Plans exploratoires pour l'interpolation par noyaux sur des domaines non hypercubiques

Yves Auffray*, Pierre Barbillon†, Jean-Michel Marin‡

Afin d'approcher une fonction f type boite noire, définie sur un domaine $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d$, à partir d'un nombre limité d'évaluations $\{f(\mathbf{x}_1), \dots f(\mathbf{x}_N)\}$ où $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots \mathbf{x}_N\}$ est un plan d'expérience, nous utilisons une méthode d'interpolation par noyaux. Cette méthode conduit au même interpolateur que le krigeage mais son formalisme (voir [3] et [5]) permet de mettre en évidence des résultats garantissant une convergence ponctuelle de l'interpolateur sous une condition de bonne dispersion des points du plan d'expérience.
Soit K un noyau défini positif (nous pourrions aussi traiter de noyaux conditionnellement définis positifs). Nous notons $S_{\mathbf{X}}^K(f)$ l'interpolateur à noyaux de f sur $\mathbf{X}$. D'après les travaux de Schaback et Wendland (voir par exemple [2] et [4]), nous pouvons montrer que pour une large classe de noyaux,

$$\sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} |f(\mathbf{x}) - S_{\mathbf{X}}^K(f)(\mathbf{x})| \leq \|f\|_{\mathcal{H}_K} G_K(h_{\mathbf{X}})$$

où $\mathcal{H}_K$ est l'espace fonctionnel associé au noyau K (il est supposé que $f \in \mathcal{H}_K$), G_K est une fonction décroissante dépendant de la régularité du noyau et

$$h_{\mathbf{X}} = \sup_{\mathbf{y} \in \mathcal{D}} \min_{j \in \{1, \dots N\}} \|\mathbf{y} - \mathbf{x}_j\|^2_{\mathbb{R}^d} \, .$$

Comme un plan MINIMAX minimise $h_{\mathbf{X}}$, ces plans exploratoires couplés à l'interpolation par noyaux assurent la convergence de la méthode. Cependant, en grande dimension, il n'est pas envisageable de calculer des plans MINIMAX. En effet, il n'est pas possible d'évaluer le critère. Nous montrons alors qu'un plan MAXIMIN assure aussi la convergence et qu'il est ainsi une alternative crédible pour la construction de plans exploratoires. Rappelons qu'un plan MAXIMIN maximise

$$\delta_{\mathbf{X}} = \min_{i,j \in \{1, \dots N\}} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2_{\mathbb{R}^d} \, ,$$

tout en assurant que le nombre de paires réalisant cette distance est minimal. Nous montrons que $h_{\mathbf{X}} \leq \delta_{\mathbf{X}}$ et ainsi

$$\sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{D}} |f(\mathbf{x}) - S_{\mathbf{X}}^K(f)(\mathbf{x})| \leq \|f\|_{\mathcal{H}_K} G_K(\delta_{\mathbf{X}}) \, .$$

*Dassault Aviation et Université Paris-Sud
†Projet SELECT, INRIA Saclay, Université Paris-Sud
‡I3M, Université Montpellier 2

Nous nous intéressons à des domaines non hypercubiques. Dans ce cas, le recours à des hypercubes latins qui assurent de bonnes propriétés de projection est impossible. Notons que Morris et Michell [1] ont introduit un schéma permettant d'obtenir des plans de type MAXIMIN (le critère est légèrement différent) dans la classe des hypercubes latins.
Ici, nous proposons un algorithme permettant de fournir un plan MAXIMIN dans tout domaine $\mathcal{D}$ inclus dans un hypercube (domaine borné). Il s'agit d'un algorithme de recuit simulé. Après une procédure d'initialisation qui consiste à tirer uniformément un grand nombre de points dans $\mathcal{D}$, à estimer la covariance empirique des points tirés, notée $\hat{\Sigma}$, et enfin à conserver aléatoirement N points, notés $\mathbf{X}^{(0)} = \{\mathbf{x}_1^{(0)}, \ldots, \mathbf{x}_N^{(0)}\}$, nous itérons les étapes suivantes, pour $t = 1, \ldots$:

Algorithme .

1. *Choix d'une paire de points* $(\mathbf{x}_i^{(t)}, \mathbf{x}_j^{(t)})$ *dans* $\mathbf{X}^{(t)}$ *suivant une loi multinomiale dont les probabilités sont proportionnelles à* $\frac{1}{\|\mathbf{x}_i^{(t)} - \mathbf{x}_j^{(t)}\|}$ *;*
2. *Choix avec probabilité* $\frac{1}{2}$ *de l'un des deux points, notons* $\mathbf{x}_k^{(t)}$ *le point retenu ;*
3. *Utilisation d'une marche aléatoire gaussienne pour proposer un nouveau point :*
$$\mathbf{x}_k^{prop} \sim \mathcal{N}_d(\mathbf{x}_k^{(t)}, \tau_t \hat{\Sigma}) \,,$$
la configuration proposée est notée
$\mathbf{X}^{prop} = \{\mathbf{x}_1^{(t)}, \ldots, \mathbf{x}_{k-1}^{(t)}, \mathbf{x}_k^{prop}, \mathbf{x}_{k+1}^{(t)}, \ldots, \mathbf{x}_N^{(t)}\}$ *;*
4. *Si* $\mathbf{x}_k^{prop} \in \mathcal{D}$*, accepter* $\mathbf{X}^{(t+1)} = \mathbf{X}^{prop}$ *avec probabilité*
$$\min\left(1, \exp\left(\frac{\delta_{\mathbf{X}^{prop}} - \delta_{\mathbf{X}^{(t)}}}{T_t}\right) \frac{q(\mathbf{X}^{(t)}|\mathbf{X}^{prop})}{q(\mathbf{X}^{prop}|\mathbf{X}^{(t)})}\right) \,,$$
sinon $\mathbf{X}^{(t+1)} = \mathbf{X}^{(t)}$.

Dans cet algorithme, q désigne le noyau de transition entre les configurations. On utilise des schémas de décroissante type $\frac{c}{log(t)}$ pour la température T_t et la variance τ_t. Les performances de cet algorithme seront évaluées sur de nombreux exemples et des résultats de convergence seront présentés.

Références

[1] T. Mitchell M. Morris. Exploratory designs for computational experiments. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 1995.

[2] R. Schaback. Error estimates and condition numbers for radial basis function interpolation. *Advances in Computational Mathematics*, 1995.

[3] R. Schaback. Kernel-based meshless methods. 2007.

[4] H. Wendland. *Scattered data approximation*, volume 17 of *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics.* Cambridge University Press, 2005.

[5] P. Barbillon Y. Auffray. Kernel interpolation. Technical report, INRIA, 2009.