

Méthodes d'Interpolation à Noyau et Opérateurs Intégraux

Bertrand GAUTHIER
gauthier@emse.fr

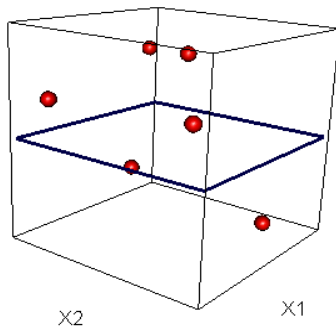
École Nationale Supérieure des Mines de Saint-Étienne

Mascot-Num
Avignon, 17-18-19 mars 2010

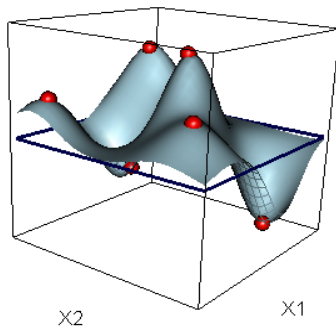
Plan

- 1 Introduction
- 2 Cadre Théorique
- 3 Principaux Résultats
- 4 Illustration
 - Exemple en Dimension 2
 - Cas des Équations Classiques
- 5 Conclusion/Perspectives

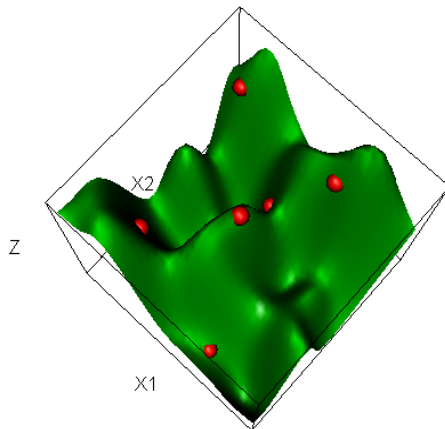
Contexte : Interpolation



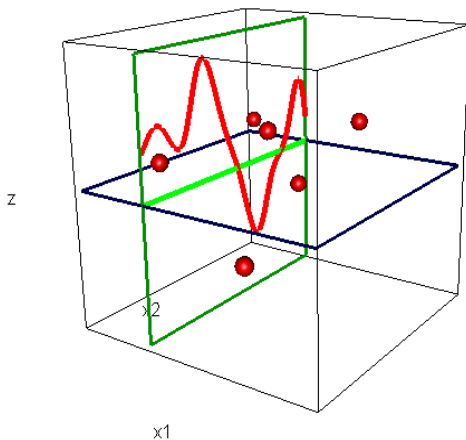
Contexte : Interpolation



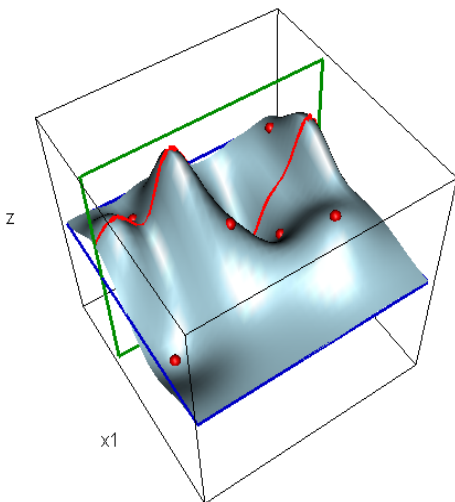
Contexte : Interpolation



Contexte : Interpolation

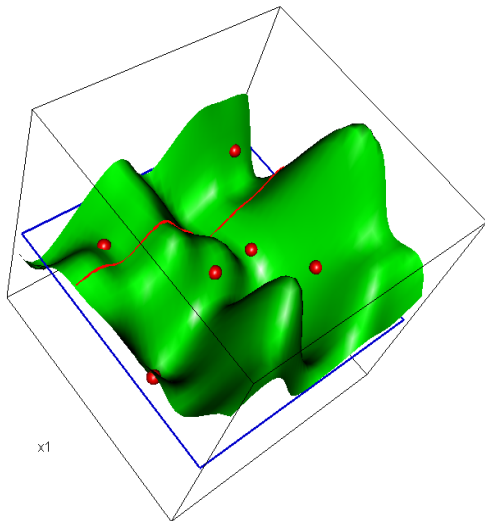


Contexte : Interpolation



Contexte : Interpolation

Simulation :



Méthodes à Noyau

Noyau

$K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ symétrique et défini positif

→ Choix de K à partir des a priori...

- Cadre fonctionnel : K noyau d'un RKHS \mathcal{H}
- Cadre probabiliste : K noyau de covariance d'un processus gaussien centré Z

Structure hilbertienne

Isomorphisme

RKHS \leftrightarrow espace gauss. associé au processus

$$K_x \leftrightarrow Z_x$$

$$(K_x | K_y)_{\mathcal{H}} = K(x, y) = \text{Cov}(Z_x, Z_y)$$

Hypothèse de travail

La fonction inconnue est

- une fonction du RKHS (noté φ)
- une réalisation du processus gaussien

Interpolation Optimale

Observations

Réponse connue aux points $s \in \mathcal{S} \subset \mathcal{X}$

Résultat théorique

- **Best-Predictor** (cadre proba.) :

$$\mathbb{E}(Z_x | Z_s, s \in \mathcal{S}) = \text{proj. ortho. de } Z_x \text{ sur } \overline{\text{span}\{Z_s, s \in \mathcal{S}\}}.$$

- **Interpolateur de norme minimale** (cadre fonc.) :

$$h_M(x) = \text{proj. ortho. de } \varphi \text{ sur } \overline{\text{span}\{K_s, s \in \mathcal{S}\}}.$$

$$\mathcal{H}_1 = \overline{\text{span}\{K_s, s \in \mathcal{S}\}}$$

Cadre Classique : nombre fini d'observations

Observations

Réponse connue aux points $\zeta^{(1)}, \dots, \zeta^{(n)}$

Équation du Krigeage

$$\mathbb{E} \left(Z_x | Z_{\zeta^{(1)}}, \dots, Z_{\zeta^{(n)}} \right) = \mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{z}$$

avec :

- $\mathbf{k}(x)$: vecteur des $K(x, \zeta^{(i)})$
- \mathbf{K} : matrice des $K(\zeta^{(i)}, \zeta^{(j)})$
- \mathbf{z} : vecteur des $Z_{\zeta^{(i)}}$

Problématique

Comment prendre en compte

- Réponse connue sur les bords du domaine
- Plus généralement, réponse connue en une infinité de points

→ sans discrétiser

→ sans modifier la structure du processus

Démarche

- 1 Réponse connue sur le support d'une mesure
- 2 Définition d'un opérateur intégral à l'aide du noyau $K(\cdot, \cdot)$ et de la mesure
- 3 Expression/Approximation de l'interpolateur à partir de la base de diagonalisation de l'opérateur

Hypothèses de travail

- μ une mesure sur \mathcal{S} dont le support est \mathcal{S}
- $K \in L^2(\mu \otimes \mu)$ ou bien, de façon plus restrictive, $(Z_x)_x$ à trajectoires $L^2(\mu)$

Opérateur Intégral

Pour $x \in \mathcal{X}$, et $f \in L^2(\mu)$

$$T_\mu[f](x) = \int_{\mathcal{S}} K(x, t)f(t)d\mu(t)$$

$T_\mu : L^2(\mu) \rightarrow L^2(\mu)$ auto-adjoint et positif.

Diagonalisation

Pour tout $f \in L^2(\mu)$:

$$T_\mu[f] \in \mathcal{H}_1$$

Décomposition Spectrale et Régularisation

$\phi_i \in \mathcal{H}_1$, $\|\phi_i\|_{L^2(\mu)} = 1$, $\lambda_i \in \mathbb{R}^+$ t.q.

$$T_\mu[\phi_i](x) = \int_S K(x,t)\phi_i(t)d\mu(t) = \lambda_i\phi_i(x)$$

A propos des ϕ_i

Remarques :

- ϕ_i b.o.n. de $L^2(\mu)$
- $\sqrt{\lambda_i}\phi_i$ b.o.n. de \mathcal{H}_1
- de plus

$$\forall h \in \mathcal{H}, (h|\phi_i)_{\mathcal{H}} = \frac{1}{\lambda_i} (h|\phi_i)_{L^2(\mu)}$$

$$\forall h \in \mathcal{H}, \forall f \in L^2(\mu), (T_{\mu}[f]|h)_{\mathcal{H}} = (f|h)_{L^2}$$

Théorèmes de Représentation

Cas Probabiliste

$$\mathbb{E}(Z_x | Z_s, s \in \mathcal{S}) = \sum_k \phi_k(x) \int_{\mathcal{S}} \phi_k(t) Z_t d\mu(t)$$

Cas Fonctionnel

Pour tout $\varphi \in \mathcal{H}$,

$$\mathbb{P}_{\mathcal{H}_1}[\varphi](x) = \sum_k \phi_k(x) \int_{\mathcal{S}} \phi_k(t) \varphi(t) d\mu(t)$$

Théorèmes de Représentation

Cas Probabiliste

$$\mathbb{E}(Z_x | Z_s, s \in \mathcal{S}) = \sum_k \phi_k(x) \int_{\mathcal{S}} \phi_k(t) Z_t d\mu(t)$$

Cas Fonctionnel

Pour tout $\varphi \in \mathcal{H}$,

$$\mathbb{P}_{\mathcal{H}_1}[\varphi](x) = \sum_k \phi_k(x) \int_{\mathcal{S}} \phi_k(t) \varphi(t) d\mu(t)$$

Formules indépendantes du choix de μ

Corollaires

\mathcal{H}_1 (muni de $(\cdot|\cdot)_{\mathcal{H}_1}$) RKHS de noyau

$$K_1(x, y) = \sum_{k \in \mathbb{N}} \lambda_k \phi_k(x) \phi_k(y).$$

idem pour $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_1^\perp \dots$

isomorphisme

$$\begin{aligned} T_\mu^{\frac{1}{2}} : L^2(\mu) &\longrightarrow \mathcal{H}_1 \\ \sum \alpha_k \phi_k &\longmapsto \sum \alpha_k \sqrt{\lambda_k} \phi_k \end{aligned}$$

et $T_\mu = T_\mu^{\frac{1}{2}} \circ T_\mu^{\frac{1}{2}}$.

Intérêt Pratique

$$\sum_k \phi_k(x) \int_S \phi_k(t) Z_t d\mu(t)$$

→ Problèmes numériques

Série Tronquée

$$\sum_{k=1}^N \phi_k(x) \int_S \phi_k(t) Z_t d\mu(t)$$

⇒ Approximation de la solution, dans la base $\{\phi_1, \dots, \phi_N\}$, au sens des Moindres-Carrés $L^2(\mu)$.

Dépendance par rapport au choix de μ

→ Conserver les fonctions propres associée aux N plus grandes valeurs propres.

Réponse Connue sur un Cercle

Noyau Gaussien

$$K_{\theta}(x, y) = e^{-\frac{\|x-y\|^2}{\theta}}, \text{ avec } \theta = 2$$

Ensemble \mathcal{S}

Cercle centré en $(0, 0)$ et de rayon 3

On souhaite simuler un processus de covariance K sachant que ce dernier est nul sur le cercle

Mesure

Mesure de Lebesgue sur le cercle

Étude Spectrale

Opérateur

$$T_{\mu}[f](x) = \int_0^{2\pi} K(x, (R \cos(\omega), R \sin(\omega))) f((R \cos(\omega), R \sin(\omega))) R d\omega$$

Fontions propre

Restriction au cercle :

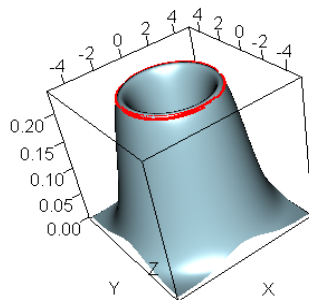
- constante
- proportionnelle à $\cos(n\omega)$
- proportionnelle à $\sin(n\omega)$

Étude Spectrale

Fct Propre constante sur le cercle :

$$\lambda_0 = R e^{-\frac{2R^2}{\theta}} \int_0^{2\pi} e^{-\frac{2R^2}{\theta}} \cos(\omega) d\omega$$

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\lambda_0} \int_0^{2\pi} K(x, (R \cos(\omega), R \sin(\omega))) \frac{R}{\sqrt{2\pi R}} d\omega$$

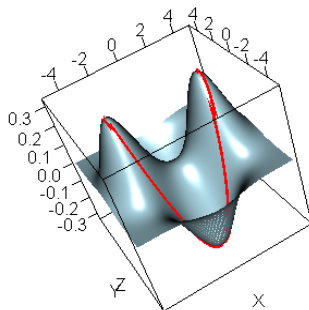


Étude Spectrale

Fct Propre prop. à $\cos(n\omega)$ sur le cercle (graph pour $n=2$) :

$$\lambda_{Cn} = R e^{-\frac{2R^2}{\theta}} \int_0^{2\pi} e^{-\frac{2R^2}{\theta} \cos(\omega)} \cos(n\omega) d\omega$$

$$\phi_{Cn}(x) = \frac{1}{\lambda_{Cn}} \int_0^{2\pi} K(x, (R \cos(\omega), R \sin(\omega))) \cos(n\omega) \frac{R}{\sqrt{\pi R}} d\omega$$

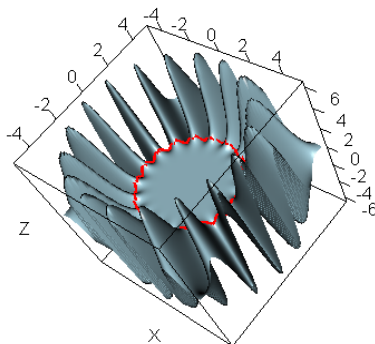


Étude Spectrale

Fct Propre prop. à $\sin(n\omega)$ sur le cercle (graph pour $n=18$) :

$$\lambda_{Sn} = \lambda_{Cn}$$

$$\phi_{Sn}(x) = \frac{1}{\lambda_{Sn}} \int_0^{2\pi} K(x, (R \cos(\omega), R \sin(\omega))) \sin(n\omega) \frac{R}{\sqrt{\pi R}} d\omega$$



Approximation de la covariance conditionnelle

Valeurs Propres

```

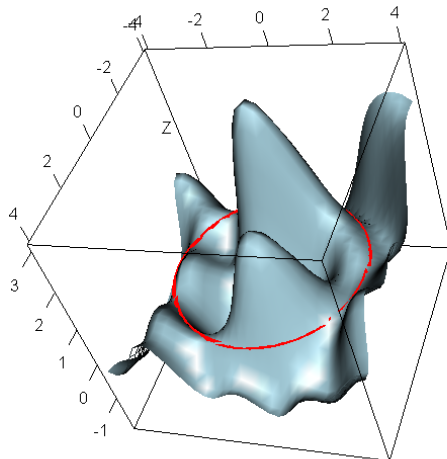
2.543927e+00 2.398134e+00 2.011008e+00 1.504353e+00 1.008106e+00
6.082584e-01 3.322637e-01 1.652402e-01 7.522338e-02 3.150974e-02
1.220389e-02 4.389996e-03 1.472786e-03 4.625664e-04 1.364831e-04
3.795235e-05

```

$$K_{app}(x, t) = K(x, t) - \left\{ \lambda_0 \phi_0(x) \phi_0(t) + \sum_{k=1}^{15} \lambda_{Ck} [\phi_{Ck}(x) \phi_{Ck}(t) + \phi_{Sk}(x) \phi_{Sk}(t)] \right\}$$

Exemple en Dimension 2

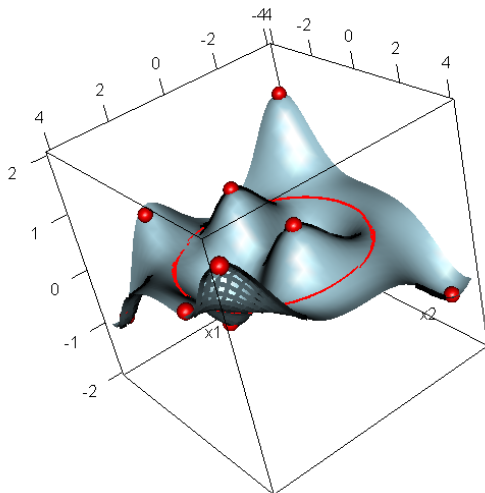
Simulation avec K_{app}



Exemple en Dimension 2

Krigeage avec K_{app}

Meilleur Prédicteur :



Jeu d'Écriture

$$\mathcal{S} = \{\zeta^{(1)}, \dots, \zeta^{(n)}\} \text{ et } \mu = \delta_{\zeta^{(1)}} + \dots + \delta_{\zeta^{(n)}}$$

$$T_{\mu}[f](x) = \sum_{i=1}^n K(x, \zeta^{(i)})f(\zeta^{(i)}).$$

$$\mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} = \sum_k \phi_k(x) \int_{\mathcal{S}} \phi_k(s) \varphi(s) d\mu(s)$$

Jeu d'Écriture

Diagonalisation de \mathbf{K}

$$\mathbf{K} = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^T$$

avec $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ et $\mathbf{P} = [\mathbf{v}_1 | \dots | \mathbf{v}_n]$

Spectre de T_μ

Spectre identique à \mathbf{K} et

$$\forall x \in \mathcal{X}, \phi_k(x) = \frac{1}{\lambda_k} \mathbf{k}(x)^T \mathbf{v}_k = \mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{v}_k$$

Jeu d'Écriture

$$\mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{k}(x)^T \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{y}$$

- $\mathbf{k}(x)^T \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^{-1}$ vecteur des $\phi_i(x) = \frac{1}{\lambda_i} \mathbf{k}(x)^T \mathbf{v}_i = \mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{v}_i$
- $\mathbf{P}^T \mathbf{y}$ vecteur des $\mathbf{v}_i^T \mathbf{y}$, or

$$\mathbf{v}_i^T \mathbf{y} = \sum_{k=1}^n \phi_i(\zeta^{(k)}) \varphi(\zeta^{(k)}) = \int_{\mathcal{S}} \phi_k(\mathbf{s}) \varphi(\mathbf{s}) d\mu(\mathbf{s})$$

Jeu d'Écriture

On obtient bien :

$$\mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} = \sum_{i=1}^n \phi_i(x) \int_S \phi_i(t) \varphi(t) d\mu(t)$$

Démarche identique pour T_ν associé à K et

$\nu = m_1 \delta_{\zeta(1)} + \dots + m_n \delta_{\zeta(n)}$, avec $m_j > 0$: diagonalisation de \mathbf{MK}
 ($\mathbf{M} = \text{diag}(m_1, \dots, m_n)$) et

$$\begin{aligned} \mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y} &= \mathbf{k}(x)^T \mathbf{K}^{-1} \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{y} = \mathbf{k}(x)^T \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{P}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{y} \\ &= \mathbf{k}(x)^T \mathbf{P} \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{P}^{-1} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{P}^{-T} \mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{M} \mathbf{y} \\ &= \mathbf{k}(x)^T \mathbf{P} \left(\mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{M} \mathbf{K} \mathbf{P} \right)^{-1} \mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{M} \mathbf{y}, \dots \end{aligned}$$

- Couplage algorithmes spectraux et codes de krigeage,
- Estimation des paramètres,
- Généralisation aux noyaux hilbertiens, approximation,
- planification d'expériences, . . .



N. Aronszajn.

Theory of reproducing kernels.

Trans. Amer. Math. Soc., 63:337–404, 1950.



R. M. Fortet.

Les operateurs integraux dont le noyau est une covariance.

Trabajos de Estadística y de Investigación Operativa,
36:133–144, 1985.



C. A. Micchelli and T. J. Rivlin.

Numerical Analysis Lancaster 1984, chapter Lectures on
optimal recovery, pages 21–93.

Springer Berlin / Heidelberg, 1985.



Laurent Schwartz.

Analyse Hilbertienne.

Hermann, 1979.



L. Schwartz.

Sous-espaces hilbertiens d'espaces vectoriels topologiques et noyaux associés.

J. Anal. Math., 13:115–256, 1964.



H. Sun and Q. Wu.

Application of integral operator for regularized least-square regression.

Mathematical and Computer Modelling, 49:276–285, 2009.



G. Wahba.

Spline Models for Observational Data.

SIAM, 1990.

Merci.