 1$ 和 $b = 2$ 使用了256个点。

表2。在这种情况下，对称性会导致梯度非常小，其长度分别为 3.1948×10^{-11}（高斯）和 5.6192×10^{-12}（拉普拉斯），因此曲率的数值估计非常不准确。有趣的是，如果用定义域的随机样本替换“规则”样本

核	κ_1	κ_2
高斯	-4.4615×10^{10}	$-3.1650e \times 10^5$
拉普拉斯	-3.8913×10^9	3.5405×10^7

TABLE 2. 二次曲面。使用高斯核函数和拉普拉斯核函数，针对 $a = b = 1$ 利用256个点计算原点处的主曲率。

（均匀分布），拉普拉斯插值（病态程度较低）便能够恢复实际曲率。事实上，对于大小相同的随机样本，可以得到

$$\kappa_1 = 9.8534 \times 10^{-1},\ \kappa_2 = -1.0138 \times 10^{0},$$

一种在多次运行中保持一致的近似。如前所述，这是仅能获取局部信息时遇到的问题；而处理具有明确定义的内外侧的闭光滑曲面时，该问题便会消失。

5.3. 球面的拉普拉斯-贝尔特拉米算子。 现在我们考虑数值计算函数 f 的拉普拉斯-贝尔特拉米算子。该函数由单位球面†的斐波那契离散化中 m 个点 X 处的取值 Y 给出。表 3 报告了在球面上随机选取的 32 个点（因此这些点与离散化点无关）处，函数值、其曲面梯度以及作用于该函数的拉普拉斯-贝尔特拉米算子的平均相对 L^∞误差。所选函数

m	f 误差	$\nabla_{\mathbb{S}^2} f$ 误差	$\Delta_{\mathbb{S}^2} f$ 误差
64	3.811×10^{-2}	3.857×10^{-1}	5.673×10^{-1}
128	8.538×10^{-4}	1.579×10^{-1}	1.654×10^{-2}
256	2.623×10^{-6}	4.271×10^{-5}	3.136×10^{-5}
512	1.117×10^{-9}	2.971×10^{-8}	1.268×10^{-8}

TABLE 3. 不同离散化层级下函数求值（插值）、曲面nabla 和拉普拉斯-贝尔特拉米求值的平均相对 L^∞-误差 m

为 $f(x) = \sin\big(\pi(1+2x_3)\big)$，我们采用带有 $\varepsilon = 1$的拉普拉斯核。精确的曲面nabla 和拉普拉斯-贝尔特拉米算子可以计算

$$\nabla_{\mathbb{S}^2} f(x) = 2\pi \cos\big(\pi(1+2x_3)\big) \begin{bmatrix} -x_1x_2 & -x_2x_3 & 1-x_3 \end{bmatrix}^\top$$
$$\triangle_{\mathbb{S}^2} f(x) = 8\pi(x_3^2 - 1)\sin\big(\pi(1+2x_3)\big) - 4\pi x_3 \cos\big(\pi(1+2x_3)\big)$$

对于 $x \in \mathbb{S}^2$，并将其与使用 $u_{\mathbb{X}}$、 $\nu_{\mathbb{X}}$、 $H_{\mathbb{X}}$ 和 $u_{\mathbb{X},\,\mathbb{Y}}$通过第 3.2 节所述方法得到的数值结果进行比较。我们强调，该方法仅掌握球面上一组样本点处的 f，而 $u_{\mathbb{X},\,\mathbb{Y}}$ 是 $f|_{\mathbb{X}}$ 的延拓；也就是说，它确实在 $\mathbb{S}^2$ 上对 f 进行插值，但在远离球面处可能会有很大差异。特别是，它的梯度和 Hessian 可能与 f的梯度和 Hessian 几乎没有关系。

5.4. 圆环面。本节将说明该方法如何计算由以下参数化的环面的主曲率

$$\big([R_1 + R_2\cos(v)]\cos(u), [R_1 + R_2\cos(v)]\sin(u), R_2\sin(u)\big)\,,\ u, v \in [0, 2\pi),$$

其中 $R_1 = 2$和 $R_2 = .5$。曲率由 $\kappa_1 = -2$和 $\kappa_2 = \frac{\text{余弦}R_1+R_2}{\text{余弦}(v)}$给出，也就是说，一个是任意竖直圆的曲率，另一个则取决于所考虑点的高度及其到原点的距离。因此，我们随机选择 $u \in [0,\ 2\pi)$并将其固定，然后在对应竖直圆上 32 个等距点处数值计算曲率。对大小为 $|\mathbb{X}| = 64$，128，256，512，1024 的样本计算符号函数 $u_{\mathbb{X}}$。这些样本通过两种不同方式获得。第一种方式是从$[0,\ 2\pi)$ 中独立、均匀地随机选取 $u,\ v$，然后以与归一化曲面对应点处的值相应的概率接受样本 $(u,\ v)$

†基本思路是利用黄金比例在球面上生成点的不闭合螺旋，从而获得近似均匀分布（见 [30, 16]）。

面积（见 [12]）。第二种方式基于斐波那契格。尽管它是确定性的，但确实避免了聚集，且分布近乎均匀。对于第一种采样方法，表 4 展示了两种曲率（按大小排序）的 L^∞ 和 L^2 相对误差，样本则见图 5。在所有实验中，我们对两个核函数均使用 $\alpha = 10^{-10}$（因而限制了可达到的精度），并对拉普拉斯核使用 $\varepsilon = 1$。

m	L^∞ **(高斯)**	L^2 **(高斯)**	L^∞ **(拉普拉斯)**	L^2 **(拉普拉斯)**
64	1.85×10^{-1} / 1.72×10^{-1}	9.88×10^{-2} / 4.41×10^{-2}	1.02×10^{-1} / 2.21×10^{-1}	2.20×10^{-1} / 1.33×10^{-1}
128	1.77×10^{-2} / 1.61×10^{-2}	1.41×10^{-2} / 5.24×10^{-3}	5.26×10^{-2} / 1.08×10^{-1}	1.72×10^{-2} / 9.56×10^{-3}
256	5.09×10^{-5} / 1.74×10^{-4}	8.33×10^{-4} / 2.75×10^{-4}	8.61×10^{-3} / 7.94×10^{-3}	2.01×10^{-3} / 9.18×10^{-4}
512	2.23×10^{-8} / 1.19×10^{-7}	2.25×10^{-7} / 7.86×10^{-8}	1.59×10^{-3} / 9.46×10^{-4}	1.08×10^{-3} / 3.64×10^{-4}
1024	1.75×10^{-8} / 1.36×10^{-8}	5.99×10^{-8} / 2.33×10^{-8}	8.51×10^{-6} / 4.18×10^{-6}	3.78×10^{-6} / 1.39×10^{-6}

TABLE 4. 随机采样的环面。不同 m取值下，高斯核与拉普拉斯核的相对 L^∞ 和 L^2 误差。每个条目按照大小顺序列出两个主曲率的误差值。

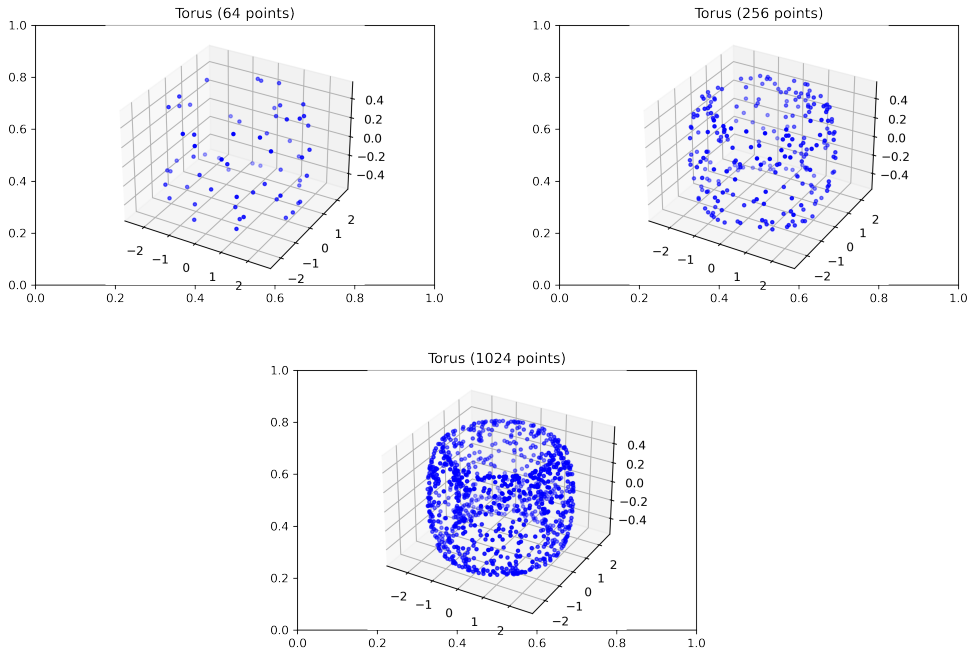

FIGURE 5. 按与表面积成正比的概率分布获得的样本。

表5和图 6展示了使用斐波那契格点法获得的相应结果 .

m	L^∞ **(高斯)**	L^2 **(高斯)**	L^∞ **(拉普拉斯)**	L^2 **(拉普拉斯)**
64	2.75×10^{-1} / 2.39×10^{-1}	1.86×10^{-1} / 9.61×10^{-2}	1.24×10^{-1} / 1.08×10^{-1}	8.90×10^{-2} / 5.06×10^{-2}
128	1.01×10^{-2} / 9.62×10^{-3}	1.48×10^{-2} / 6.71×10^{-3}	4.42×10^{-2} / 3.27×10^{-2}	2.53×10^{-2} / 1.18×10^{-2}
256	3.39×10^{-4} / 2.36×10^{-4}	1.66×10^{-4} / 6.53×10^{-5}	3.00×10^{-3} / 2.08×10^{-3}	5.84×10^{-4} / 2.64×10^{-4}
512	3.35×10^{-7} / 2.31×10^{-7}	2.64×10^{-7} / 8.60×10^{-8}	3.11×10^{-4} / 2.08×10^{-4}	3.34×10^{-5} / 1.64×10^{-5}
1024	9.93×10^{-10} / 8.59×10^{-10}	1.28×10^{-8} / 6.10×10^{-9}	1.16×10^{-6} / 7.40×10^{-7}	4.79×10^{-7} / 1.85×10^{-7}

TABLE 5. 环面上的斐波那契格。不同 m 值下，高斯核和拉普拉斯核的相对 L^∞ 误差和 L^2 误差。每个条目按大小顺序列出两个主曲率对应的误差值。

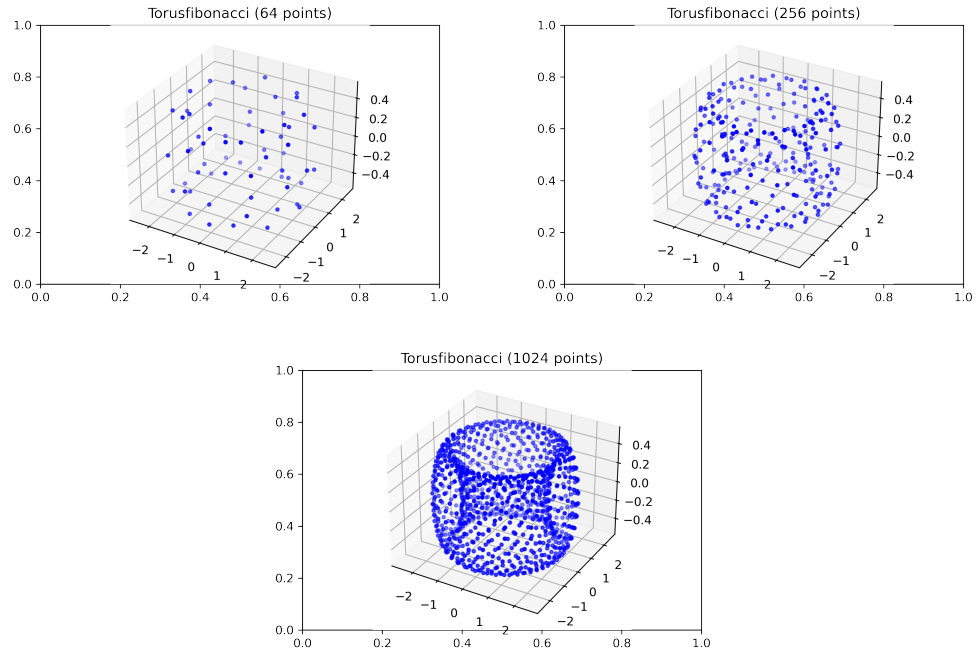

FIGURE 6. 所用的斐波那契采样点。

5.5. 椭球的高斯曲率。 考虑椭球 $[\frac{x_1^2}{a^2}+\frac{x_2^2}{b^2}+\frac{x_3^2}{c^2}=1]$，其 $a=2$、$b=.5$、$c=1$，以及由 m 个点组成的斐波那契离散化 $\mathbf{X}$。使用后者近似其高斯曲率

$$K=\kappa_1\kappa_2=\frac{1}{a^2b^2c^2\left(\frac{x_1^2}{a^4}+\frac{x_2^2}{b^4}+\frac{x_3^2}{c^4}\right)^2}$$

在随机选取的 32 个点处（我们首先在环境空间中使用正态分布在球面上均匀选取点并将其归一化，然后分别将各分量乘以 a，b 和 c）。表6记录了使用参数为 $\varepsilon=1$ 的拉普拉斯核以及不同离散化级别时观察到的相对误差。

5.6. 含噪情形。 所构建的框架允许我们通过简单地将硬约束替换为保真项，无缝地以近似插值替代插值。有趣的是，在此情形下，这种正则化也会反映在符号函数的水平集上，并

$\lvert\mathbb{X}\rvert$	64	128	256	512	1024
相对误差	2.428×10^{-1}	8.408×10^{-2}	1.186×10^{-2}	5.439×10^{-4}	4.995×10^{-5}

TABLE 6. 椭球的高斯曲率误差。

因此对等值集产生几何影响。我们通过一些数值实验来说明这一点。这里我们再次考虑曲线，因为它们更容易可视化。图7展示了基于32个点的样本对椭圆进行重建的结果（红色曲线）。这些点在参数域中等距分布，随后沿均匀随机选取的方向移动随机距离 $[0,\ 0.1]$ 从而得到X。红色曲线对应于由 $u_{\mathbb{X}}$ 给出的水平

$$\overline{u}_{\mathbb{X}} = \frac{1}{|\mathbb{X}|} \sum_{x \in \mathbb{X}} u_{\mathbb{X}}(x),$$

即数据集上符号函数的平均值（精确插值时该值应为 1）。请注意，我们使用正则化参数 $\alpha = .1$ 来抵消噪声的影响。我们还按照本节开头的说明，将隐含法向量和隐含次水平集可视化。此外，我们还用黄色绘制了在未扰动数据集（无噪声）上计算得到的精确插值函数的隐含 1 水平集，以便直观展示重建的质量。请注意

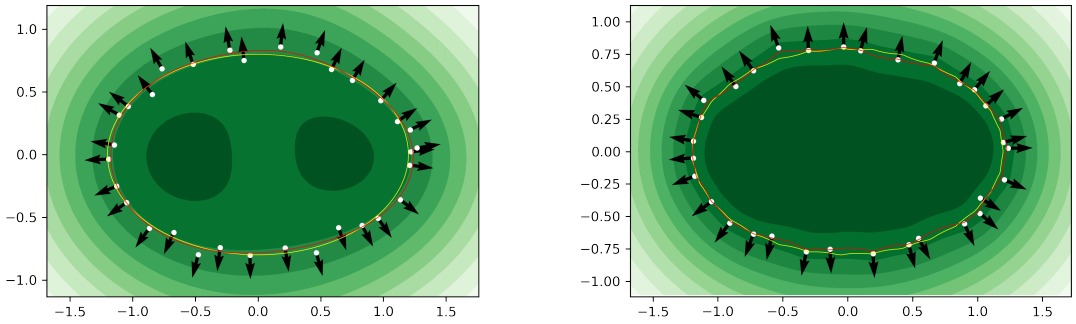

FIGURE 7. 根据椭圆点的随机扰动样本进行重建。左图使用高斯核，右图使用拉普拉斯核，且$\varepsilon = 10^{-5}$。

拉普拉斯核（使用较小的正则化参数 $\varepsilon = 10^{-5}$）在 X 中的点以及原始数据集中的点（未直接显示）处呈现出较高曲率。若增加拉普拉斯核的正则化程度（$\varepsilon = 1$），其表现则与图8左侧所示的高斯核相似。图8右侧展示了使用拉普拉斯核（$\varepsilon = 1$）得到的重建结果，其中每个原始数据点都被独立地沿均匀分布的随机方向移动，移动距离则从 $[0, 0.25]$ 中均匀随机选取。

注5.2。 最后我们指出，在某些情况下，使用不同的核函数可能更有利：一种用于获取$\mathbb{X}$ 的几何信息，另一种用于插值$\mathbb{Y}$的值。当处理定义在光滑流形上的正则性有限的函数时，便可能出现这种情况。

REFERENCES

[1] Nachman Aronszajn 和 Kenneth T. Smith。贝塞尔势理论，第一部分。 *Annales de l'Institut Fourier*，11 1 385( ): –475,1961。

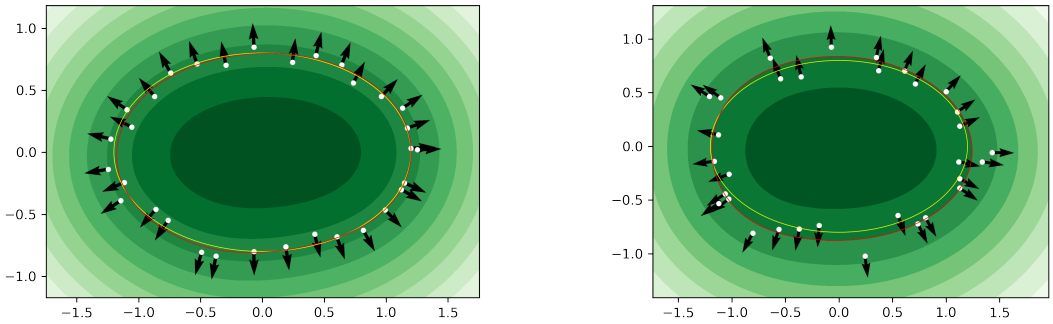

FIGURE 8. 根据其随机扰动的点样本重建椭圆。使用拉普拉斯核，并取 $\varepsilon = 1$。

[2] Matthew Berger、Andrea Tagliasacchi、Lee M. Seversky、Pierre Alliez、Ga¨el Guennebaud、Joshua A. Levine、Andrei Sharf 和 Claudio T. Silva。点云曲面重建综述。 *Computer Graphics Forum*，36 1 301( ): –329, 2017。[3] S. Brenner 和 L. Scott。 *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*。Springer，纽约，1994。[4] Jonathan C. Carr、Richard K. Beatson、Jon B. Cherrie、Tim J. Mitchell、Warren R. Fright、Bruce C. McCallum 和 Toby R. Evans。使用径向基函数重建和表示 3 *Proceedings of the* 维物体。载于，页 *28th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques (SIGGRAPH '01)* 67 76 码 –。ACM，2001。[5] Jonathan C. Carr、Richard K. Beatson、Bruce C. McCallum、W. Richard Fright、Trevor J. McLennan 和 Tim J. Mitchell。利用含噪距离数据进行平滑曲面重建。载于 *Proceedings of the 1st International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques in Australasia and South East Asia*，GRAPHITE '03，页码119–126，美国纽约州纽约市，2003年。ACM。[6] Ulrich Clarenz、Udo Diewald 和 Martin Rumpf。纹理曲面的多尺度光顺方法。载于 Hans-Christian Hege 和 Konrad Polthier（编）， *Visualization and Mathematics III*，页码245–260。Springer-Verlag，海德堡，2003年。[7] Naci Demirci 和 Megan A. Holland。曲率与皮层厚度变化：一项人群研究。 *Brain Structure and Function* 2022 ，。[8] Mathieu Desbrun、Mark Meyer、Peter Schr¨oder 和 Alan H. Barr。利用扩散和曲率流对不规则网格进行隐式光顺，载于 *Proceedings of the 26th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques (SIGGRAPH '99)* 317 324 1999 ，页码 –。ACM Press/Addison-Wesley Publishing Co.，。[9] Charlie Duclut、Aboutaleb Amiri、Joris Paijmans 和 Frank J¨ulicher。多边形曲面上的粗粒化曲率张量。 *SciPost Phys. Core*，5(1):011，2022年。发表于2022年3月11日。[10] Gregory E. Fasshauer 和 Michael J. McCourt。 *Kernel-Based Approximation Methods Using MATLAB*， *Interdisciplinary Mathematical Sciences*第19卷。World Scientific Publishing Co.，新加坡，2015年。[11] Bruce Fischl 和 Anders M. Dale。根据磁共振图像测量人类大脑皮层厚度。 *PNAS*，2000年。[12] James D. Foley、Andries van Dam、Steven K. Feiner 和 John F. Hughes。 *Computer Graphics: Principles and Practice* 2 1996 。 Addison-Wesley Professional，波士顿，第nd版，。[13] Edward J. Fuselier 和 Grady B. Wright。利用受限正定核在嵌入子流形上进行散乱数据插值：Sobolev 误差估计。 *SIAM Journal on Numerical Analysis*，50(3):1753–1776，2012年。[14] Michael Garland 和 Paul S. Heckbert。使用二次误差度量进行曲面简化。载于 *SIGGRAPH '97 Conference Proceedings* 209 216, 1997 ，页码 –，8月。[15] Tim Gatzke 和 Cindy Grimm。在三角网格上估计曲率。 *International Journal of Shape Modeling*，2006年。[16] ´Alvaro Gonz´alez。使用斐波那契格和经纬度格测量球面面积。， ( ): –。[17] P. Guidotti。从点云中提取流形信息。 *arXiv preprint*，2025年。[18] Paul S. Heckbert 和 Michael Garland。最优三角剖分与基于二次曲面的曲面简化。 *Mathematical Geosciences* 42 1 49 64, 2010 *Journal of Computational Geometry: Theory and Applications* 14 1 3 49 65, 1999 ，(–): –， 11月。

[19] Hugues Hoppe、Tony DeRose、Tom Duchamp、John McDonald 和 Werner Stuetzle。基于无组织点的曲面重建。载于 *Proceedings of the 19th Annual Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques*，SIGGRAPH '92，第 71–78 页，美国纽约州纽约市，1992 年。ACM。[20] Evangelos Kalogerakis、Patricio Simari、Derek Nowrouzezahrai 和 Karan Singh。离散曲面上的曲率稳健统计估计。载于 *Proceedings of the Fifth Eurographics Symposium on Geometry Processing (SGP)* 13 22 2007 ，第 – 页。

Eurographics 协会，。[21] Jan J. Koenderink 和 Andrea J. van Doorn。曲面形状与曲率尺度。 *Image and Vision Computing*，10 8 557 564，1992（）：–。[22] Bertil Mat´ern。 *Spatial Variation*，第 36 卷，属于 *Lecture Notes in Statistics*。Springer-Verlag，柏林，第 2 版，1986 年。[23] Mark Meyer、Mathieu Desbrun、Peter Schr¨oder 和 Alan H. Barr。三角剖分二维流形的离散微分几何算子。载于 *Visualization and Mathematics III*，第 35–57 页。Springer，2003 年。[24] Henry P. Moreton 和 Carlo H. S´equin。用于光顺曲面设计的泛函极小化。载于 *SIGGRAPH '92 Conference Proceedings* 167 176, 1992 ，第 – 页，7 月 。[25] Bryan S. Morse、Terry S. Yoo、Penny Rheingans、David T. Chen 和 K. R. Subramanian。使用紧支撑径向基函数对散布曲面数据进行隐式曲面插值。载于 *Proceedings of the International Conference on Shape Modeling and Applications* 01, 89 98, 2001 ，SMI ' 页 – 美国华盛顿特区，。IEEE。[26] Yutaka Ohtake、Alexander Belyaev 和 Hans-Peter Seidel。采用紧支撑基函数的三维散布数据插值多尺度方法。载于 *Proceedings of the Shape Modeling International 2003*，SMI '03，第 153–161 页，美国华盛顿特区，2003 年。IEEE计算机学会。[27] C´ecile Piret。正交梯度法：一种用于在任意曲面上求解偏微分方程的径向基函数法。 *Journal of Computational Physics*，231(14):4662–4675，2012 年。[28] Carl E. Rasmussen 和 Christopher K. I. Williams。 *Gaussian Processes for Machine Learning*。麻省理工学院出版社，2006 年。[29] S.-A. Sadegh-Zadeh 等。用于神经退行性疾病诊断的曲率估计与机器学习：系统综述。 *NeuroImage: Clinical*，2025年。[30] R. Swinbank 和 R. J. Purser。斐波那契网格：全球建模的一种新方法。 *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* 132 619 1769 1793, 2006 ，（）：–。[31] Gabriel Taubin。根据多面体近似估计曲面的曲率张量。载于 *Proceedings of ICCV* 902 907, 1995 ，第 – 页。[32] Grace Wahba。 *Spline Models for Observational Data* 59 *CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics* ，第 卷，。工业与应用数学学会，费城，宾夕法尼亚州，。[33] M. Welk、D. Theis、T. Brox 和 J. Weickert。基于正向-反向扩散率和扩散张量的偏微分方程反卷积。载于 R. Kimmel、N. Sochen 和 J. Weickert 编， *Scale Space 2005*，《计算机科学讲义》3459卷，第 585–597 页。施普林格出版社，2005年。[34] H. Wendland。 *Scattered Data Approximations*。《剑桥应用与计算数学专著》第 17 卷。剑桥大学出版社，剑桥，2004年。[35] Holger Wendland。径向基函数的快速求值：基于单位分解的方法。载于 *Approximation Theory X: Wavelets Splines and Applications* 473 483 2002 ，，，第 – 页。范德堡大学出版社，纳什维尔，田纳西州，。

University of California, Irvine, Department of Mathematics, 340 Rowland Hall, Irvine, CA 92697-3875, USA*Email address*: gpatrick@math.uci.edu