

Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

Interpolation in Reproducing Kernel Hilbert Space (RKHS)

Pr Geneviève BARRO/KABRE

November 2016

- Pr. Geneviève BARRO, Epouse KABRE
- Grade: Maître de Conférences
- Chercheur au Laboratoire d'Analyse Numérique, d'Informatique et de Biomathématique (LANIBIO)
- Enseignant Chercheur à l'Unité de Formation et de Recherche en Sciences Exactes et Appliquées (UFR/SEA) et en Science Economique et de Gestion(UFR/SEG)
- Université OUAGA I et Université OUAGA II
- barro_genevieve@yahoo.fr
- Spécialisés :
 - Modélisation mathématique et simulation numérique
 - Statistique et économétrie
 - Expert en création et gestion de formations ouvertes et à distance

Plan de l'exposé

① Concepts de base

Plan de l'exposé

- 1 Concepts de base
- 2 **Problématique**

Plan de l'exposé

- 1 Concepts de base
- 2 Problématique
- 3 Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

Plan de l'exposé

- ① Concepts de base
- ② Problématique
- ③ Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications
- ④ Sur une approximation d'un problème d'interpolation

1.1. Calcul ab initio

- **ab initio** (locution latine) signifie depuis le début (commencement) et est utilisée dans plusieurs contextes
 - En science : s'il repose sur les lois physiques de base et établies sans postulats additionnels ou modèles spéciaux

1.1. Calcul ab initio

- **ab initio** (locution latine) signifie depuis le début (commencement) et est utilisée dans plusieurs contextes
 - En science : s'il repose sur les lois physiques de base et établies sans postulats additionnels ou modèles spéciaux
 - Par exemple, un calcul ab initio des propriétés de l'eau liquide devrait débiter

1.1. Calcul ab initio

- **ab initio** (locution latine) signifie depuis le début (commencement) et est utilisée dans plusieurs contextes
 - En science : s'il repose sur les lois physiques de base et établies sans postulats additionnels ou modèles spéciaux
 - Par exemple, un calcul ab initio des propriétés de l'eau liquide devrait débiter
 - avec les propriétés des atomes d'hydrogène et d'oxygène constitutifs et les lois de l'électrodynamique

1.1. Calcul ab initio

- **ab initio** (locution latine) signifie depuis le début (commencement) et est utilisée dans plusieurs contextes
 - En science : s'il repose sur les lois physiques de base et établies sans postulats additionnels ou modèles spéciaux
 - Par exemple, un calcul ab initio des propriétés de l'eau liquide devrait débiter
 - avec les propriétés des atomes d'hydrogène et d'oxygène constitutifs et les lois de l'électrodynamique
 - à partir de ces bases, les propriétés des molécules d'eau isolées seraient déduites

1.1. Calcul ab initio

- **ab initio** (locution latine) signifie depuis le début (commencement) et est utilisée dans plusieurs contextes
 - En science : s'il repose sur les lois physiques de base et établies sans postulats additionnels ou modèles spéciaux
 - Par exemple, un calcul ab initio des propriétés de l'eau liquide devrait débiter
 - avec les propriétés des atomes d'hydrogène et d'oxygène constitutifs et les lois de l'électrodynamique
 - à partir de ces bases, les propriétés des molécules d'eau isolées seraient déduites
 - suivies par les calculs d'interactions sur des groupes de plus en plus importants de molécules d'eau

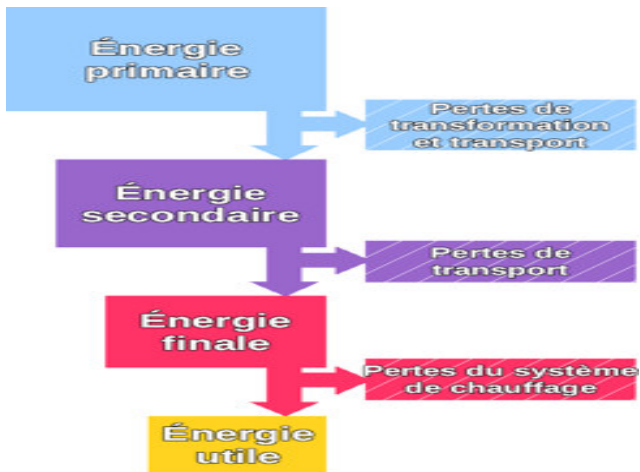
1.1. Calcul ab initio

- **ab initio** (locution latine) signifie depuis le début (commencement) et est utilisée dans plusieurs contextes
 - En science : s'il repose sur les lois physiques de base et établies sans postulats additionnels ou modèles spéciaux
 - Par exemple, un calcul ab initio des propriétés de l'eau liquide devrait débiter
 - avec les propriétés des atomes d'hydrogène et d'oxygène constitutifs et les lois de l'électrodynamique
 - à partir de ces bases, les propriétés des molécules d'eau isolées seraient déduites
 - suivies par les calculs d'interactions sur des groupes de plus en plus importants de molécules d'eau
 - jusqu'à ce que les propriétés de masse puissent être déterminées

1.2. Energie

- L'énergie est, en science physique, une mesure de la capacité d'un système à modifier un état, à produire un travail entraînant un mouvement, un rayonnement électromagnétique (dont la lumière) ou de la chaleur (échange thermique).

1.2.1. Energie: déclinaison



1.2.2. Energie: les différentes formes

Les différentes formes d'énergie

L'énergie est une force qui provoque un mouvement, de la chaleur ou de la lumière.
La nature produit toutes sortes d'énergies.

L'énergie éolienne

C'est l'énergie du vent. Le vent gonfle les voiles des bateaux, fait tourner les ailes des moulins ou des **éoliennes**.

L'énergie électrique

Avant un orage, de l'électricité s'accumule dans les nuages. Lorsque la foudre tombe, de l'énergie électrique part du bas des nuages pour toucher les objets pointus au sol (arbres, clochers...).

L'énergie nucléaire

Le Soleil produit naturellement de l'énergie nucléaire. C'est une étoile, une sorte d'immense four dans lequel des **atomes** légers **fusionnent** pour former des atomes plus lourds. Ils libèrent alors beaucoup d'énergie sous forme de lumière et de chaleur.

L'énergie musculaire

Nos muscles nous permettent de pousser, tirer, soulever, lancer... L'énergie musculaire nous sert, par exemple, à faire du vélo.

L'énergie thermique

La chaleur, produite par exemple par un feu de bois, est aussi appelée « énergie thermique ».

Dico

- **L'énergie mécanique**, associée aux objets, est la somme de deux autres énergies :
 - l'énergie cinétique
 - et l'énergie potentielle.
- Un objet possède une énergie de position (ou énergie potentielle) E_p qui augmente avec son altitude et une énergie cinétique (ou énergie de mouvement) E_c qui augmente avec sa vitesse.
- Par définition, l'énergie mécanique E_m , est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie de position.
- $E_m = E_p + E_c$

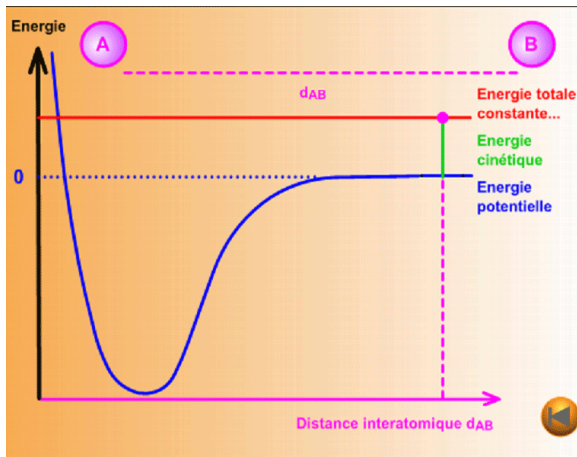
Energie nucléaire

- **L'énergie nucléaire** (fusion ou fission nucléaire) est l'énergie stockée au cœur des atomes
- Plus précisément dans les liaisons entre les particules (protons et neutrons) qui constituent leur noyau.
- C'est l'énergie qui permet l'union permanente des neutrons et des protons.
- Lorsque l'une de ces deux réactions physiques se produit, les atomes souffrent une légère perte de masse.
- Cette masse perdue se transforme en une grande quantité d'énergie thermique comme le découvrit Albert Einstein dans sa célèbre équation $E = mc^2$
- Dans les centrales nucléaires, on réalise des réactions de fission des noyaux d'uranium, et une partie de la chaleur dégagée est transformée en électricité.
- Dans les étoiles comme le Soleil, l'énergie des atomes est libérée par des réactions de fusion des noyaux de d'hydrogène.

1.3. Surface d'énergie potentielle

- L'énergie potentielle d'une molécule est la résultante des interactions entre les atomes qui la composent.
- Cette interaction étant une fonction de la distance entre ces atomes, l'énergie potentielle d'une molécule dépend de sa géométrie.
- Par exemple dans le cas d'une molécule diatomique (A-B), le potentiel ne dépend que d'une seule variable : la distance inter atomique d_{AB} .
- La surface d'énergie potentielle est ici une courbe dans un espace à 2 dimensions : $E = f(d_{AB})$.

1.3.1. Courbe de Morse $E=f(d)$

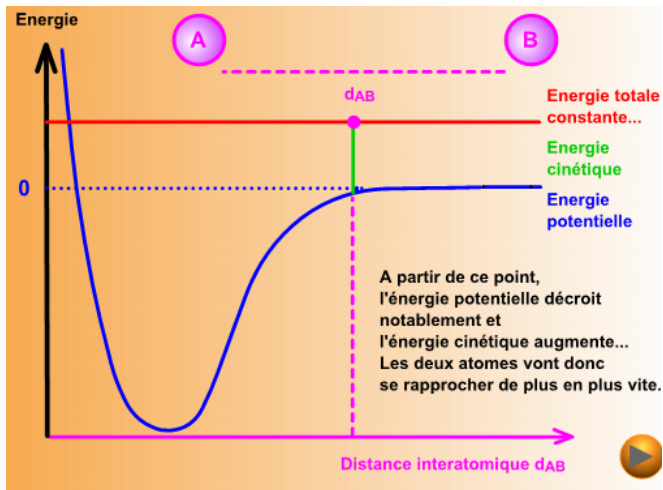


1.3.2. Courbe de Morse et puit de potentiel

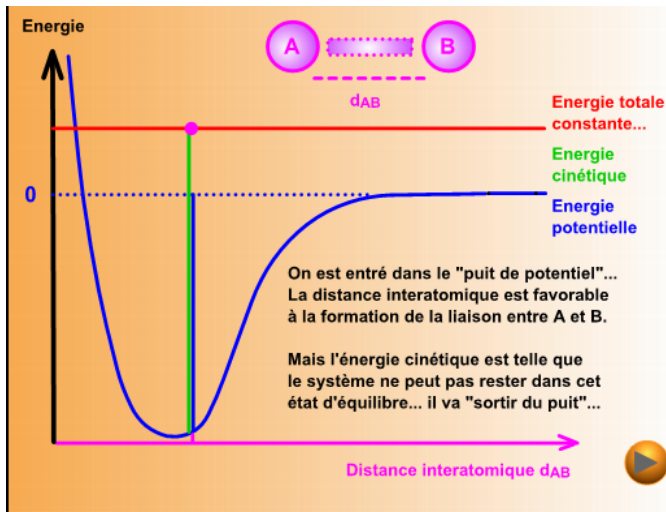
- Cette courbe d'énergie potentielle nous permet par exemple de connaître l'énergie de la liaison ainsi que la distance d'équilibre.
- Elle est appelée courbe de Morse et présente un puit de potentiel qui correspond à une situation particulière des deux atomes A et B, l'un par rapport à l'autre.

1.3.3. Rapprochement de A et B

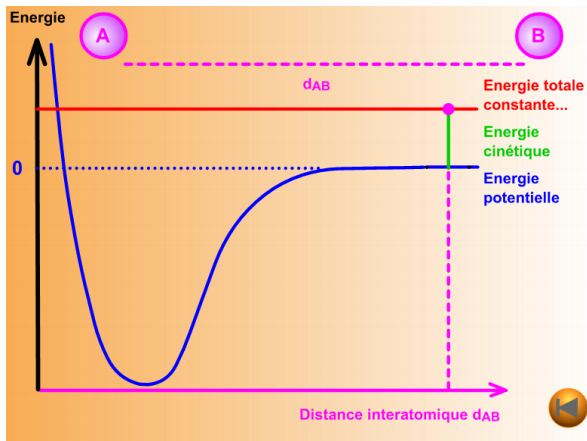
- Examinons le rapprochement de A et B:



1.3.4. Entrée dans le puit

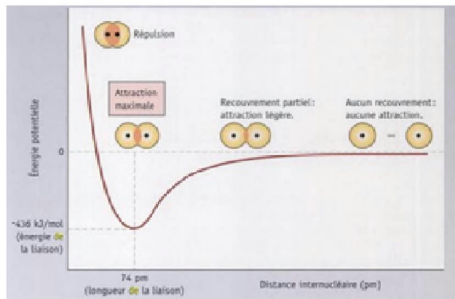


1.3.5. Répulsion



1.3.6. Exemple de H2

- La surface d'énergie potentielle est ici une courbe dans un espace à 2 dimensions : $E = f(d_{HH})$.

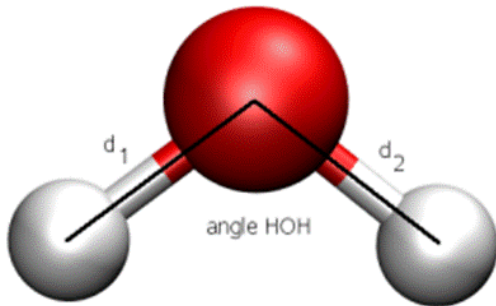


1.3.7. Exemple de H2: attraction et répulsion

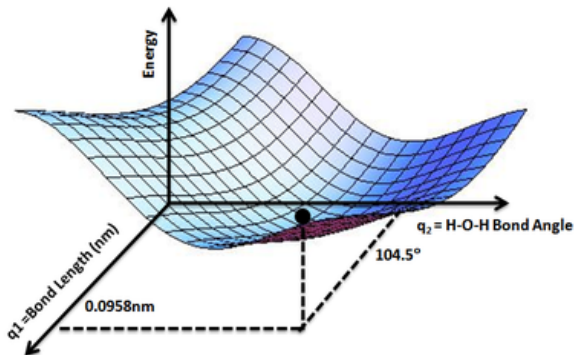
- On remarque que la courbe possède un minimum, appelé minimum d'énergie (énergie de liaison)
- $= -6436 \text{ KJ/mole}$ à une distance (longueur de liaison) $d_{HH} = 0,74 \text{ \AA} = 74 \text{ pm}$: c'est l'attraction maximale
- Et la distance interatomique pour laquelle la molécule est la plus stable.
- $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$; $1 \text{ pm} = 10^{-12} \text{ m}$; $1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$.
- A des distances inférieures, lorsque les atomes se rapprochent, un phénomène de répulsion (les répulsions entre noyaux et électrons deviennent importantes) augmente fortement l'énergie.
- A des distances supérieures, lorsque les 2 atomes s'éloignent, la liaison est plus faible, l'énergie tend de façon asymptotique vers une valeur $E = -0.767836 \text{ u.a.}$
- ($1 \text{ u.a} = 27,2 \text{ eV}$ et $1 \text{ eV} = 1,6022 \times 10^{-19} \text{ J}$).

1.3.8. Plus de deux atomes

- Pour une molécule non linéaire constituée de 3 atomes (H₂O par exemple), l'énergie va dépendre de 3 paramètres : les 2 distances interatomiques et l'angle formé par les 3 atomes. On a donc une fonction de type $E = f(d_1, d_2, \text{angle HOH})$.



1.3.9. Surface d'énergie potentiel de H₂O



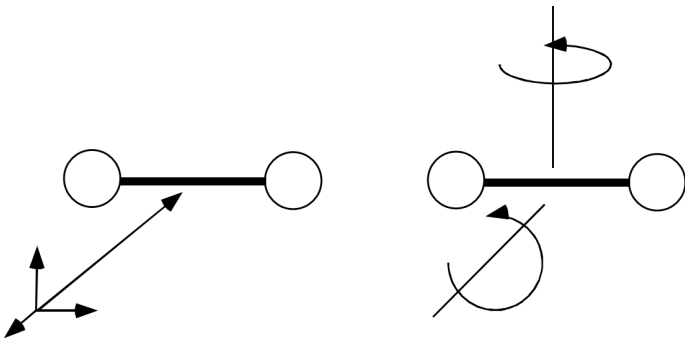
- Longueur de liaison O-H de 0,0958 nm et angle de liaison H-O-H de 104.5°.
- Le minimum global (déterminé numériquement) correspond à la configuration nucléaire la plus stable.

1.4. Cordonées internes d'une molécule

- Remarquons que dans le cas d'une molécule diatomique, le potentiel ne dépend que d'une seule variable : la distance inter atomique.
- En toute rigueur, la position d'un noyau est définie par trois coordonnées.
- Deux noyaux par six coordonnées.
- N noyaux par $3N$ coordonnées ou degrés de libertés.
- Le potentiel devrait donc dépendre de $3N$ coordonnées.

1.4.1. Coordonnées internes d'une molécule linéaire

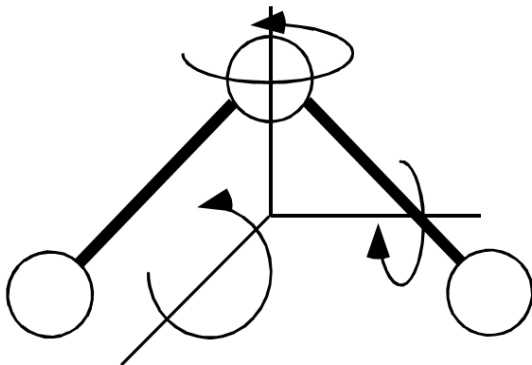
- En fait, 3 degrés de liberté serviront à positionner le centre de gravité de la molécule dans l'espace (translation) et 2 degrés de liberté détermineront l'orientation de la molécule dans l'espace (rotation) :



- Il reste donc $3N-5$ degrés de liberté pour décrire la conformation de la molécule, ce sont les degrés de liberté internes ou coordonnées internes de la molécule.

1.4.1. Coordonées internes d'une molécule non linéaire

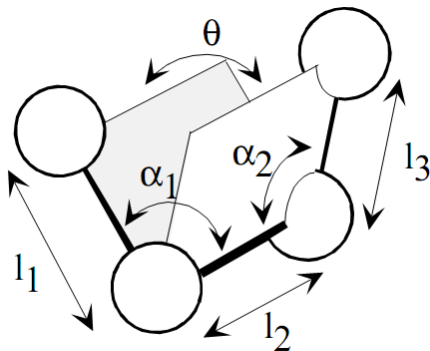
- Cette règle des $3N-5$ ne s'applique que pour les molécules linéaires
- En effet, pour le cas général d'une molécule non-linéaire, 3 degrés de liberté sont nécessaires pour décrire la rotation de la molécule :



- Le nombre de coordonnées internes pour une molécule non linéaire est donc $3N-6$.

1.4.1. Coordonées internes d'une molécule non linéaire à 4 atomes

- Les longueurs de liaison A-B, les angles A-B-C, les angles de torsions A-B-C-D
- Attention, il faut que la somme soit égale à $3N-6$. Il existe des méthodes pour déterminer un ensemble de coordonnées internes (Z-matrice).



1.4.1. Coordonées internes du n-butane : CH3-CH2-CH2-CH3

- $3N = 42$ et $3N - 6 = 36$
- La surface de potentiel a une dimension de 36. Il s'agit donc plutôt d'une hypersurface. Cette surface doit comporter plusieurs points remarquables comme des minima et des maxima. Si on veut repérer ces points il nous faudra explorer la topologie de cette surface. Faute de pouvoir la visualiser dans son ensemble on peut toujours en tracer des projections suivant les coordonnées internes.

2. Problématique

- Applications dans le domaine
- Méthodes de calcul
- Motivation de la recherche

2. Problématique

2.1.Applications dans le domaine

- Une surface d'énergie potentielle est généralement utilisée en mécanique quantique et mécanique statistique afin de modéliser les réactions chimiques et les interactions dans des systèmes chimiques et physiques .
- En plus de la production d'électricité, la technologie nucléaire a une grande importance dans le secteur:
 - de l'armée: les armes nucléaires
 - industriel: automatisation et de contrôle de la qualité.
 - de la médecine : produits radiopharmaceutiques, traitement de tumeurs, de cancer ou stérilisation
 - de l'agriculture: lutte contre les insectes nuisibles, la mise en place des conditions pour optimiser l'efficacité des engrais et de l'eau.
 - de l'environnement: déterminer les montants exacts des substances et les lieux où ils se produisent et de leurs causes polluantes, la résolution de problèmes tels que l'«effet de serre» et les pluies acides.
 - de la datation, et les applications en géophysique et la géochimie, qui exploitent l'existence de matières radioactives naturelles .

2. Problématique

2.2. Méthodes de calcul

- Les applications sont donc nombreuses et plusieurs méthodes sont utilisées pour le calcul des SEP.
- Certaines méthodes sont purement théoriques et nommées méthodes *ab initio*.
- L'art du calcul *ab initio* consiste à faire des approximations qui réduisent beaucoup la complexité du problème électronique, tout en maîtrisant la précision du résultat.
- Il existe une multitude de méthodes *ab initio* : Hartree-Fock (HF), Moller-Plesset (MP), coupled cluster (CC) et symmetry-adapted perturbation theory (SAPT).
- Chaque classe contient plusieurs méthodes, généralement ajustées chacune pour le calcul d'une propriété particulière ou l'application à un ensemble particulier de molécules.
- L'abondance des méthodes montre qu'il n'en existe pas une unique adaptée à tous les problèmes.

2. Problématique

2.3. Motivations

- Collaboration avec le LSAMA à EMT/LIA (CNRS-France). Les recherches portent sur:
 - les atomes, molécules, leur spectres à l'état isolé ou modifié par des effets différents: température, collisions
 - l'interprétation de ces spectres d'origine diverses et observés dans différents milieux de conditions physiques très différentes: milieu interstellaire, froid , chaud, très froid , dense, peu dense, plasma
 - la compréhension des conditions physiques de ces milieux, leur état dynamique, ..
 - la recherche des molécules (molécules anti oxydantes dans l'huile)
- Certains de ces spectres proviennent d'observation astrophysique à la recherche des conditions physiques des milieux observés et d'autres d'expériences faites au laboratoire ou ailleurs.
- Contribuer à la résolution numérique des problèmes posés et développer ab initio de SEP/Interpolation dans les RKHS.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.1. Introduction

- En 1950 : Introduit et développés par Nachman A. et Stefan B. [3] , les espaces de Hilbert à noyaux reproduisant sont des espaces classiques d'analyse fonctionnelle.
- En 1964, Schwartz [29] a introduit le concept de sous-espace hilbertien, établissant une bijection entre ces espaces et les noyaux positifs.
- La généralisation de ce concept, dans les bases hilbertiennes à noyau reproduisant a été proposée par Alpay [2; 28] (1982 et 1999).

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.1. Introduction

- La théorie des noyaux reproduisant a connu en partie un réel développement et applications dans divers domaines.
- En statistique traitant des problèmes de régression,...[6,17,19,21, 27, 31,36] (1990-2006)
- En probabilités (le processus gaussien et l'expression de variable intégrable,...);[14,30,33,34]; (2006-2013)
- En imagerie pour créer des algorithmes qui améliorent la qualité des images satellitaires,[10,20];(2004-2014)
- En Algèbre (élaboration de sous dualité, formes bilinéaires et structure algébriques); [23,32]; (2003-2014)

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.1. Introduction

- En analyse numérique [1,7,11,13, 16, 18, 22] (2007-2014) où :
 - des problème d'interpolation,
 - des EDP
 - et des problèmes aux limites y sont résolus,
 - des algorithmes ont été développés dans ces espaces pour la détermination de paramètres dans des problèmes inverse .
- Ainsi on a de plus en plus recours à ces espaces depuis les travaux précurseurs de Aronszajn sur les noyaux reproduisant, qui fournissent un cadre mathématique dans lequel se développe beaucoup de domaines mathématiques que physiques.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.1. Introduction

- Nous présentons les espaces de Hilbert à noyau reproduisant, et quelques résultats d'existence,
- Puis nous nous intéressons à quelques applications notamment en analyse numérique et à l'interpolation.
- Nous terminerons par des travaux en collaboration avec le LSAMA à la FS / EMT/LIA (CNRS-France).
- Mots clés : Espaces de Hilbert à noyau reproduisant, Equations Intégrales, Problèmes aux limites, Interpolation.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.2. Définitions

- Soit H un espace de Hilbert, de fonction $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, (Ω un ouvert de $\mathbb{R}^n$, $n \geq 1$) muni du produit scalaire noté $\langle ., . \rangle$ et de la norme correspondante $\| . \|$.
- Nous donnons quelques définitions et propriétés de base

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.2. Définitions

Une application $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ qui à tout (x, y) on associe $K(x, y)$ est appelée noyau reproduisant de H si les deux conditions suivantes sont satisfaites:

- ① $\forall y \in \Omega$, l'application $K(., y) : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ appartient à H ,
- ② $\forall y \in \Omega, \forall f \in H, f(y) = \langle f, K(., y) \rangle$ où $K(., y) : x \longmapsto K(x, y)$.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

Remarque

L'application $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ étant donnée, on notera:

$$K_y : \Omega \longrightarrow \mathbb{R} \quad (1)$$

$$x \longmapsto K(x, y) \quad (2)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.2. Définitions

Un espace de Hilbert qui possède un noyau reproduisant est dit espace de Hilbert à noyau reproduisant (en anglais reproducing kernel Hilbert space en abrégé (RKHS)).

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

proposition 1

Si un noyau reproduisant K de H existe alors il es unique.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

proposition 2

Pour qu'un noyau reproduisant K de H existe, il est nécessaire et suffisant que toute application f de H soit continue.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

proposition 3

le noyau reproduisant est positif au sens de E. H. Moore, i.e:

pour tout $\xi_1, \dots, \xi_n \in \mathbb{R}$ avec $n \geq 1$ et $n < \infty$ on a:

$$\sum_{i,j=1}^n K(y_i, y_j) \xi_i \xi_j \geq 0 \quad \forall y_1, \dots, y_n \in \Omega \quad (3)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

Corollaire

- ① $K(x, x) \geq 0$ pour tout $x \in \Omega$
- ② $|K(x, y)| \leq K(x, x)K(y, y)$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

Construction des RKHS et des noyaux:

Soit $K : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ positive et

$$H_K = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad f = \sum_{k=1}^n \alpha_k K_{y_k}, \quad \alpha_k \in \mathbb{R} \text{ et } y_k \in \Omega \right\} \quad (4)$$

H_K est un espace vectoriel muni du produit scalaire

$$\langle f, g \rangle_{H_K} = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^m \alpha_k \alpha_j K(y_k, y_j) \quad (5)$$

ainsi, pour tout $f \in H_K$ et pour tout $x \in \Omega$, $\langle f, K_x \rangle_{H_K} =$

$$\left\langle \sum_{k=1}^n \alpha_k K_{y_k}, K_x \right\rangle_{H_K} = \sum_{k=1}^n \alpha_k \langle K_{y_k}, K_x \rangle_{H_K} = \sum_{k=1}^n \alpha_k K_{y_k}(x) = f(x) \quad (6)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

Construction des RKHS et des noyaux:

On pose

$$\|f\|_{H_K} = \left(\sum_{i,j=1}^n \alpha_i \alpha_j \langle K_{x_i}, K_{x_j} \rangle_{H_K} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

$\langle \cdot, \cdot \rangle_{H_K}$ est une forme bilinéaire symétrique et positive par construction, donc est un produit scalaire dans H_K

On prend H le complété de $(H_K, \langle \cdot, \cdot \rangle_{H_K})$ de façon unique.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

Théorème N01 d'Aronszajn [3]. Soit Ω un ensemble quelconque. A tout noyau K défini positif sur $\Omega \times \Omega$ correspond un unique espace hilbertien reproduisant H_K de fonctions sur Ω dont le noyau reproduisant est K . Pour tout $f \in H_K$ et tout $x \in \Omega$, on a $\langle K(x, \cdot), f \rangle = f(x)$.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

Théorème N02 [29]. Soit $\Omega = x_1, \dots, x_n$ un ensemble quelconque, avec $x_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$ et $n > 0$. Soit $K : \Omega \times \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$ une fonction symétrique définie-positive. On suppose que K continue sur $\overline{\Omega \times \Omega}$ et on définit la fonction $K_{x_i} : \Omega \longrightarrow \mathbb{R}$, $x_j \longmapsto K_{x_i}(x_j) = K(x_i, x_j)$. Il existe un Hilbert $(H, \langle \cdot, \cdot \rangle_H)$ (et il s'agit de construire $\langle \cdot, \cdot \rangle_H$), sur lequel K possède la propriété de noyau reproduisant. i.e

- $\forall x_i \in \Omega, K_{x_i} \in H$
- $\forall x_i, x_j \in \Omega, \langle K_{x_i}, K_{x_j} \rangle_H = K(x_i, x_j)$
- le complété de l'espace engendré par les $K_{x_i} \ i = 1, \dots, p$, $\text{Vect}\{K_{x_i} \ x_i \in \Omega\}$, est dense dans H (pour la norme associée au produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_H$)
- si $f \in H$ alors f est continue, et $\forall x_i \in \Omega, f(x_i) = \langle K_{x_i}, f \rangle_H$.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

Mercer a introduit en 1909 la décomposition d'un noyau à partir d'un opérateur intégral dans une base.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.3. Résultats d'existence

Théorème N03 [29]

Si K est une fonction noyau sur $\Omega \times \Omega$, pour toute fonction $f \in L^2(\Omega)$ alors,

$$\int_{\Omega \times \Omega} f(x) K(x, y) f(y) dx dy \geq 0 \quad (8)$$

et il existe une base hilbertienne $(\psi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ de $L^2(\Omega)$ et une suite $(\lambda_j)_{j \in \mathbb{N}}$ telles que,

$$K(x, y) = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \psi_j(x) \psi_j(y) \quad (9)$$

où ψ_j et λ_j sont respectivement fonctions propres (orthogonales) et valeurs propres (positives) de l'opérateur T_K de $L^2(\Omega)$ défini par:

$$T_K(f)(x) = \int_{\Omega} f(z) K(x, z) dz. \quad (10)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

Let H a vectorial space with finished dimension and let $(e_1, \dots, e_n)$ an orthogonal basis of H . H admits a reproducing kernel :

$$K(x, y) = \sum_{i=1}^n e_i(x) e_i(y). \quad (11)$$

So each finished dimensional vectorial space is an RKHS.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

Let $\Omega = [0, 1]$ and

$$H = \left\{ \begin{array}{l} f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}, \text{ } f \text{ absolutely continuous} \\ f' \text{ exists almost everywhere, } f' \in L^2([0, 1]), f(0) = 0 \end{array} \right.$$

H is a Hilbert space with the scalar product

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 f'(x)g'(x)dx.$$

H is a Sobolev space and an associated reproducing kernel is ;

$$K(x, y) = \min(x, y).$$

As the derivative of $\min(., y)$ is the function $1_{(0, y)}$, we have:

$$\langle f, K(., y) \rangle = \int_0^1 f'(x)K'_y(x)dx = \int_0^y f'(x)dx = f(y).$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

Let $\Omega = \mathbb{R}$ and

$$H = H^1(\mathbb{R}) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}) / \exists g \in L^2(\mathbb{R}), \forall \varphi \in C_c^\infty(\mathbb{R}) \right. \\ \left. \int_{\mathbb{R}} f \varphi' = - \int_{\mathbb{R}} g \varphi \right.$$

H is a Hilbert space with the scalar product

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}} (f(x)g(x) + f'(x)g'(x)) dx$$

and H is a Sobolev space. H is a RKHS with the reproducing kernel

$$K(x, y) = \frac{1}{2} \exp(-|x - y|).$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

Let us introduced the space $W_2^1([a, b])$ defined by:

$$\left\{ \begin{array}{l} f \text{ / is an absolute continuous real valued functions on } [a, b] \\ f \text{ and } f' \in L^2([a, b]) \end{array} \right. \quad (12)$$

with a scalar product and a norm defined as follows:

$$\langle u, v \rangle = u(a)v(a) + \int_a^b u'(x)v'(x)dx, \quad \|u\| = \sqrt{\langle u, u \rangle}. \quad (13)$$

$W_2^1([a, b])$ is a RKHS with the reproducing kernel function :

$$R_x(t) = \begin{cases} 1 - a + t, & t \leq x \\ 1 - a + x, & t > x \end{cases} \quad (14)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

The space $W_{n+1}[0, b]$ defined by:

$$W_{n+1}[0, b] = \left\{ \begin{array}{l} u(x)/u^n(x) \in AC([0, b]), \\ \sum_{i=0}^{n-1} [\alpha_{ij} u^{(i)}(0) + \beta_{ij} u^{(i)}(b)] = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, n), \\ u^{n+1}(x) \in L^2([0, b]), x \in [0, b] \end{array} \right\}$$

and equipped with inner product

$$\langle u, v \rangle_{W_{n+1}[0, b]} = u^n(0)v^n(0) + \int_0^b u^{n+1}(x)v^{n+1}(x)dx \quad (15)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

$W_{n+1}[0, b]$ is a complete reproducing kernel Hilbert space with the following kernel

$$R_x(y) = \begin{cases} \sum_{i=1}^{2n+2} c_i(x) y^{i-1} & x < y \\ \sum_{i=1}^{2n+2} d_i(x) y^{i-1} & x \geq y \end{cases} \quad (16)$$

where c_i and d_j are already determined from formulated equations within the edge's conditions.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

$$W_2^3[0, 1] =$$

$$\{u / u'' \text{ absolutely continuous, } u''' \in L^2[0, 1], \quad u(0) = u(1) = 0\}$$

is a RKHS with the inner product, norm, reproducing kernel are given respectively by

$$\langle u(x), v(x) \rangle_{W_2^3} = u(0)v(0) + u'(0)v'(0) + u(1)v(1) + \int_0^1 u'''v''' dx$$

$$\|u\|_{W_2^3} = \sqrt{\langle u(x), u(x) \rangle_{W_2^3}}, \quad u, v \in W_2^3[0, 1]$$

$$K(x, y) = \begin{cases} K_1(x, y), & y \leq x \\ K_1(y, x), & y > x \end{cases} \quad (17)$$

where $K_1(x, y) =$

$$\frac{-1}{120}(x-1)y(yx^4 - 4yx^3 + -yx^2 + (y^4 - 5y^3 - 120y + 120)x + y^4).$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

The Sobolev space $W_2^3[0, T]$ defined by:

$$W_2^3[0, T] =$$

$$\left\{ \begin{array}{l} u(x)/u(x), u'(x), u''(x) \text{ are absolutely continuous real value function,} \\ u'''(x) \in L^2[0, T], \quad u(0) = 0, \quad u'(0) = 0 \end{array} \right.$$

with the inner product and norm given respectively by:

$$\langle u(x), v(x) \rangle_{W_2^3} = u(0)v(0) + u'(0)v'(0) + u''(0)v''(0) + \int_0^T u'''v''' dx$$

$$\|u\|_{W_2^3} = \sqrt{\langle u(x), u(x) \rangle_{W_2^3}}, \quad u, \quad v \in W_2^3[0, T]$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

$W_2^3[0, T]$ is a complete reproducing kernel Hilbert space and the reproducing kernel is defined by :

$$K_x(y) = K(x, y) = \begin{cases} K_1(x, y), & y \leq x \\ K_1(y, x), & y > x \end{cases} \quad (18)$$

where $K_1(x, y) = \frac{1}{120}y^2(y^3 - 5xy^2 + 10x^2(y + 3))$.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

Let u be a real value function. The space $W_3[0, 1]$ is defined by

$$W_3[0, 1] = \left\{ \begin{array}{l} u/u, u', u'' \text{ are absolutely continuous} \\ u, u', u'', u''' \in L^2[0, 1], \quad u(0) = 0, \quad u(1) = 0 \end{array} \right\}$$

The inner product in $W_3[0, 1]$ is given by

$$\langle u(y), v(y) \rangle_{W_3} = \int_0^1 (36uv + 49u'v' + 14u''v'' + u'''v''') dy$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

$W_3[0, 1]$ is a reproducing kernel Hilbert space and the associated reproducing kernel $R_x(y)$ is given by:

$$R_x(y) = \begin{cases} c_1 e^y + c_2 e^{-y} + c_3 e^{2y} + c_4 e^{-2y} + c_5 e^{3y} + c_6 e^{-3y}, & y \leq x \\ d_1 e^y + d_2 e^{-y} + d_3 e^{2y} + d_4 e^{-2y} + d_5 e^{3y} + d_6 e^{-3y}, & y > x \end{cases} \quad (19)$$

where c_i and d_i $i = 1, \dots, 6$ are calculated in [3]

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

Let u a real value function. The space $W_2[0, 1]$ is defined by

$$W_2[0, 1] = \left\{ \begin{array}{l} u/u, u' \text{ are absolutely continuous} \\ u, u', u'' \in L^2[0, 1], \quad u(0) = 0 \end{array} \right.$$

The inner product in $W_2[0, 1]$ is given by

$$\langle u(y), v(y) \rangle_{W_2} = \int_0^1 (4uv + 5u'v' + u''v'') dy, \text{ where } u, v \in W_2[0, 1]$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

$W_2[0, 1]$ is a reproducing kernel Hilbert space associated with the reproducing kernel $R_x^{\{2\}}(y)$ given by:

$$R_x^{\{2\}}(y) = \begin{cases} c_{21}e^y + c_{22}e^{-y} + c_{23}e^{2y} + c_{24}e^{-2y}, & y \leq x \\ d_{21}e^y + d_{22}e^{-y} + d_{23}e^{2y} + d_{24}e^{-2y}, & y > x \end{cases} \quad (20)$$

where $c_{2i}, d_{2i} \ i = 1, \dots, 5$ are calculated in [3].

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

let u a real value function. The space $W_1[0, 1]$ is defined by

$$W_1[0, 1] = \left\{ \begin{array}{l} u / u \text{ absolutely continuous} \\ u' \in L^2[0, 1] \end{array} \right\}$$

The inner product is given by

$$\langle u(y), v(y) \rangle_{W_1} = \int_0^1 (uv + u'v') dy, \quad u, v \in W_1[0, 1]$$

$W_1[0, 1]$ is a reproducing kernel Hilbert space with the associated reproducing kernel $R_x^{\{1\}}(y)$ given by:

$$R_x^{\{1\}}(y) = \frac{1}{2 \sinh(1)} [\cosh(x + y - 1) + \cosh(|x - y| - 1)].$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

Let $D = [0, 1] \times [0, 1]$. Assume that $\{p_i(t)\}_{i=1}^{\infty}$ is the complete normal orthogonal system of $W_1[0, 1]$ and $\{q_j(t)\}_{j=1}^{\infty}$ is the complete normal orthogonal system of $W_3[0, 1]$. We define $W_{(2,3)}(D)$ by:

$$W_{(2,3)}(D) = \{u(t, x) / u(t, x) = \sum_{i,j=1}^{\infty} c_{ij} p_i(t) q_j(x), \quad \{c_{ij}\} \in l^2\} \quad (21)$$

The inner product is given by: $\langle u_1, u_2 \rangle_{W_{(2,3)}} = \sum_{i,j=1}^{\infty} c_{ij} d_{ij}$;

where $u_1 = \sum_{i,j=1}^{\infty} c_{ij} p_i(t) q_j(x)$ and $u_2 = \sum_{i,j=1}^{\infty} d_{ij} p_i(t) q_j(x)$.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

If $u(t, x) = u_1(t)u_2(x)$, $v(t, x) = v_1(t)v_2(x) \in W_{(2,3)}(D)$, then

$$\langle u(t, x), v(t, x) \rangle_{W_{(2,3)}} = \langle u_1(t), v_1(t) \rangle_{W_2} \langle u_2(x), v_2(x) \rangle_{W_3} \quad (22)$$

$W_{(2,3)}(D)$ is a reproducing kernel space and its reproducing kernel is given by:

$$K_{(\zeta, \eta)}(t, x) = R_{\zeta}^{\{2\}}(t) R_{\eta}(x) \quad (23)$$

where $R_{\zeta}^{\{2\}}(t)$ and $R_{\eta}(x)$ are given by (20) and (19), respectively.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.4. Quelques exemples d'espace à noyau reproduisant

$W_{(1,1)}(D)$ is defined similar to $W_{(2,3)}(D)$ and it is a reproducing kernel Hilbert space

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Equations intégrales

- Une méthode basée sur les espaces de Hilbert à noyaux reproduisant a été proposée par S. Javadi, et al. [15] (2014) pour la résolution des équations intégrales de Fredholm et Volterra de seconde espèce définie par:

$$y(x) + p(x)y(h(x)) + \lambda \int_a^x k(x, t)y(t)dt = f(x) \quad a \leq x \leq b \quad (24)$$

et

$$y(x) + p(x)y(h(x)) + \lambda \int_a^b k(x, t)y(t)dt = f(x) \quad a \leq x \leq b \quad (25)$$

où $p(x)$, $h(x)$ et $f(x)$ sont des fonctions connues sur $[a, b]$, $k(x, t)$ une fonction continue donnée sur $[a, b] \times [a, b]$, λ une constante donnée. y est la fonction à rechercher.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Equations intégrales

- Résolution du problème en introduisant l'espace $W_2^1([a, b])$ avec le noyau reproduisant associé
- Plusieurs applications numériques opérées dans [15] avec des équations dont les solutions exactes sont connues, montrent que cette façon d'approcher la solution des équations intégrales de Fredholm et Volterra de seconde espèce est précise et a un coût de calcul très réduit.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Equations intégrales

Dans [12] (2013) H. Du, G. Zhao, C. Zhao ont développé une méthode basée sur les noyaux reproduisant d'un espace de Sobolev, pour approcher la solution d'une équation intrégro-différentielle de Fredholm avec une faible précision de singularité définie par:

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Equations intégrales

$$u^{(n)}(t) = \sum_{i=0}^{n_0} a_i(t) u^{(i)}(t) + \int_0^b K_i(t, s) u^{(i)}(s) ds + f(t), \quad 0 \leq t \leq b, \quad b > 0 \quad (26)$$

avec la condition aux bords donnée par:

$$\sum_{i=0}^{n-1} [\alpha_{ij} u^{(i)}(0) + \beta_{ij} u^{(i)}(b)] = 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (27)$$

- Où $n \in \mathbb{N}$, $0 \leq n_0 \leq n-1$, $\alpha_{ij}, \beta_{ij} \in \mathbb{R}$, $i = 0, 1, \dots, n-1$; $j = 1, 2, \dots, n$, $a_i, f \in C[0, b]$,
- $K_i(t, s)$ est le noyau possédant ou pas la singularité faible à $t = s$ et $u \in W[0, b]$ est à déterminer.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Equations intégrales

- Résolution du problème avec l'espace $W_{n+1}[0, b]$ et son noyau reproduisant associé
- Les différentes applications numériques ont montré que cette méthode donnait de résultats fiables pour les équations intégrales différentielles de Fredholm avec une faible précision de singularité (comparaison faite avec la méthode de Galerkin discrète [26])

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

Dans [13] (2011), F. Geng a utilisé la méthode RKHS pour résoudre une certaine classe de problème de perturbation singulière, définie par:

$$\begin{cases} \varepsilon u''(x) + a(x)u'(x) + b(x)u(x) = g(x) & 0 < x < 1 \\ u(0) = 0, \quad u(1) = 0 \end{cases} \quad (28)$$

où $0 < \varepsilon \ll 1$, $a(x)$, $b(x)$ et $g(x)$ sont des fonctions continues, $a(x) \geq \alpha > 0$ et α une constante.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

- Résolution du problème avec l'espace $W_2^3[0, 1]$ et son noyau reproduisant associé
- Dans les applications numériques, deux problèmes aux couches limites sont traités en combinant la méthode de transformation singulière inversible et la méthode à noyau reproduisant (EHNR).
- Les conditions aux bords aux points de transition sont obtenues par l'utilisation de continuité de la solution approchée et de ses dérivées en ces points.
- Les résultats numériques obtenues à partir de problème dont la solution analytique est connue ont montré que cette méthode produit des solutions approchées plus précises que la méthode classique [26].

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

Dans [37] (2010), B. Wu et X. Li, ont utilisé l'espace de sobolev $W_2^3[0, T]$, pour trouver une solution analytique approchée d'un problème d'oscillation non linéaire avec discontinuité définie par:

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

$$\begin{cases} v''(t) + \operatorname{sgn}(v) = 0, & 0 \leq t \leq T \\ v(0) = A, \quad v'(0) = 0 \end{cases} \quad (29)$$

où

$$\operatorname{sgn}(v) = \begin{cases} +1 & \text{si } v \geq 0 \\ -1 & \text{si } v < 0 \end{cases} \quad (30)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

- Résolution du problème avec l'espace $W_2^3[0, T]$ et son noyau reproduisant associé
- Les applications numériques montrent que cette méthode (EHNR) est bien adaptée pour les problèmes d'oscillations non linéaires avec discontinuité, comparaison faite avec la méthode des perturbations [4].

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

Dans [7] (2007), M. Cui et F. Geng, ont utilisés une méthode décompositionnelle basée sur la théorie du noyaux reproduisant pour résoudre l'équation de Burger (simple modèle des équations de Navier-Stoke) à coefficients variable en dimension un, avec conditions initiales et aux limites donnés par:

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

$$\left\{ \begin{array}{l} U_t + a_1(x, t) U U_x + a_2(x, t) U_{xx} = f(x, t), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t \leq 1 \\ U(0, x) = g_1(x) \\ U(t, 0) = g_2(t), \quad U(t, 1) = g_3(t) \end{array} \right. \quad (31)$$

où $a_1(x, t)$, $a_2(x, t)$ et $f(x, t)$ sont continues.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

- Résolution avec les trois espaces suivants muni chacun de son noyau reproduisant: $W_3[0, 1]$; $W_2[0, 1]$; $W_1[0, 1]$
- Les applications numériques avec des équations où la solution est connue, montrent que cette méthode est bien appropriée pour la résolution des équations de ce type, comme le montre l'exemple suivant:

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

Numerical example

In the process of computation, all the symbolic and numerical computations performed by using Mathematica. Results obtained by the method are compared with the exact solution and are found to be in good agreement with it.

Let the following problem:

$$\begin{cases} u_t + (xt + 1)u_{xx} + x^2u + (x + 1)u_x - t \sin(x)uu_x = f(x, t), \\ u(0, x) = 0, \\ u(t, 0) = 0, \quad u(t, 1) = 0 \end{cases} \quad (32)$$

where $0 \leq t \leq 1$, $0 \leq x \leq 1$ and $f(t, x) = 2t(xt + 1) + x^2 - x + t(2x - 1)(x^2 - x)t^2 \sin(x) + x^3(x - 1)t + (x + 1)(2x - 1)t$. The true solution is $(x^2 - x)t$.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

Numerical exemple

Using the decompositional method based on reproducing kernel, 100 points are choosed on $D = [0, 1] \times [0, 1]$. The approximate solution is $u_{100}(t, x)$ on D . The numerical results are given in Tables 1 and 2.

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

Table1 : Comparisons of results at $t = 0.08$

x	<i>True solution $u(x, t)$</i>	<i>Approximate solution u_{100}</i>	<i>Absolute erreur</i>
0.08	-0.00588	-0.00579	0.00008
0.16	-0.01075	-0.01059	0.00016
0.24	-0.01459	-0.01437	0.00021
0.32	-0.01740	-0.01715	0.00025
0.40	-0.01920	-0.01892	0.00027
0.48	-0.01996	-0.01969	0.00027
0.56	-0.01971	-0.01944	0.00026
0.64	-0.01843	-0.01818	0.00024
0.72	-0.01612	-0.01591	0.00020
0.80	-0.01280	-0.01263	0.00016
0.88	-0.00844	-0.00834	0.00010
0.96	-0.00307	-0.00302	0.00004

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Problèmes aux limites

Table2 : Comparisons of results

(t, x)	<i>True solution $u(x, t)$</i>	<i>Approx sol u_{100}</i>	<i>Absolute erreur</i>
(0.08, 0.08)	-0.00588	-0.00579	0.00008
(0.16, 0.16)	-0.02150	-0.02121	0.00028
(0.24, 0.24)	-0.04377	-0.04321	0.00055
(0.32, 0.32)	-0.06963	-0.06877	0.00085
(0.40, 0.40)	-0.09600	-0.09483	0.00116
(0.48, 0.48)	-0.11980	-0.11834	0.00146
(0.56, 0.56)	-0.13798	-0.13628	0.00170
(0.64, 0.64)	-0.14745	-0.14558	0.00186
(0.72, 0.72)	-0.14515	-0.14322	0.00192
(0.80, 0.80)	-0.12800	-0.12611	0.00188
(0.88, 0.88)	-0.09292	-0.09124	0.00168
(0.96, 0.96)	-0.03686	-0.03587	0.00098

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Interpolation

- Les noyaux reproduisant ont fourni à la théorie des grandes déformations, une méthode simple pour la construction des champs de déformation.
- Le principe consiste à choisir d'abord le noyau K_V , puis à définir V comme l'unique RKHS correspondant à K_V .
- Cette approche a permis de résoudre le problème d'interpolation optimal de champs de vecteurs grâce aux théorèmes suivants [31].

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Interpolation

Théorème

Supposons que le noyau K_V est strictement positif. Soit $v \in V$ et $x_1, \dots, x_n$ des points de $\mathbb{R}^d$ tous distincts, et $\gamma_1, \dots, \gamma_n$ des vecteurs de $\mathbb{R}^d$. Il existe une solution unique $v^* \in V$ au problème d'interpolation optimale :

$$\begin{cases} v(x_i) = \gamma_i, & 1 \leq i \leq n \\ \|v\|_V & \text{minimale.} \end{cases} \quad (33)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Interpolation

- La solution v^* s'écrit

$$v^*(x) = \sum_{i=1}^n K_V(x_i, x) \alpha_i \quad (34)$$

où les $\alpha_i \in R^d$ sont solutions du système linéaire :

$$\sum_{i=1}^n K_V(x_i, x_j) \alpha_i = \gamma_j \quad 1 \leq i \leq n \quad (35)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Interpolation

- Aussi le problème d'interpolation optimal pour le modèle incluant les déformations rigides trouve une solution approchée dans ces espaces grâce au théorème suivant:

Théorème

On suppose que K_V est un noyau strictement positif. Soient $x_1, \dots, x_n$ des points de $\mathbb{R}^d$ tous distincts et $\gamma_1, \dots, \gamma_n$ des vecteurs de $\mathbb{R}^d$. Il existe une solution unique $(v^*, e^*) \in V \times \varepsilon(d)$ au problème d'interpolation optimale

$$\begin{cases} v(x_i) + e(x_i) = \gamma_i, & 1 \leq i \leq n \\ \|v\|_V & \text{minimale.} \end{cases} \quad (36)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Interpolation

Cette solution s'écrit

$$\left\{ \begin{array}{l} v^*(x) = \sum_{i=1}^n K_V(x_i, x) \alpha_i \\ e^*(x) = \sum_{k=1}^n \beta_k e_k(x) \end{array} \right. \quad (37)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Interpolation

où les $\beta_k \in \mathbb{R}$ et $\alpha_i \in \mathbb{R}^d$ sont solutions du système linéaire :

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^n \beta_k e^k(x_j) + \sum_{i=1}^n K_V(x_i, x_j) \alpha_i = \gamma_j, & 1 \leq j \leq n \\ \sum_{j=1}^n e_k(x_j) \alpha_j = 0, & 1 \leq k \leq n \end{cases} \quad (38)$$

3. Sur les espaces de Hilbert à noyau reproduisant et applications

3.5. Applications en analyse numérique: Interpolation

Ces résultats ont permis la résolution d'un grand nombre de problèmes d'interpolation et d'optimisation tant scalaire que vectoriel comme, les problèmes d'interpolation de Parzen [25], Kailath [28] et Wahba [36], Saito [17].

4. Sur une approximation d'un problème d'interpolation

- En collaboration avec le LSAMA à EMT
- Nous développons une méthode de calcul ab initio de SEP
- Interpolation dans les RKHS/ Collision de molécules poly-atomique.
- Données ab initio sur le Florure de Césium

4. Sur une approximation d'un problème d'interpolation

Soit D un domaine borné de $\mathbb{R}^n$ avec $n > 1$, on désigne par

$$S = \{(x^i, y^i) \in D \times \mathbb{R}, \quad i = 1, \dots, p\} \quad (39)$$

avec $p < \infty$. Soit J la fonctionnelle sur $\mathcal{C}(D; \mathbb{R})$, définie par

$$J(f) = \|f\|^2 + \lambda \|f - g\|^2 \quad (40)$$

avec $\lambda > 0$ et où g est une fonction a priori dans $\mathcal{C}(D; \mathbb{R})$; $\|\cdot\|$ désigne la norme usuelle de $L^2(D)$.

Considérons l'espace dit "espace admissible"

$$\mathcal{M} = \{f \in \mathcal{C}(D; \mathbb{R}), \text{ tel que } f(x) = y \quad \forall (x, y) \in S\} \quad (41)$$

On s'intéresse ici à la résolution du problème

$$\min_{f \in \mathcal{M}} J(f) \quad (42)$$

4. Sur une approximation d'un problème d'interpolation

- Ce problème peut être vu comme un problème d'interpolation qui consiste à chercher une fonction d'interpolation aux points $(x^i, y^i) \in S$ à énergie minimale définie par la fonctionnelle J .
- La résolution d'un tel problème par les méthodes classiques d'interpolation n'est pas toujours aisée.
- Celle-ci s'intéresse en majeure partie par une approximation polynomiale qui semble inapproprié pour une approximation en norme.
- Nous nous proposons d'aborder ce problème sous l'angle de la théorie des espaces de Hilbert à noyau reproduisant [38, 39].
- Notre approche est une combinaison des techniques d'approximations pseudo spectrales en se basant les propriétés des noyaux reproduisant.
- Sur la simulation numérique avec des données ab initio des interactions atomiques du Fluorure de Césium
- Un étudiant en thèse

- Merci de votre aimable attention
- Une liste de bibliographie ci-dessous



[1] G. Akram, H. Rehman, Solution of fifth order boundary value problems in reproducing kernel space, Middle-East Journal of Scientific Research, **10**(2) (2011) 191-195.



[2] D. Alpay, On linear combinations of positive functions, associated reproducing kernel spaces and a non-Hermitian Schur algorithm, Arch. Math. 58 (1982) 174-182



[3] N. Aronszajn , Theory of Reproducing Kernels. Transactions of the American Mathematical Society, Vol 68:337-404,h
<http://icl.pku.edu.cn/member/yujs/papers/pdf/ReproducingKernels.pdf>, 1-50.



[4] A. Beléndez, C. Pascual, T. Beléndez, A. Hernández, Solution of an anti-symmetric quadratic nonlinear oscillator by a modified He's homotopy perturbation method, Nonlinear Analysis. Real World Applications **10** (2009) 416-427.

-  [5] C. Carmelli, E. De Vito and A. Toigo, Vector valued reproducing kernel hilbert spaces of integrable function and mercer theorem. Analysis and applications, **4** (4) (2006) 377-408.
-  [6] M.G.Gentan, Classes of Kernels for Machine Learning: A Statistics Perspective, Journal of Machine Learning Research **2** (2001) 299-312.
-  [7] M. Cui and F. Geng, A computational method for solving one-dimensional variable-coefficient Burgers equation, Applied Mathematics and Computation **188** (2007) 1389-1401.
-  [8] M. Cui, F. Geng, Solving singular two-point boundary value problem in reproducing kernel space, J. Comput. Appl. Math, **205** (2007) 6-15.
-  [9] M. Cui, Y. Lin, Nonlinear Numerical Analysis in Reproducing Kernel Hilbert Space, Nova Science Publisher, New York, (2009).

Bibliographie

-  [10] L. Deng, W. Guo, and T. Huang, Single image super-resolution via an iterative RKHS method, IIE Transaction on Circuits and Systems for Video Technologie 26(11) (2016).
-  [11] H.Du,G.Zhao and C.Zhao,Reproducing Kernel method of solving Fredholm integro-differential equations with weakly singularity,Journal of Computational and Applied Mathematics (2014).
-  [12] H. Du, G. Zhao, C. Zhao, Fredholm integro-differential equations with weakly singularity, Journal of Computational and Applied Mathematics **255** (2014) 122-132.
-  [13] F. Geng, A novel method for solving a class of singularly perturbed boundary value problems based on reproducing kernel method,AMC,**218** (2011)4211-4215.
-  [14] P. Honeine, C.Richard,P.Flandrin Reconnaissance de formes par méthodes à noyaux dans le domaine temps-fréquence, 20^e colloque sur le traitement du signal et des images (2005) 448-451.



[15] S. Javadi, E. Babolian, E Moradi, New implementation of reproducing kernel Hilbert space method for solving a class of functional integral equations, communication in Numerical Analysis **2014**(2014) 1-7 .



[16] H. Kadri, E. Duflos, P. Preux, S. Canu and M. Davy, Nonlinear functional regression: a functional RKHS approach, 13th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), Chia Laguna Resort, Sardinia, Italy, Volume 9, pp 374-380, (2010).



[17] T. Kailath, RKHS approach to detection and estimation problems-i: Deterministic signals in gaussian noise, IEEE Transactions on Information Theory, **17**(5) 530-549, September 1971.



[18] R. Ketabchi , R. Mokhtari and E. Babolian, Some error estimates for solving Volterra integral equations by using the reproducing kernel method, Journal of Computational and Applied Mathematics 273, 245-250,(2015).

-  [19] G. Kimeldorf and G. Wahba, Some results on Tchebycheff and spline functions. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, **33**:82-95,(1971).
-  [20] K. I. Kim, M. O. Franz, and B. Schölkopf, Kernel Hebbian Algorithm for Single-Frame Super-Resolution. *Statistical Learning in computer vision, ECCV 2004. Workshop, Prague, Czech Republic, May 2004*, pp 135-149.
-  [21] S.R.Kulkarni and G.Harman, Statistical Learning Theory: A Tutorial. *WIRES Computational Statistics*, 3(6) 2011, 543-556.
-  [22] X. Li and B. Wu, Reproducing kernel method for singular multi-point boundary value problems, *Mathematical Sciences* (2012).
-  [23] X. Mary, D. De Brucq, S. Canu, Sous-dualités et noyaux reproduisant associés, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser.I* **336** (2003) 949-954.

-  [24] V. I. Paulsen, An introduction to the theory of reproducing kernel hilbert spaces. Cambridge studies in advanced mathematics (2006).
-  [25] E. Parzen. Statistical inference on time series by RKHS methods, In R. Pyke, editor, Proc. 12th Biennial Seminar, pages 1-38, Montreal, Canada, (1970), Canadian Mathematical Congress .
-  [26] A. Pedas and E. Tamme, Discrete Galerkin method for Fredholm integro-differential equations with weakly singular kernels, Journal of Computational and Applied Mathematics, (2008) 213:111-126.
-  [27] C. E. Rasmussen and C. K. I. Williams, Gaussian Processes for Machine Learning, The MIT (2006).
-  [28] S. Saitoh, D. Alpay, J.A. Ball, and T. Ohsawa, Reproducing Kernels and Their Applications, Volume 3, International Society for Analysis, Applications and Computation (ISAAC'97), Kluwer Academic Publishers, 1999.



[29] L. Schwartz, Sous espaces hilbertiens d'espaces vectoriels topologiques et noyaux associés, (Noyaux reproduisant) J. Anal. Math. 13 (1964) 115-256.



[30] R. Schaback and H. Wendland, Kernel Techniques From Machine Learning to Meshless Methods, Cambridge University Press, 2006.



[31] B. Schölkopf, R. Herbrich, A.J.Smola and R. Williamson, A generalized representer theorem. Report, NeuroCOLT2, 2001, LNAI, 2111, PP 416-426, 2001.



[32] M. Seto, S. Suda, T. Taniguchi, Gram matrices of reproducing kernel Hilbert spaces over graphs II(graph homomorphisme and De Branges -Rovnyak spaces) , Nihonkai Math;J 26(1) 2015, 15-29



[33] B. K. Sriperumbudur, K. Fukumizu, A. Gretton, G. R. G. Lanckriet, B. Scholkopf, Kernel Choice and Classifiability for RKHS Embeddings of Probability. Advances in Neural Information Processing Systems. 22:23 rd(2009) pp 1750-1758.

-  [34] I. Steinwart and A. Christmann, Consistency and robustness of kernel based regression in convex risk minimization, Bernouilli, **13**(3):799-819,(2007).
-  [35] W. Wanga, Bo Han and M. Yamamoto, Inverse heat problem of determining time-dependent source parameter in reproducing kernel space,Nonlinear Analysis:Real World Application, 14(1) 875-887, 2013.
-  [36] G. Wahba. Spline Models for Observational Data. Society for Industrial and Applied Math (SIAM), Philadelphia, (1990).
-  [37] B. Wu and X. Li, Iterative reproducing kernel method for nonlinear oscillator with discontinuity, Applied Mathematics Letters **23** (2010) 1301-1304.