

# Estimation de volume de cellules de Voronoï en haute dimension et variables de contrôle en rendu Monte Carlo.

Baptiste GENEST - David Coeurjolly , Vincent Nivoliers

Année 2022-23

## Abstract

Dans ce rapport de mon projet d'ouverture à la recherche, je détaillerai mon travail dans l'estimation de quantités géométriques des diagrammes de voronoï en dimensions élevées, puis dans la construction d'une nouvelle variable de contrôle, prouvée meilleure, pour l'intégration numérique. Dans un dernier temps, je présenterai ma participation à un effort de recherche et à la rédaction d'un article où mon travail est cité.

## 1 Contexte scientifique

### Simulation de la lumière

Ce sujet est devenu objet de recherches dans le cadre du rendu graphique. Ce domaine de l'informatique vise à la création d'images les plus photo-réalistes possibles, tâche rendue ardue en particulier dans la simulation du comportement de la lumière. La complexité de la simulation de ce phénomène vient de son comportement fondamentalement récursif et global. En effet, alors que la plupart des phénomènes physiques peuvent se décrire de manière locale, la lumière reçue en un point est l'accumulation de la lumière perçue depuis partout ailleurs dans la scène. La modélisation la plus fine utilisée à l'heure actuelle pour reproduire ce comportement est nommée l'équation du rendu [7] :

$$L_o(x, \omega_o) = L_e(x, \omega_o) + \int_{\Omega} f_r(x, \omega_i, \omega_o) L_i(x, \omega_i) \cos(\theta_i) d\omega_i \quad (1)$$

qui décrit bien à la fois son comportement récursif (représenté par le terme  $L_i$  dans l'intégrale, la lumière qui arrive en  $x$  depuis la direction  $\omega_i$ , donc la lumière en un point dépend de la lumière reçue ailleurs) et global par l'intégrale sur l'ensemble des directions depuis lesquelles la lumière peut arriver,  $\Omega$ .

Si on déroule la récursion on se rend compte qu'en réalité cette intégrale est équivalente à prendre en compte la contribution de tous les chemins de lumière possibles entre les différentes sources de lumière et le point considéré, en accumulant au passage l'information lumineuse présente à chaque point de rebond avec la scène. C'est à dire qu'en réalité cette intégrale se fait sur un espace de dimension infinie.

Pour avoir espoir de pouvoir exploiter cette formulation élégante de la lumière, plusieurs approximations sont nécessaires.

La plus évidente est de restreindre l'ensemble des chemins lumineux à considérer, c'est à dire, par exemple, se limiter aux chemins lumineux qui auront rebondi au plus 15 fois avant de parvenir à notre point. Cette approximation nous permet de ramener l'espace d'intégration en dimension finie. En effet, comme on peut décrire un chemin lumineux par l'ensemble des rebonds qu'il va faire avec la scène, c'est à dire qu'un chemin qui aura rebondi 15 fois peut être décrit par les 15 directions de ses rebonds, chaque direction, en 3D, pouvant être représentée par 2 angles, un tel chemin peut donc se décrire par 30 nombres.

Un autre infini qui rend pour l'instant cette formule inaccessible à nos ordinateurs est la présence elle-même d'une intégrale. En effet, au-delà des rares cas où elle est calculable explicitement, une intégrale est l'accumulation infinitésimale d'un nombre infini de quantités. Heureusement, des physiciens et des mathématiciens ont développé de nombreuses techniques pour pouvoir en approcher aussi fidèlement que souhaité la valeur exacte.

A noter que l'aspect rendu n'aura presque pas été exploré (les techniques présentées ici étant trop lentes), mais cela constitue une motivation appréciable comme introduction aux thématiques du sujet.

## Intégration numérique

La démarche la plus évidente est d'approcher la fonction à intégrer par une fonction plus simple, qu'on sait intégrer explicitement. Par exemple, la méthode des rectangles consiste à subdiviser l'espace sur lequel on veut intégrer notre fonction, puis d'approcher la fonction par un rectangle sur chacun des intervalles de subdivision.

Un obstacle évident dans notre cas est que, si l'on souhaite par exemple subdiviser le domaine par 10 rectangles par dimension, on a, en dimension 30 :  $10^{30}$  rectangles!

Ainsi, bien que cette famille de méthode soit efficace en théorie, en pratique, la rigidité de la construction fait que ces techniques deviennent très vite inutilisables quand la dimension dépasse 3.

D'autres approches dont la complexité ne croît pas avec la dimension existent. Celles qui nous intéressent ici sont de la famille des **méthodes Monte-Carlo**. La base théorique de la méthode est la loi des grands nombres, qui s'exprime ainsi :

Pour une suite d'échantillons aléatoires indépendants  $(X_i)_{i \in \mathbb{N}}$  qui suivent une loi de densité  $p$ , on a :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n f(X_i) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}(f(X)) = \int_{\Omega} f(x)p(x)dx$$

Ainsi, pour une loi uniforme sur  $\Omega$ , i.e.,  $p(x) = \frac{1}{\text{Vol}(\Omega)}$ , on a :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^n f(X_i) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}(f(X)) = \frac{1}{\text{Vol}(\Omega)} \int_{\Omega} f(x)dx \quad (2)$$

Ce théorème fondamental nous dit que si l'on fait la moyenne d'un nombre grandissant de valeurs de notre fonction évaluée en des points tirés aléatoirement dans  $\Omega$ , le résultat obtenu converge vers l'intégrale de la fonction. L'intérêt de cette méthode est que le nombre d'échantillons à considérer n'est pas lié à la dimension du domaine.

Néanmoins, bien qu'elle soit plus facilement généralisable, elle se fait au coût d'une convergence plus lente. En effet, bien qu'on obtienne la valeur exacte asymptotiquement, l'écart-type (qu'on interprète ici comme l'erreur) de cet estimateur décroît en  $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$ . C'est à dire qu'en pratique il faut multiplier le nombre d'échantillons par 100 pour diviser l'erreur par 10. Une vitesse de convergence, qui, selon les applications, peut être considérée comme bien trop lente.

Ce sujet s'inscrit dans l'effort d'exploration de techniques visant à **améliorer la vitesse de convergence** de cet estimateur.

## Variables de contrôle

L'approche considérée pour améliorer la viabilité de l'estimateur est celle des variables de contrôle, purement dans le cadre de l'intégration de fonctions on parle également de **fonctionnelles de contrôle** puisque cette méthode cherche en réalité à construire une fonction  $g$  aussi proche que possible de  $f$  et qu'on sache intégrer explicitement, de telle sorte que la manipulation suivante améliore notre approximation :

$$\pi(f) = \int_{\Omega} f(x)dx = \int_{\Omega} f(x) - g(x) + g(x)dx = \int_{\Omega} f(x) - g(x)dx + \int_{\Omega} g(x)dx \quad (3)$$

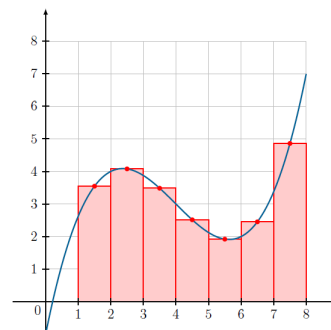


Figure 1: Méthode des rectangles

En effet, on peut alors estimer par (2) l'intégrale de  $f - g$ , qui convergera plus vite, car ce qu'on intègre est plus petit, et intégrer explicitement  $g$ , qui contient une grande partie de l'intégrale finale. Ainsi, on obtient dans tous les cas une erreur plus faible par la donnée de l'intégrale de  $g$  et on peut même espérer dans certain cas<sup>1</sup>, un gain de l'ordre de convergence.

Toute la question repose donc sur la construction d'une fonction qui réponde à ces deux critères.

L'approche étudiée ici, introduite dans la thèse de Remi Leluc [1] propose de construire  $g$  de telle sorte que  $g(x)$  soit égale à la valeur de  $f$  à l'échantillon le plus proche de  $x$ .

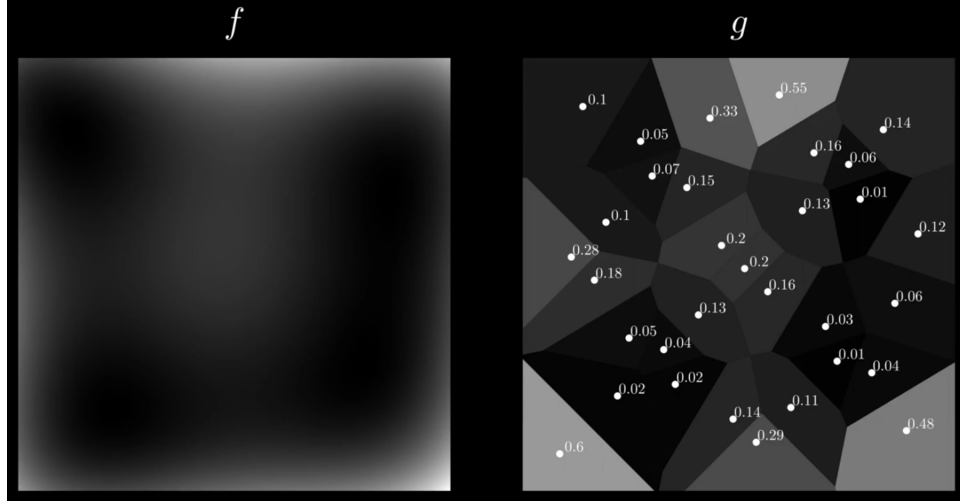


Figure 2: comparaison entre  $f$  et  $g$

La structure engendrée par l'identification au plus proche voisin est celle d'un diagramme de Voronoï. Un objet extrêmement étudié et utile dont chaque cellule se définit formellement ainsi :

On définit d'abord une fonction de plus proche voisin, dénotée  $NN(\text{nearest neighbor})$ , qui associe à un point  $x$  l'échantillon le plus proche

$$NN(x, (X_i)_{i \in I}) = \arg \min_{i \in I} d(x, X_i) \quad (4)$$

Qu'on note  $NN(x)$  quand on considère tous les échantillons. Soit un ensemble de sites  $(X_i)$ , points où l'on a échantillonné la valeur de  $f$ , la cellule de Voronoï associée au  $i$ ème site  $V_i$  est :

$$V_i = \{x \in \Omega, NN(x) = i\} \quad (5)$$

Ainsi,  $g$  est exprimable de telle manière :<sup>2</sup>

$$g(x) = \sum_{i=0}^n \mathbf{1}_{V_i}(x) f(X_i) \quad (6)$$

dont l'intégrale est :

$$\int_{\Omega} g(x) dx = \sum_{i=0}^n \text{Vol}(V_i) f(X_i) \quad (7)$$

Ainsi, pour pouvoir exploiter cette fonction comme variable de contrôle, il faut être capable de déterminer le volume des  $V_i$  en toutes dimensions, ce qui est une tâche complexe car la complexité combinatoire des cellules explose avec la dimension. Bien qu'il existe une formule explicite, celle-ci a une complexité exponentielle en la dimension et est donc très vite inutilisable.

<sup>1</sup>comme c'est le cas dans les méthodes explorées ici

<sup>2</sup>où  $\mathbf{1}_A$  est la fonction indicatrice de  $A$

Nous cherchons donc des méthodes permettant d'**approcher le volume des cellules du diagramme**. Recherches détaillées en partie 2.

## Algorithme de calcul d'intersection entre un rayon et un diagramme de Voronoï

Comme il a déjà été mentionné, il est absurde de souhaiter construire explicitement toute la combinatoire et la géométrie des cellules du diagramme en grande dimension<sup>3</sup>. Or, le fait que le calcul d'appartenance à une cellule puisse se faire simplement par une requête de plus proche voisin offre la possibilité d'**explorer le diagramme de manière implicite**.

Ainsi, notre outil principal d'exploration du diagramme aura été un algorithme de **calcul d'intersection entre un rayon et les frontières du diagramme** adapté à des structures accélératrices efficaces en dimensions élevées, développé par M.Nivoliers.

On définit donc la fonction suivante qui retourne le site de la première cellule touchée par le rayon qui part de  $x$  dans la direction  $d$ .

$$\text{Vorayce}(x, d) = \text{NN}(x + t^*d), \text{ où } t^* = \arg \min_{t>0} \text{NN}(x + td) \neq \text{NN}(x). \quad (8)$$

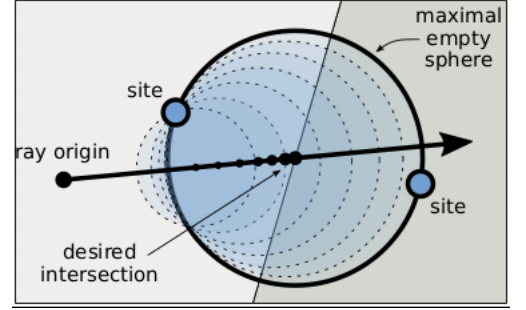


Figure 3: Intersection entre un rayon et la frontière d'une cellule

## 2 Estimation de volume et barycentre

Comme cela simplifie les calculs, on s'est systématiquement placé dans un cadre où  $\Omega$  est le cube unité  $d$  dimensionnel, i.e. :

$$\Omega = [0, 1]^d,$$

où  $\text{Vol}(\Omega) = 1$ .

### 2.1 Distinction avec l'état de l'art

Une difficulté majeure rencontrée dans la recherche de sources préexistantes est le fait qu'un diagramme de Voronoï est une partition de l'espace et donc que peu importe où on tire un point dans  $\Omega$ , on est forcément dans une des cellules, information essentielle et visiblement peu étudiée. En effet, il existe une littérature riche sur comment échantillonner un volume convexe<sup>4</sup>, en haute dimension, mais aucun sur le cas spécifique où chaque convexe fait partie d'une partition.

**La première problématique de recherche fut donc de comparer l'efficacité d'une méthode globale sur toute la partition contre une estimation volume par volume.**

### 2.2 Estimation par lancer de rayons

Une approche proposée dans [2] permet justement d'estimer le volume d'un convexe par lancer de rayons à partir d'un point dans le convexe  $K$ . Comme au final seule la formule (9) est utilisée, je vous épargne les longues justifications théoriques qui mènent à celle-ci. L'estimateur proposé est le suivant : <sup>5</sup>

$$\frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{N\Gamma(\frac{d}{2})d} \sum_{k=1}^N t_k^d \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \text{Vol}(K), \quad (9)$$

où, en supposant que l'origine du rayon est 0,  $t_k$  est la longueur du rayon jusqu'à l'intersection.

<sup>3</sup>on a un nombre de points par face de Voronoï en  $\mathcal{O}(n^{\lfloor \frac{d+1}{2} \rfloor})$

<sup>4</sup>les cellules de Voronoï sont convexes.

<sup>5</sup>A noter que nous avons remarqué, à nos dépens ;-), que la formule du papier se trompe dans la constante de volume de la sphère qui emploie la fraction inversée

### 2.3 Approche Multiphase Monte Carlo (MMC)

Une autre approche propose d'évaluer le volume d'un convexe  $K$  ainsi : soit  $x$  un point dans  $K$  (ici le site de la cellule), soit  $r$  le rayon de la plus grande sphère incluse dans  $K$  centrée en  $x$  (ici la moitié de la distance entre le site et l'autre site le plus proche), on construit la suite de convexes suivante<sup>6</sup> :

$$B_n = \mathbb{B}(x, 2^{\frac{n}{d}} r) \cap K$$

Le seul volume de l'on connaît exactement est celui de  $B_0$ , puisque c'est une boule incluse dans  $K$  donc entière, on peut estimer le volume du  $n$ -ème convexe par les volumes des précédents ainsi :

$$\text{Vol}(B_n) = \text{Vol}(B_0) \prod_{i=1}^n \frac{\text{Vol}(B_i)}{\text{Vol}(B_{i-1})}.$$

L'approche consiste donc à estimer chacun de ces ratios séparément par des méthodes aléatoires puis d'en faire le produit pour trouver le volume du convexe final  $B^*$  qui est l'intersection entre la boule qui contient entièrement  $K$  et  $K$  donc égal à  $K$ .

Soit  $\rho > 0$  le pas de la marche, pour estimer le  $i$ -ème ratio, on simule une marche aléatoire :

$$\begin{aligned} y_k &= x_k + s, \text{ où } s \sim \mathcal{U}(\mathbb{B}(0, \rho)) \\ x_{k+1} &= y_k \text{ si } y_k \in B_i \text{ sinon } x_k. \end{aligned}$$

La suite ainsi générée suivant une loi uniforme dans le convexe, on peut estimer le ratio par le temps passé dans le  $i$ -ème sphère par rapport au temps dans le  $(i-1)$ -ème :

$$\frac{\sum_{k=1}^n \mathbf{1}_{B_i}(x_k)}{\sum_{k=1}^n \mathbf{1}_{B_{i-1}}(x_k)} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \frac{\text{Vol}(B_i)}{\text{Vol}(B_{i-1})}.$$

A noter qu'ici, l'appartenance d'un point  $x$  à  $B_n$  est triviale à déterminer car on doit vérifier, pour  $X_i$  le site de la  $i$ -ème cellule :

$$x \in B_n \iff \begin{cases} \text{NN}(x) = i \\ \|x - X_i\| \leq 2^{\frac{n}{d}} r \\ x \in \Omega \end{cases}$$

A noter que cette approche a donné des résultats difficiles à interpréter. Elle est de plus extrêmement difficile à debugger car elle fait intervenir plusieurs estimations aléatoires successives et de fixer un paramètre  $\rho$  pertinent, très dur à fixer de manière générique. Nous n'avons pas pris les résultats obtenus par cette approche en compte dans les comparaisons.

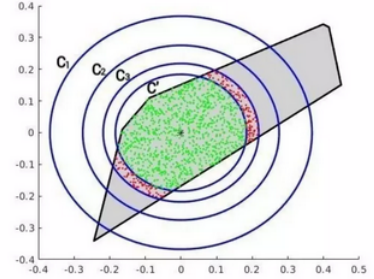


Figure 4: Approche MMC, suite de boules intersectées avec  $K$ , figure provenant de [9]

### 2.4 Approche globale : Méthode du rejet

L'approche qui me semblait la plus pertinente, car la seule qui exploite la propriété de partition du diagramme, est l'approche la plus simple, celle du rejet<sup>7</sup>, i.e. : Pour un ensemble de  $N$  points,  $(x_k)$ , générés uniformément dans  $\Omega$ , la méthode du rejet consiste en :

$$\frac{\sum_{k=1}^N \mathbf{1}_{V_i}(x_k)}{N} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \text{Vol}(V_i). \quad (10)$$

Or, comme les  $V_i$  sont une partition de l'espace :

$$\forall x \in \Omega, \sum_{i=1}^n \mathbf{1}_{V_i}(x) = 1. \quad (11)$$

<sup>6</sup>Où  $\mathbb{B}(x, r)$  est la boule de centre  $x$  et de rayon  $r$

<sup>7</sup>qui porte ici mal son nom car justement on ne rejette rien

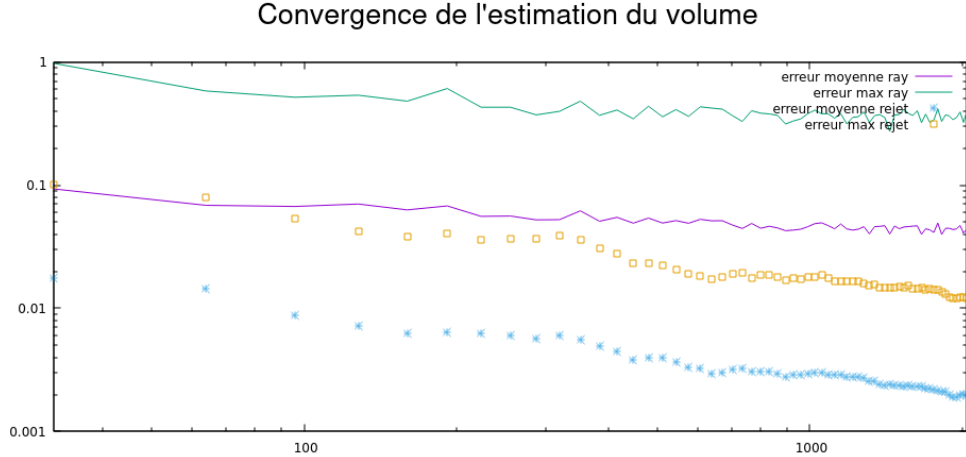
Tous les tirages comptent dans exactement une cellule, intuitivement, "aucun gaspillage" car chaque échantillon permet de participer pour une cellule, on estime donc **tous les volumes en parallèle**. De plus, aucune simulation d'un phénomène aléatoire plus complexe n'est nécessaire car,

$$X \sim \mathcal{U}(\Omega) \implies X|X \in V_i \sim \mathcal{U}(V_i). \quad (12)$$

Les craintes autour de cette approche étaient que, en haute dimension, les volumes des cellules sont "soit très grands, soit très petits". Et donc que la participation de certains sites serait sous-évaluée. Or, comme nous sommes dans une optique d'intégration et que seule **l'erreur absolue dans l'évaluation des volumes compte**, même si l'on fait une grande erreur *relative* dans l'estimation des petits volumes, comme leur volume est petit, l'erreur **absolue** est petite également. De plus, en supposant  $f$  lipschitzienne<sup>8</sup>, si le volume d'une cellule est petit, c'est que le site est dans une zone de forte densité, mais donc que la valeur en son point est proche de celles de ses voisins et donc que la contribution de la valeur à l'intégrale finale est répartie sur la zone à forte densité.

## 2.5 Comparaison des résultats

En comparant la vitesse de convergence<sup>9</sup> des approches 1 et 3, on observe que, en toutes dimensions, l'approche par rejet global est significativement meilleure en erreur absolue.



## 2.6 Estimation de barycentres

Une tâche connexe aura été l'estimation des barycentres des cellules.

On peut étendre facilement l'approche par rejet, en faisant la moyenne des échantillons tombés dans chaque cellule. Les approches par cellules, elles, exploitent le lancer de rayons pour générer un ensemble de points uniformément dans le volume, puis en faire la moyenne pour approcher le barycentre. Comme je n'ai pas codé les algorithmes pour cet échantillonnage, je ne rentrerai pas dans les détails mais il est pertinent de noter qu'à nouveau l'approche globale est la meilleure en erreur absolue. Pour des références sur le sujet, voir [8] et [5].

## 2.7 Conclusion

En somme, pour ce qui est de l'estimation de quantités géométriques simples, l'approche globale qui exploite la structure totale du diagramme semble être la plus adaptée dans un contexte où l'erreur absolue est la métrique pertinente. On justifie cette affirmation, autrement que par les résultats expérimentaux, par le fait que la propriété de partition permette d'exploiter (12) de telle sorte à être capable de générer des points uniformément dans chacun des volumes sans coût, ni perte, ni approximation.

<sup>8</sup>hypothèse faite dans [1], détails rappelés en partie 3.3

<sup>9</sup>on se réfère à une valeur, très précise, des volumes, générée avec "beaucoup" ( $10^8$  par exemple) d'échantillons. En dimension 2 ou 3, on peut générer les cellules exactement et calculer les volumes exacts. voir [6]

### 3 Nouvelle fonctionnelle de contrôle

L'exploration de techniques pour l'estimation de volumes aura été complexe de part l'inexistence d'une littérature pleinement adaptée à notre contexte. De plus, le fait de travailler en dimension élevée rend notre intuition géométrique 3D particulièrement piègeuse et inexacte, les quelques idées que j'ai pu avoir furent vite balayées par les propriétés étranges de la 30ème dimension. Enfin, le fait de devoir travailler directement sur les cellules de Voronoï, objets fondamentalement discrets et à la combinatoire complexe, fut particulièrement difficile.

Heureusement, une idée vint déplacer le sujet sur des questions plus proche de ma culture, autour de l'interpolation et de l'intégration numérique. Ce changement de thématique fut particulièrement agréable car je pus faire preuve de plus de créativité et être véritablement dans une démarche de recherche.

Avant de continuer, il me semble pertinent de détailler maintenant un autre aspect important de l'approche proposé dans [1]

#### Approche Leave-One-Out (loo)

Si l'on souhaite se servir de la fonctionnelle de contrôle (6) sur les échantillons eux-mêmes on obtient que

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - g(X_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i) - f(X_i) = 0.$$

Donc inexploitable en l'état. Or, on souhaiterait pouvoir construire la variable de contrôle et s'en servir sans tirer d'autres échantillons. En effet, le contexte dans lequel se placent les ressources autour de (6) considèrent tout calcul, de complexité non exponentielle, comme négligeable face à l'évaluation de  $f$ , le cadre applicatif étant par exemple où  $f(x)$  implique d'envoyer un bateau prendre la température dans l'océan au point  $x^{10}$ .

Ainsi, [1], propose une approche leave-one-out, que l'on exprime, avec le plus généralité, ainsi :

1. Etant donné un schéma d'interpolation  $I(x, (X_i, f(X_i))_{i \in I})$  qui approxime la valeur de  $f(x)$  depuis les valeurs connues aux points donnés en 2ème argument.
2. Pour chaque échantillon  $j$ , on évalue le schéma au point  $X_j$  mais dont la donnée de l'échantillon  $j$  est retirée, i.e.

$$I(X_j, (X_i, f(X_i))_{i \in I \setminus j}) \quad (13)$$

3. On approxime l'intégrale globale par l'intégrale du schéma initial, avec tous les échantillons.
4. On obtient donc l'estimateur :

$$\pi(f)^I = \frac{1}{n} \left( \sum_{j=0}^n I(X_j, (X_i, f(X_i))_{i \in I \setminus j}) - f(X_j) \right) + \int_{\Omega} I(x, (X_i, f(X_i))_{i \in I}) dx \quad (14)$$

Appliqué ici, on a :

$$\begin{aligned} I^{\text{NN}}(x, (X_i, f(X_i))_{i \in I}) &= f(X_{\text{NN}(x)}) \\ I^{\text{NN}}(X_j, (X_i, f(X_i))_{i \in I \setminus j}) &= f(X_{\text{NN}2(X_j)}) \end{aligned}$$

Où on note  $\text{NN}2(X_j) = \text{NN}(X_j, (X_i)_{i \in I \setminus j})$  qui n'exprime rien d'autre que l'autre site le plus proche de  $X_j$ . Et enfin, dans ce contexte, on s'autorise à approcher  $\int_{\Omega} I(x, (X_i, f(X_i))_{i \in I}) dx^{11}$  par une approximation MonteCarlo avec  $n^2$  samples. On note la méthode d'intégration ainsi obtenue par  $\pi^{\text{NN}}(f)$ . On a de plus,  $\mathbb{E}(\pi^{\text{NN}}(f)) = \pi(f)$  et  $\mathbb{E}(|\pi^{\text{NN}}(f) - \pi(f)|) = O(n^{-\frac{1}{2}} n^{-\frac{1}{d}})$  ce qui permet donc une amélioration de l'ordre de convergence de l'erreur.

<sup>10</sup>on comprend donc que des calculs, même un peu longs, soient acceptables

<sup>11</sup>choix fait pour correspondre exactement à la démarche expérimentale de [1] pour être capable de comparer

### 3.1 Augmenter l'ordre d'interpolation

Une idée évidente est que la qualité de l'approximation de l'intégrale est limitée par la qualité de l'interpolant de  $f$ . Ainsi, bien que (6) permette d'approcher  $f$  sans dépendre de la dimension, son aspect constant par morceaux rend l'approximation grossière, tentons de faire mieux.

Pour augmenter la qualité de l'interpolation, on souhaite être capable de faire en sorte que la valeur interpolée dépende de plus d'un seul site, tout en évitant le plus possible les opérations qui dépendent de la dimension, tant la complexité par rapport à celle ci est quasi-systématiquement exponentielle. Ainsi, je propose de se servir du lancer de rayons pour définir un prédicat qui permette de toujours choisir un site voisin avec lequel combiner l'interpolation, de manière localement cohérente.

Voici l'algorithme de l'interpolant  $I^{DE}(x, (X_i, f(X_i))_{i \in I})$  proposé<sup>12</sup> :

---

**Algorithm 1:** Delaunay

Edge Interpolation

---

**Input:**  $x$  point où interpoler

**Output:**  $I_{\pi_1}^{DE}(x, (X_i, f(X_i))_{i \in I})$

**Data:**  $(X_i, f(X_i))_{i \in I}$  valeurs de  $f$  connues

$a = \text{NN}(x)$

$d = \text{normalized}(x - X_a)$

$b = \text{Vorayce}(X_a, d)$

*/\* Si le rayon sort de  $\Omega$  \*/*

**if**  $b = \emptyset$  **then**

**return**  $f(X_a)$

$e = X_b - X_a$

$t = \frac{e \cdot (x - X_a)}{\|e\|^2}$

**return**  $f(X_a)(1 - t) + tf(X_b)$

---

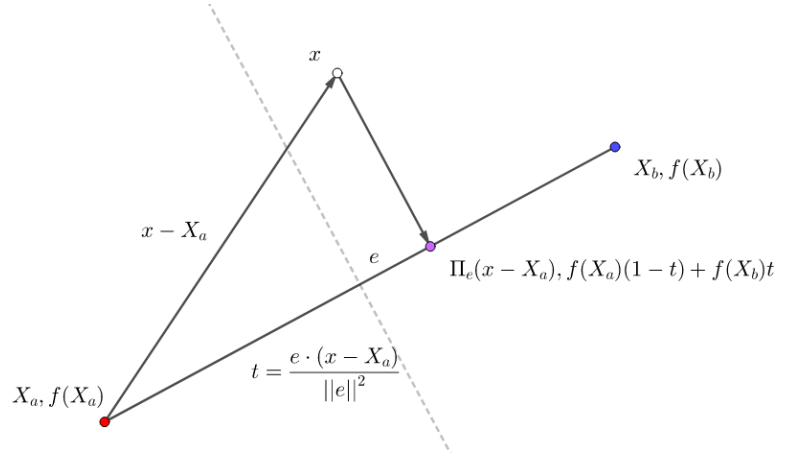
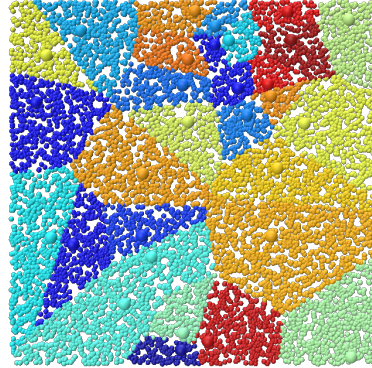
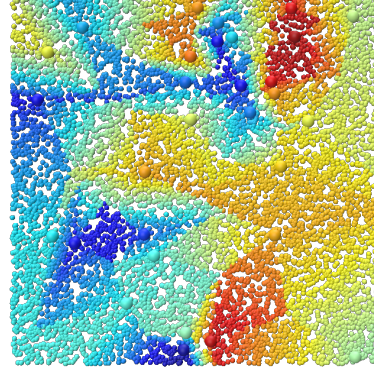


Figure 5: interpolation entre 2 points



(a) Interpolation constante par morceaux  $\pi_0$



(b) Interpolation affine par morceaux proposée  $\pi_1$

Figure 6: Comparaison des interpolations

Intuitivement, cet algorithme construit l'interpolation linéaire entre le site le plus proche de  $x$  et un site voisin, déterminé par Vorayce, le long de l'arête de Delaunay qui les relie.

<sup>12</sup>Le dual topologique du diagramme de Voronoï est le complexe simplicial de Delaunay où, en particulier, tous les sites voisins sont reliés par une arête.



### 3.2 Analyse qualitative de l'approche

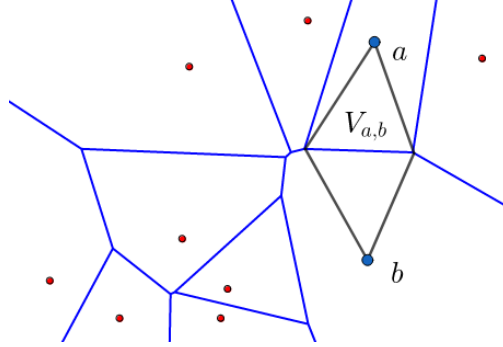
On note le schéma leave-one-out obtenu avec  $I^{\text{DE}}$  par  $\pi^{\text{DE}}(f)$ . Bien qu'on puisse être surpris de la relative simplicité de l'algorithme, il faut garder à l'esprit que justement sa simplicité permet un contrôle sur sa complexité par rapport à la dimension. Elle est ici linéaire en la dimension (pour les calculs avec les produits scalaires) et au plus linéaire en le nombre de points (Vorayce étant logarithmique en basse dimension puis linéaire par rapport au nombre de points quand la dimension augmente).

**L'apport ici est donc le prédicat qui permet de choisir l'autre site avec lequel interpoler linéairement. On exploite la structure implicite du diagramme pour accéder aux arêtes du maillage dual sans construction exhaustive.**

Le fait que l'on interpole avec 2 points peu importe la dimension indique que l'on n'augmentera pas l'ordre de convergence, car il existe toujours des discontinuités, mais le gain est tout de même substantiel (voir section suivante), et, encore une fois, permet la maîtrise de la complexité. L'interpolation est affine par morceaux sur les doubles prismes, vides si  $a$  et  $b$  non voisins, suivants :

Pour chaque paire de sites d'indices  $a$  et  $b$ , on définit:

$$V_{a,b} = \{x \in V_a, \text{Vorayce}(X_a, x - X_a) = b\} \cup \{x \in V_b, \text{Vorayce}(X_b, x - X_b) = a\} \quad (15)$$



Cette caractéristique est centrale dans le fait que **les polynômes de degré 1 ont le degré maximal qui soit intégrable exactement sans dépendre de la dimension ni ne nécessitant d'autres évaluations de  $f$ .**

En effet, il a déjà été dit que la variable de contrôle initiale, constante par morceaux donc de degré 0, est intégrable par quadrature par la formule (7) qui ne fait pas intervenir la dimension. Pareillement, comme  $I^{\text{DE}}$  est affine par morceaux, i.e. :

$$I^{\text{DE}}(x) = \sum_{(a,b) \in VN} \mathbf{1}_{V_{a,b}}(x) (\langle c_{a,b}, x \rangle + d_{a,b}).$$

Pour  $VN$  l'ensemble des couples de sites  $(a,b)$  voisins dans le diagramme, et  $c_{a,b} \in \mathbb{R}^d, d_{a,b} \in \mathbb{R}$  les coefficients de la fonction affine sur  $V_{a,b}$ . L'intégrale de  $h$  est, voir Annexe pour preuve, :

$$\int_{\Omega} I^{\text{DE}}(x) dx = \sum_{(a,b) \in VN} \text{Vol}(V_{a,b}) (\langle c_{a,b}, \text{Bar}(V_{a,b}) \rangle + d_{a,b}).$$

Ainsi, on peut intégrer exactement  $I^{\text{DE}}$  avec uniquement les barycentres et les volumes<sup>13</sup>, quantités qui ne dépendent pas de  $f$  (qu'on suppose inaccessible hors des sites).<sup>14</sup>

A noter également qu'il existe une interpolation affine par morceaux plus fine, sur le papier, qui consiste à faire l'interpolation barycentrique des valeurs aux sommets du simplexe de Delaunay contenant  $x$ . Néanmoins, bien que plus précise, sa complexité est exponentielle en la dimension, également à cause de la combinatoire du simplexe de Delaunay qui croît également de manière exponentielle avec la dimension.

<sup>13</sup>Bien sûr, l'évaluation des volumes et barycentres est une tâche en soi, mais, comme vu en partie 2, estimable très correctement et facilement en toute dimension par rejet global.

<sup>14</sup>Alors que dès le degré 2, les formules de quadrature font intervenir l'évaluation aux bords du domaine, bords qui explosent en nombre avec la dimension

### 3.3 Comparaison des résultats

On observe en pratique une division par 2 de l'erreur quadratique moyenne par rapport à  $\pi^{NN}$ . De plus, en rappelant qu'une fonction lipschitzienne vérifie

$$\exists \lambda > 0, \forall x, y \in \Omega, |f(x) - f(y)| \leq \lambda \|x - y\|. \quad (16)$$

En notant  $\text{Lip}_\Omega(f) = \lambda$ , j'ai prouvé, en dimension 1, voir Annexe, qu'on a :

**Théorème 1.**

$$\forall f \in L^2([0, 1]), \text{ s.t. } \forall (i, j) \in VN, \text{Lip}_{[x_i, x_j]}(f) < 2 \frac{|f(x_j) - f(x_i)|}{\|x_j - x_i\|},$$

$$\int_{\Omega} (I^{DE}(x) - f(x))^2 dx < \int_{\Omega} (I^{NN}(x) - f(x))^2 dx$$

puis en dimension quelconque, que :

**Théorème 2.**

$$\forall f \in L^2(\Omega), \text{ s.t. } \forall (i, j) \in VN, \exists \lambda_d > 1, \text{Lip}_{V_{i,j}}(f) < \lambda_d \frac{|f(x_j) - f(x_i)|}{\|x_j - x_i\|},$$

$$\int_{\Omega} (I^{DE}(x) - f(x))^2 dx < \int_{\Omega} (I^{NN}(x) - f(x))^2 dx$$

En d'autres termes, ces théorèmes nous disent que la méthode proposée est meilleure pour toute fonction dont les variations à l'intérieur de chaque cellule sont au plus  $\lambda_d$  fois le taux d'accroissement entre les extrémités.

Cette condition est en réalité très faible, en effet, plus le nombre de points est grand, plus les voisins de Voronoï sont proches et donc plus les cellules sont petites et les variations à l'intérieur vont tendre vers le taux d'accroissement aux extrémités. Ainsi, asymptotiquement, cette condition sera vérifiée dans toutes les cellules où la fonction est dérivable.

De manière générale, ces théorèmes nous renseignent pleinement sur le comportement de l'approche proposée, par exemple, on peut en tirer que le pire cas est dans le cadre où la cellule est très fine entre  $x_i$  et  $x_j$  mais très allongée dans les autres directions.

Enfin, bien que le théorème 1 n'ajoute pas grand chose par rapport au théorème 2, je l'ai prouvé en premier<sup>15</sup>, et, comme la preuve du 2 aura été permise par les réflexions qu'aura demandé la preuve du 1, je considère qu'il mérite sa place ici.

### 3.4 Conclusion

Ainsi, la nouvelle variable de contrôle divise en pratique la *MSE* par deux, voir annexe 4.5, est intégrable exactement si connaissance des volumes et barycentres, a une complexité linéaire en la dimension et au plus linéaire en le nombre de point. Toujours en terme de complexité, elle semble optimale<sup>16</sup> à plusieurs égards :

1. Un ordre supérieur n'est pas quadraturable linéairement.
2. L'approche linéaire par morceaux qui fait intervenir tous les sommets du simplexe de Delaunay englobant a une complexité exponentielle en la dimension.
3. En raison des différentes symétries du problème, l'existence d'un prédicat localement cohérent qui permette, par évaluation, de se servir de la valeur d'un nombre fixe de sites, plus grand que 2, me surprendrait.

<sup>15</sup>je ne pensais pas être capable de prouver le deuxième

<sup>16</sup>relativement aux techniques d'interpolation par morceaux qui doivent être quadraturables.

En somme, la nouvelle variable de contrôle fait mieux que (6), par des garanties théoriques, et en pratique, sans coût majeur supplémentaire, et semble optimale en terme de complexité par rapport à la dimension.

## 4 Participation à un effort de recherche

L'algorithme de ray-shooting permettant une extension de nombreux algorithmes basés sur les diagrammes de Voronoï en dimension plus haute, il a été décidé de rédiger un article le concernant, en listant une série d'applications, dont l'intégration numérique par variable de contrôle, partie dont je fus responsable.

### 4.1 Effort expérimental

Afin de présenter l'intérêt de l'algorithme, j'ai dû implémenter de manière standardisée un ensemble de tests pour se comparer à l'état de l'art. J'ai par exemple écrit des programmes permettant :

1. comparer les algorithmes d'estimation de volumes
2. comparer les algorithmes d'estimation de barycentre
3. comparer les différentes approches par variable de contrôle<sup>17</sup>
4. système de génération puis d'écriture/lecture de fichiers, "ground truth" pour estimer la convergence des approches.

### 4.2 Rédaction dans un article

Comme la variable de contrôle que je propose fait mieux que l'état de l'art et qu'elle repose sur Vorayce il a été décidé d'en parler dans l'article, j'ai donc rédigé un paragraphe qui y est consacré.

Il était prévu initialement de l'envoyer à la conférence "Symposium on Geometry Processing 2023", néanmoins, une semaine avant la deadline, de nouvelles références ont été trouvées, proches de ce qui est proposé, nous demandant donc un temps de réflexion supplémentaire pour repositionner l'article sur les points vraiment nouveaux et sur leur intérêt. A l'heure actuelle, il est toujours prévu que l'article soit publié et que je sois cité comme co-auteur.

## Remerciements

Je remercie de tout coeur mes encadrants pour leur sympathie, leur compétence, et surtout pour leur disponibilité et leur dévotion. Hors période d'examens, nous avons rendez-vous pratiquement chaque semaine. La réflexion collective autour de ces questions aura été extrêmement enrichissante et plaisante. Je les remercie également pour la confiance qu'ils ont placée en moi dans leur décision de m'impliquer dans le processus de publication de l'article.

Je n'aurais pas pu espérer meilleur cadre pour continuer à découvrir la recherche.

---

<sup>17</sup>on a également exploré d'autres techniques par interpolation polynomiale sur tout le domaine, approche proposée dans [4], mais qui n'a pas exactement les mêmes propriétés que celles par plus proche voisin

## Annexe

### 4.3 Preuve de la formule de quadrature pour les fonctions affines par morceaux

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega} I^{\text{DE}}(x) dx &= \int_{\Omega} \sum_{(a,b) \in VN} \mathbf{1}_{V_{a,b}}(x) (\langle c_{a,b}, x \rangle + d_{a,b}) dx \\
&= \sum_{(a,b) \in VN} \int_{\Omega} \mathbf{1}_{V_{a,b}}(x) (\langle c_{a,b}, x \rangle + d_{a,b}) dx \\
&= \sum_{(a,b) \in VN} \int_{V_{a,b}} (\langle c_{a,b}, x \rangle + d_{a,b}) dx \\
&= \sum_{(a,b) \in VN} \langle c_{a,b}, \int_{V_{a,b}} x dx \rangle + \int_{V_{a,b}} d_{a,b} dx \\
&= \sum_{(a,b) \in VN} \langle c_{a,b}, \text{Vol}(V_{a,b}) \text{Bar}(V_{a,b}) \rangle + \text{Vol}(V_{a,b}) d_{a,b} \\
&= \sum_{(a,b) \in VN} \text{Vol}(V_{a,b}) (\langle c_{a,b}, \text{Bar}(V_{a,b}) \rangle + d_{a,b})
\end{aligned}$$

### 4.4 Preuve du théorème 1

Je pensais initialement que toute fonction continue était mieux approchée par  $I^{\text{DE}}$  que par  $I^{\text{NN}}$ , or ce n'est pas le cas, on peut trouver des contre-exemples. Par exemple, sur  $[0, 1]$ , avec les points  $x = 0$  et  $x = 1$ <sup>18</sup>

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-20(x-0.5)}}$$

est mieux intégrée par  $I^{\text{NN}}$  que par  $I^{\text{DE}}$ . En effet, on a :

$$\begin{aligned}
\int_0^1 (x - f(x))^2 dx &\approx 0.041 \\
\int_0^{\frac{1}{2}} f(x)^2 dx + \int_{\frac{1}{2}}^1 (f(x) - 1)^2 dx &\approx 0.019
\end{aligned}$$

La question qui s'est posée alors a été de trouver l'espace de fonctions qui soient mieux intégrables par ma méthode, intuitivement un espace de fonctions qui "ne peuvent pas varier trop vite" par rapport aux valeurs échantillonnées, car ce sont les fonctions proches d'être discontinues qui sont mieux approchées par  $I^{\text{NN}}$ .

Après moult essais, le point de vue le plus adapté semble être celui de l'analyse convexe dans les espaces de Hilbert pour comparer les distances entre la fonction à intégrer et celles qui les approximent.

En effet, on se place dans l'espace  $L^2(\Omega)$ , muni du produit scalaire usuel :

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f(x)g(x)dx,$$

et de la distance induite :

$$d(f, g) = \sqrt{\|f - g\|^2} = \sqrt{\langle f - g, f - g \rangle},$$

qui en font un espace de Hilbert. La question de la qualité de l'approximation d'une fonction  $f$  est équivalente à la comparaison des distances, i.e.

$$\int_{\Omega} (f(x) - I^{\text{DE}}(x))^2 dx \leq \int_{\Omega} (f(x) - I^{\text{NN}}(x))^2 dx \iff d(f, I^{\text{DE}})^2 \leq d(f, I^{\text{NN}})^2$$

---

<sup>18</sup>  $I^{\text{NN}}$  est ici meilleur seulement avec 2 points, quand le nombre de points augmente la condition est bien vérifiée et donc  $I^{\text{DE}}$  est meilleur

Comme les calculs qui suivent impliquent des intégrales explicites, on se place en dimension 1.

On s'intéresse au problème sur chaque cellule  $V_{i,j}$ , qui en 1D sont les intervalles  $[x_i, x_j]$ . On peut supposer sans perte de généralité que  $x_i = 0$ ,  $f(x_i) = 0$ ,  $x_j = W$  et  $f(x_j) = H$ . On a alors, pour  $x \in [x_i, x_j]$

$$I^{\text{NN}}(x) = \mathbf{1}_{[\frac{W}{2}, W]}(x)H,$$

et

$$I^{\text{DE}}(x) = x \frac{H}{W}.$$

On définit l'espace fonctionnel considéré ainsi,

$$K_L = \{f \in L^2([0, W]) \text{ s.t. } f(0) = 0, f(W) = H, \text{Lip}_{[0, W]}(f) \leq L\} \quad (17)$$

Comme on est sur un intervalle,  $f'$  existe presque partout, et on a :

$$\text{Lip}_{[0, W]}(f) \leq L \iff \sup_{x \in [0, W]} |f'(x)| \leq L$$

On cherche donc le plus grand  $L$  tel que,

$$\begin{aligned} \forall f \in K_L, d(f, I^{\text{NN}})^2 &\geq d(f, I^{\text{DE}})^2 \\ \iff d(f, I^{\text{NN}})^2 - d(f, I^{\text{DE}})^2 &\geq 0 \\ \iff \|f - I^{\text{NN}}\|^2 - \|f - I^{\text{DE}}\|^2 &\geq 0 \\ \iff \|f\|^2 - 2\langle f, I^{\text{NN}} \rangle + \|I^{\text{NN}}\|^2 - \|f\|^2 + 2\langle f, I^{\text{DE}} \rangle - \|I^{\text{DE}}\|^2 &\geq 0 \\ \iff 2\langle f, I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}} \rangle + \|I^{\text{NN}}\|^2 - \|I^{\text{DE}}\|^2 &\geq 0 \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \|I^{\text{DE}}\|^2 &= \int_0^W \left(x \frac{H}{W}\right)^2 dx = \left(\frac{H}{W}\right)^2 \frac{W^3}{3} = \frac{H^2 W}{3} \\ \|I^{\text{NN}}\|^2 &= \int_{\frac{W}{2}}^W H^2 dx = \frac{H^2 W}{2} \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} \iff 2\langle f, I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}} \rangle + \|I^{\text{NN}}\|^2 - \|I^{\text{DE}}\|^2 &\geq 0 \\ \iff 2\langle f, I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}} \rangle + \frac{WH^2}{6} &\geq 0 \\ \iff \langle f, I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}} \rangle + \frac{WH^2}{12} &\geq 0 \end{aligned}$$

Ainsi, pour prouver l'inégalité pour tout  $f \in K_L$  on doit déterminer le minimum :

$$\min_{f \in K_L} \langle f, I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}} \rangle. \quad (18)$$

On remarque d'abord que  $K_L$  est convexe, en effet, on peut écrire l'appartenance à  $K_L$  ainsi :

$$f \in K_L \iff f(0) = 0, f(W) = H, f' \leq L, -f' \leq L,$$

Qui sont toutes des contraintes linéaires en  $f$ . On reconnaît donc dans (18) un problème de programmation linéaire en dimension infinie. En plus d'être convexe,  $K_L$  est borné, en effet :

$\forall f \in K_L$ , comme  $f(0) = 0$  et  $\text{Lip}_{[0,W]}(f) \leq L \implies f \leq Lx$

$$\|f\|^2 = \int_0^W f(x)^2 dx \leq \int_0^W (Lx)^2 dx = L^2 \frac{W^3}{3} < \infty \quad (19)$$

Donc (18) admet une solution unique et finie.

En discrétisant le problème et par l'algorithme du simplexe, on devine que la solution est

$$f_L^*(x) = -Lx \mathbf{1}_{[0,D_L]}(x) + (Lx + 0.5(H - WL)) \mathbf{1}_{[D_L, W-D_L]}(x) + (L(W - x) + H) \mathbf{1}_{[W-D_L, W]}(x) \quad (20)$$

où  $D_L = \frac{W}{4} - \frac{H}{4L}$ .

On vérifie qu'elle est bien solution par un argument de dualité :<sup>19</sup>

En effet :

$\forall f \in K_L, \forall \varphi \in \mathcal{C}^1([0, W])$  par morceaux, on a :

$$\int_0^W f'(x) \varphi(x) - L|\varphi(x)| dx \leq 0$$

On intègre par partie :

$$\begin{aligned} & [f(x)\varphi(x)]_0^W - \int_0^W f(x)\varphi'(x) - L|\varphi(x)| dx \leq 0 \\ \iff & f(W)\varphi(W) - f(0)\varphi(0) - L \int_0^W |\varphi(x)| dx \leq \int_0^W f(x)\varphi'(x) dx. \end{aligned}$$

Comme  $f(0) = 0$  et  $f(W) = H$ , on a :

$$H\varphi(W) - L \int_0^W |\varphi(x)| dx \leq \int_0^W f(x)\varphi'(x) dx.$$

Comme on a  $\varphi$  quelconque, on peut prendre  $\varphi' = I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}}$ , donc  $\varphi$  est une primitive de  $I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}}$ , définie à une constante près, on note donc  $\varphi = \varphi_0 + d$ , où  $\varphi_0$  est la primitive qui vaut 0 en 0.

Ainsi,  $\forall f \in K_L$ ,

$$Hd - L \int_0^W |\varphi_0(x) + d| dx \leq \langle f, I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}} \rangle$$

De plus, en prenant  $f = f_L^*$  et  $d = \frac{D_L^2}{2}$ , on peut vérifier<sup>20</sup> qu'on a :

$$H \frac{D_L^2}{2} - L \int_0^W |\varphi_0(x) + \frac{D_L^2}{2}| dx = \langle f_L^*, I^{\text{DE}} - I^{\text{NN}} \rangle$$

Donc  $f_L^*$  est bien le minimum.

On peut vérifier<sup>21</sup>, qu'on obtient :

$$\langle f_L^*, I^{\text{NN}} - I^{\text{DE}} \rangle + \frac{WH^2}{12} = \frac{H(-3L^3W^3 + 5L^2W^2H + 3LWH^2 - H^3)}{96L^2W} \quad (21)$$

On cherche donc à déterminer la plus grande valeur de  $L$  telle que cette quantité soit positive, donc ici sa plus grande racine<sup>22</sup> pour obtenir la borne recherchée, en posant  $x = WL$  on a :

$$\frac{H(-3x^3 + 5x^2H + 3xH^2 - H^3)}{96xL} = 0 \iff P(x, H) = -3x^3 + 5x^2H + 3xH^2 - H^3 = 0$$

<sup>19</sup> Je remercie sincèrement M.Filippo Santambrogio pour son aide sur cet argument

<sup>20</sup> inutile de déployer les formules ici

<sup>21</sup> calcul fait avec wolfram alpha, je ne suis pas fou à ce point

<sup>22</sup> terme dominant négatif donc négatif en  $+\infty$

On remarque que  $P$  est un polynôme homogène de degré 3, donc

$$P(x, H) = 0 \iff H^3 P\left(\frac{x}{H}, 1\right) = 0 \iff P\left(\frac{x}{H}, 1\right) = Q(y) = -3y^3 + 5y^2 + 3y - 1 = 0$$

où  $y = \frac{x}{H} = \frac{LW}{H}$ .

Numériquement on observe que  $y^*$ , la plus grande racine de  $Q$ , vaut 2.0717..., ici on a juste besoin d'une borne inférieure, donc par exemple  $y = 2$  (on vérifie que  $Q(2) = 1 > 0$ ), donc :

$$\forall y, 1 \leq y \leq 2, Q(y) > 0 \iff \forall L, \frac{H}{W} \leq L \leq 2\frac{H}{W}, \langle f_L^*, I^{\text{NN}} - I^{\text{DE}} \rangle + \frac{WH^2}{12} > 0 \quad (22)$$

La borne inférieure sur  $L$  est inutile car elle est déjà imposée par le fait que  $f(0) = 0$  et que  $f(W) = H$ .

De plus comme  $\langle f_L^*, I^{\text{NN}} - I^{\text{DE}} \rangle + \frac{WH^2}{12} > 0 \iff \min_{f \in K_L} d(f, I^{\text{NN}})^2 - d(f, I^{\text{DE}})^2 > 0$ .

Comme  $H = |f(x_j) - f(x_i)|$  et  $W = \|x_j - x_i\|$  et qu'on applique le résultat sur chaque cellule on a bien finalement :

$$\begin{aligned} \forall f \in L^2(\Omega), \text{ s.t. } \forall (i, j) \in \text{VN}, \text{Lip}_{[x_i, x_j]}(f) &< 2 \frac{|f(x_j) - f(x_i)|}{\|x_j - x_i\|}, \\ \int_{\Omega} (I^{\text{DE}}(x) - f(x))^2 dx &< \int_{\Omega} (I^{\text{NN}}(x) - f(x))^2 dx. \end{aligned}$$

□

## 4.5 Preuve du théorème 2

Comme la preuve est ici non constructive, elle est beaucoup plus simple. On reprend le contexte de la preuve précédente mais cette fois ci en dimension quelconque. On raisonne à nouveau sur chaque cellule, ici  $V_{i,j}$  et on note toujours, sans perte de généralité, que  $x_i = 0$  et  $f(x_i) = 0$ , et on note  $e = x_j - x_i$  et  $W = \|x_j - x_i\|$ . On souhaite toujours étudier la quantité

$$\min_{f \in K_L} d(f, I^{\text{NN}})^2 - d(f, I^{\text{DE}})^2 \quad (23)$$

Comme on ne s'intéresse pas à exhiber la plus grande constante de Lipschitz possible, on peut seulement s'intéresser à la plus petite possible et comme la valeur du minimum dépend continûment de  $L$ , il suffit que, pour la valeur minimale de  $L$ , le minimum soit positif, pour démontrer le théorème.

Comme les valeurs au bord sont toujours fixées, on a que la constante de lipschitz minimum est

$$L^* = \frac{|f(x_j) - f(x_i)|}{\|x_j - x_i\|}.$$

On peut montrer que  $K_{L^*}$  est un singleton. En effet, comme on a :

$$\text{Lip}(f) = L^* \iff f \in \mathcal{C}^0(V_{i,j}) \text{ et } \forall x \in V_{i,j}, \|\nabla f(x)\| \leq L^*$$

Soit  $f \in K_{L^*}$ , on décompose  $\nabla f(x)$  dans la base orthonormée  $e \oplus e^\perp = \text{Vect}(e, e_1, \dots, e_{d-1})$

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial e}(x) \\ \frac{\partial f}{\partial e_1}(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial e_{d-1}}(x) \end{bmatrix}$$

Ainsi,

$$\|\nabla f(x)\| = \sqrt{\left(\frac{\partial f}{\partial e}(x)\right)^2 + \sum_{i=1}^{d-1} \left(\frac{\partial f}{\partial e_i}(x)\right)^2}$$

or, pour respecter les conditions au bord,  $\frac{\partial f}{\partial e}(x) = L^*$ , et comme  $f$  est  $L^*$ -Lipschitz

$$\begin{aligned} \|\nabla f(x)\| &= \sqrt{(L^*)^2 + \sum_{i=1}^{d-1} \left( \frac{\partial f}{\partial e_i}(x) \right)^2} \leq L^* \\ \implies \forall i \in [[1, d-1]], \frac{\partial f}{\partial e_i}(x) &= 0, \end{aligned}$$

donc

$$f = I^{\text{DE}}, \quad (24)$$

car c'est la seule fonction qui croît uniquement dans la direction  $e$  et qui vérifie les conditions aux bords.

On a donc :

$$d(I^{\text{DE}}, I^{\text{NN}})^2 - d(I^{\text{DE}}, I^{\text{DE}})^2 = d(I^{\text{DE}}, I^{\text{NN}})^2 > 0. \quad (25)$$

Ainsi, pour  $K_{L^*}$ , le minimum est positif. Par continuité du minimum par rapport à  $L$ , on a :

$$\forall d \in \mathbb{N}^*, \exists \Lambda > L^*, \text{ s.t. } \forall \lambda \in [L^*, \Lambda], \min_{f \in K_\lambda} d(f, I^{\text{NN}})^2 - d(f, I^{\text{DE}})^2 > 0.$$

Qu'on peut bien réécrire:

$$\begin{aligned} \forall f \in L^2(\Omega), \text{ s.t. } \forall (i, j) \in \text{VN}, \exists \lambda_d > 1, \text{Lip}_{V_{i,j}}(f) &< \lambda_d \frac{|f(x_j) - f(x_i)|}{\|x_j - x_i\|}, \\ \int_{\Omega} (I^{\text{DE}}(x) - f(x))^2 dx &< \int_{\Omega} (I^{\text{NN}}(x) - f(x))^2 dx. \end{aligned}$$

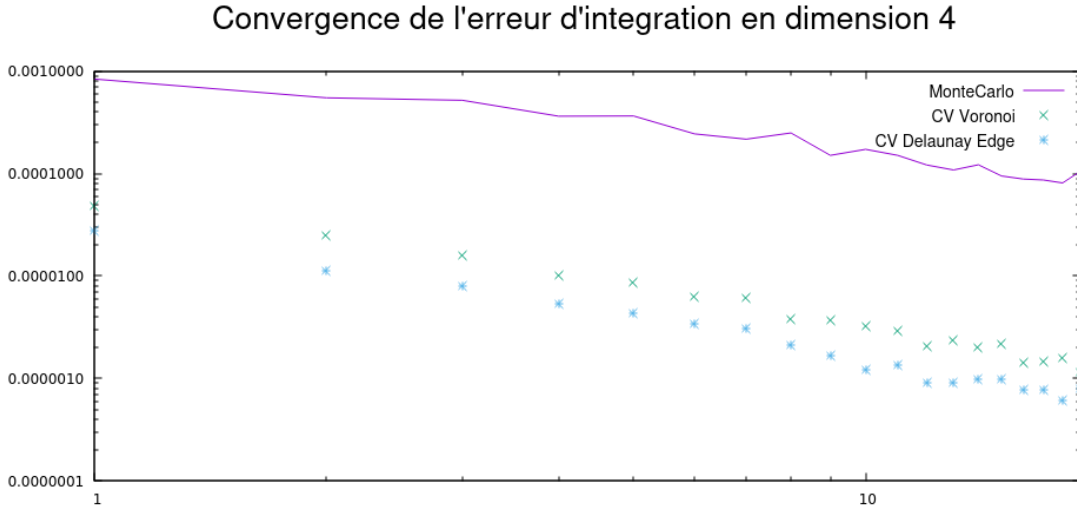
□

## 4.6 Graphes de convergence

Protocole expérimental : on reproduit le protocole décrit dans [1], on compare :  $\mathbb{E}((\pi^i(f) - \pi(f))^2)$ , où  $\pi^i(f)$  décrit respectivement, l'approche monte carlo classique, puis  $\pi^{\text{NN}}(f)$  puis  $\pi^{\text{DE}}(f)$ . On calcule la moyenne de l'évolution de l'erreur pour un nombre d'échantillons croissant, sur 100 réalisations. Les calculs auront pris 3 jours.

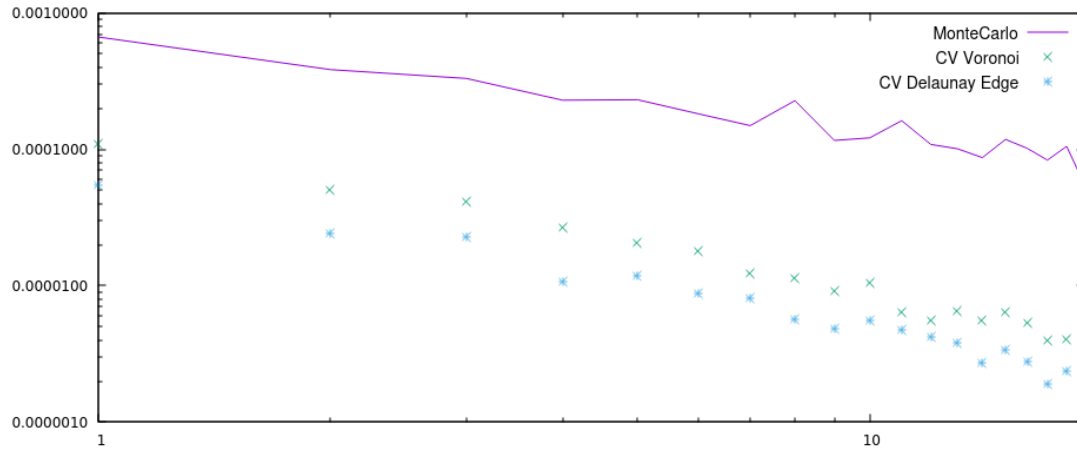
ici  $f(x) = 1 + \sin(\pi(2 \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{n} - 1))$ , où  $\int_{\Omega} f(x) dx = 1$ .

Les graphes sont en échelle log/log.

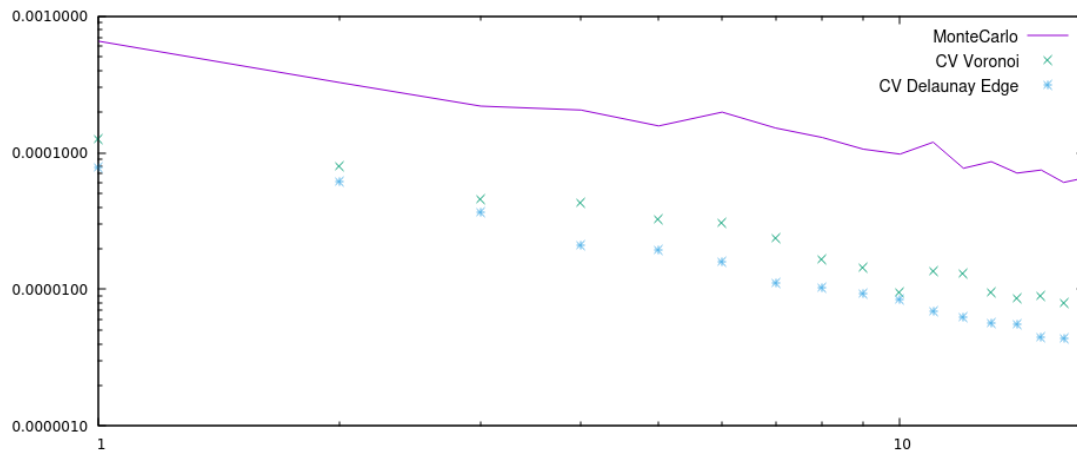




### Convergence de l'erreur d'integration en dimension 6



### Convergence de l'erreur d'integration en dimension 8



On constate bien du gain d'ordre de convergence entre l'approche MC classique par rapport aux variables de contrôle et de la diminution de l'erreur par une constante multiplicative entre NN et DE.

## References

- [1] Thèse Remi Leluc (2023) *Monte Carlo Methods and Stochastic Approximation : Theory and Applications to Machine Learning*, Addison-Wesley Professional. lien: <https://www.theses.fr/2023IPPAT007>
- [2] Uwe Jaekel (2011) *A Monte Carlo Method for High-Dimensional Volume Estimation and Application to Polytopes*
- [3] Augustin Chevallier, <http://augustin-chevallier.fr/mc/mmc-convex-volume-estimation>
- [4] Salaun et al. (2022), *Regression-based Monte Carlo Integration*
- [5] Polyak et al. (2014), *Billiard walk - a new sampling algorithm for control and optimization*
- [6] Bruno Levy, <https://github.com/BrunoLevy/geogram>
- [7] Kajiya (1986), *The rendering equation*

- [8] Robert L. Smith (1984) *Efficient Monte Carlo Procedures for Generating Points Uniformly Distributed Over Bounded Regions*
- [9] Apostolos Chalkis (2022) *Practical volume estimation of polytopes by billiard trajectories and a new annealing schedule*