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

Baptiste GENEST - David Coeurjolly , Vincent Nivolliers

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 controle, 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[1]

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:

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

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

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 rebondis 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 d'un chemin

[1] Paragraphe à considérer comme dans l'annexe car, au final, l'aspect rendu n'aura presque pas été exploré (les techniques présentées ici étant trop lentes), mais qui constitue une motivation appréciable comme introduction aux thématiques du sujet.

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, un intégrale est l'accumulation infitésimale d'un nombre infini de quantité. Heuresement, des physiciens et des mathématiciens ont developpé de nombreuses techniques pour pouvoir en approcher aussi fidèlement que souhaité la valeur exacte.

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.

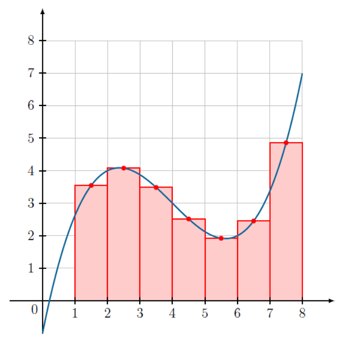


Figure 1: Méthode des rectangles

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. Celle qui nous intéresse ici est la famille de **méthodes Monte-Carlo**.

La base théorique de la méthode est la loi des grands nombres, qui s'exprime ainsi:

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

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

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

$$\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n} f(X_i) \underset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \mathbb{E}(f(X)) = \frac{1}{\mathrm{Vol}(\Omega)}\int_{\Omega} f(x)dx \tag{2}$$

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 Ω, le résultat obtenu converge vers l'intégrale de la fonction. L'intérêt de cette méthode est que le nombre d'échantillion 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 décroit en $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$. C'est à dire qu'en pratique il faut ajouter 100 échantillions pour diviser l'erreur par 10. Une vitesse de convergence, qui, selon les applications, peut être considérée comme bien trop lente.

Ce sujet s'incrit 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 fonction 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:

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

En effet, on peut ainsi estimer par moyenne empirique l'intégrale de $f - g$, mais 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.

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

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

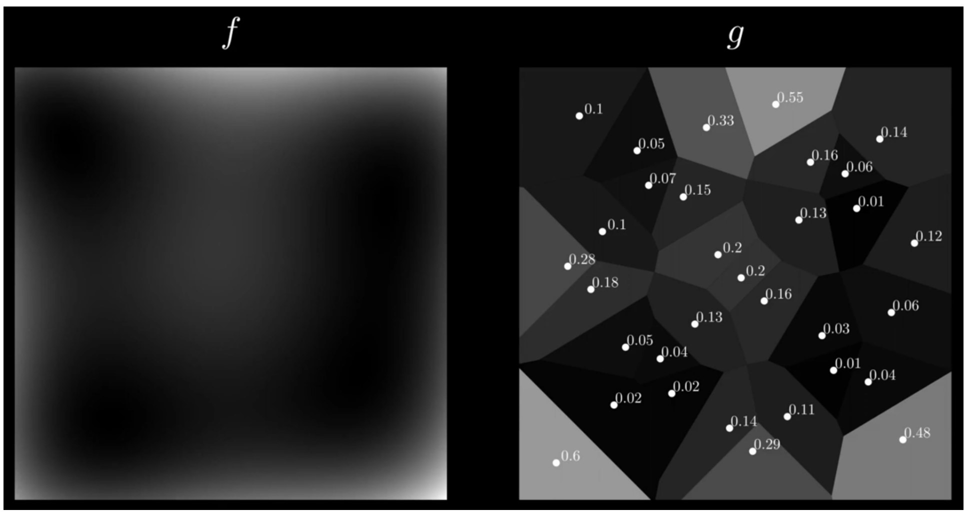


Figure 2: comparaison entre f et g

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 nearest neighboor, qui associe à un point x l'échantillion le plus proche

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

Qu'on note $\mathrm{NN}(x)$ quand on considère tous les échantillions.

Soit un ensemble de sites (X_i), points où l'on a échantillionné la valeur de f, la cellule de Voronoï associée au ième site V_i est:

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

Ainsi, g est exprimable de telle manière:[2]:

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

Dont l'intégrale est:

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

[2]où $\mathbf{1}_A$ est la fonction indicatrice de A

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 tache complexe car la complexité combinatoire des cellules explose avec la dimension. Ainsi, bien qu'il existe une formule explicite, celle ci a une complexité exponentielle en la dimension et est donc inutilisable pour les grandes dimensions.

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

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

Comme il a déjà été mentionné, il absurde de considérer construire explicitement toute la combinatoire et la géométrie des cellules du diagramme en grande dimension. 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** adaptée à des structures accélératrices efficaces en dimensions élevées, développé par M.Nivolliers.

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.

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

2 Estimation de volume

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

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

où $\mathrm{Vol}(\Omega) = 1$.

2.1 Disctinction avec l'état de l'art

Une difficulté majeure rencontrée dans la recherche de sources préexistantes est le fait qu'une diagramme de Voronoï est une partition de l'espace et donc que peu importe où on tire un point dans Ω, 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[3], en haute dimension, mais aucun sur le cas spécifique où chaque convexes fait partie d'une partition.

La première problèmatique 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: [4]

$$\frac{\pi^{\frac{d}{2}}}{2N\Gamma(\frac{d}{2})d} \sum_{k=1}^{N} t_k^d \underset{N\to+\infty}{\longrightarrow} \mathrm{Vol}(K) \tag{9}$$

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

[3]Les cellules de Voronoï sont convexes.

[4]A noter que nous avons remarqué, à nos dépends ;-), 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 (ici la moitié de la distance entre le site et l'autre site le plus proche), on construit la suite de convexes suivante[5]:

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

Le seul volume de l'on connait 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:

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

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:

$$\frac{\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{B_i}(x_k)}{\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{B_{i-1}}(x_k)} \underset{n \to +\infty}{\longrightarrow} \frac{\mathrm{Vol}(B_i)}{\mathrm{Vol}(B_{i-1})}$$

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

$$x \in B_n \iff \left\{ \begin{array}{r} \mathrm{NN}(x) = i \\ ||x - X_i|| \leq 2^{\frac{n}{d}} r \\ x \in \Omega \end{array} \right.$$

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 ρ pertinant, très dur à fixer de manière générique. Nous n'avons pas pris les résultats obtenus par cette approche en compte dans les comparaisons.

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[6], i.e.:

Pour un ensemble de N points, (x_k), générés uniformément dans Ω, la méthode du rejet consiste en:

$$\frac{\sum_{k=1}^{N} \mathbf{1}_{V_i}(x_k)}{N} \underset{N \to +\infty}{\longrightarrow} \mathrm{Vol}(V_i) \tag{10}$$

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

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

[5] Où $\mathbb{B}(x, r)$ est la boule de centre x et de rayon r

[6] 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 échantillion permet de participer pour une cellule, on estime donc **tous les volumes en paralèlle.** De plus, aucune simulation d'un phénomène aléatoire plus complexe n'est nécessaire car,

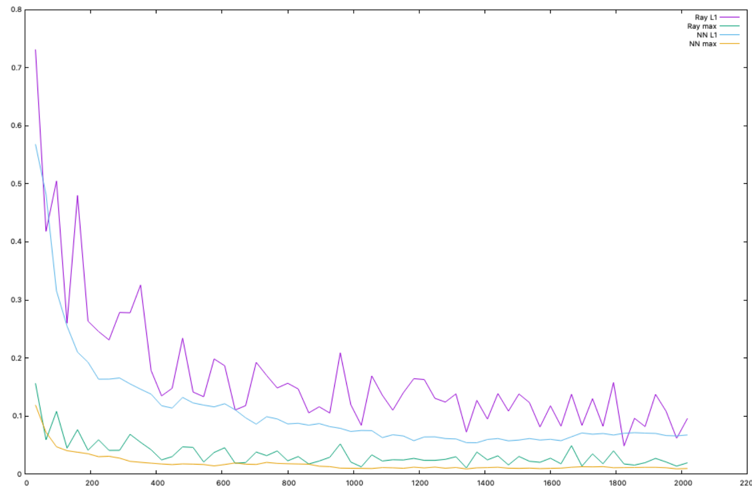
$$X \sim \mathcal{U}(\Omega) \implies X|X \in V_i \sim \mathcal{U}(V_i) \tag{12}$$

Les craintes autour de cette approche était 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 comptent**, 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[7], i.e.

$$\exists \lambda > 0, \forall x, y \in \Omega, |f(x) - f(y)| \leq \lambda ||x - y|| \tag{13}$$

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[8] 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 échantillions tombés dans chaque cellule. Les approches par cellules, elles, exploitent le lancer de rayons pour généner 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 échantillionnage, je ne rentrerai pas dans les détails mais il est pertinant de noter qu'à nouveau l'approche globale est la meilleure en erreur absolue. Pour des références sur le sujet, voir [HITANDRUN] 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 pertinante. 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.

3 Nouvelle fonctionnelle de contrôle

L'exploration de techniques pour l'estimation de volumes aura été complexe de part l'inexistance d'une littérature pleinement adaptée à notre contexte. De plus, le fait de travailler en dimension élevée rend notre intuition géométrique 3D particulièrement piégeuse et inexacte, les quelques idées que j'ai pu avoir furent vites balayées par les propriétés étranges de la 30ème dimension. Enfin, le fait de devoir travailler

[7] hypothèse faite dans la [1]

[8] on se réfère à une valeur, très précise, des volumes, générée avec "beaucoup" (10^8 par exemple) d'échantillions, en dimension 2 ou 3, on peut générer les cellules exactement et calculer les volumes exacts, voir [6]

directement sur les cellules de Voronoï, objets fondamentalement discrets et à la combinatoire complexe, fut particulièrement difficile.

Heuresement, 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 pu faire preuve de plus de créativité et d'être véritablement dans une démarche de recherche.

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

Approche Leave-One-Out (loo)

Si on souhaite se servir de la fonctionnelle de contrôle (6) sur les échantillions 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 contruire la variable de controle et s'en servir sans tirer d'autres échantillions.

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 bâteau prendre la température dans l'océan au point x[9].

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 échantillion j, on évalue le schéma au point X_j mais dont la donnée de l'échantillion j est retirée, i.e.
$$I(X_j,(X_i, f(X_i))_{i\in I\setminus j}) \tag{14}$$

3. On approxime l'intégrale globale par l'intégrale du schéma initial, avec tous les échantillions.

4. On obtient donc l'estimateur:

$$\pi(f)^{\mathrm{I}} = \frac{1}{n}(\sum_{j=0}^{n} I(X_j,(X_i, f(X_i))_{i\in I\setminus j}) - f(X_j)) + \int_\Omega I(x,(X_i, f(X_i))_{i\in I})dx \tag{15}$$

Appliqué ici, on a:

$$I^{\mathrm{NN}}(x,(X_i, f(X_i))_{i\in I}) = f(X_{\mathrm{NN}(x)})$$
$$I^{\mathrm{NN}}(X_j,(X_i, f(X_i))_{i\in I\setminus j}) = f(X_{\mathrm{NN2}(X_j)})$$

Où on note $\mathrm{NN2}(X_j) = \mathrm{NN}(X_j,(X_i)_{i\in I\setminus j})$ 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 $\int_\Omega I(x,(X_i, f(X_i))_{i\in I})dx$[10] par une approximation MonteCarlo avec n^2 samples. On note la méthode d'intégration ainsi obtenue par $\pi^{\mathrm{NN}}(f)$.

On a de plus, $\mathbb{E}(\pi^{\mathrm{NN}}(f)) = \pi(f)$ et $\mathbb{E}(|\pi^{\mathrm{NN}}(f)-\pi(f)|) = O(n^{-\frac{1}{2}}n^{-\frac{1}{d}})$ ce qui permet donc une amélioration de l'ordre de convergence de l'erreur.

[9] on comprend donc que des calculs, même un peu longs, soient acceptables

[10] 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[11] :

Algorithm 1: Delaunay Edge Interpolation

Input: x point où interpoler
Output: $I^{\mathrm{DE}}_{\pi_1}(x, (X_i, f(X_i))_{i\in I})$
Data: $(X_i, f(X_i))_{i\in I}$ valeurs de f connues

$a = \mathrm{NN(x)}$
$d = \mathrm{normalized}(x - X_a)$
$b = \mathrm{Voray}(X_a, d)$
/* Si le rayon sort de Ω */
if $b = \emptyset$ **then**
  return $f(X_a)$
$e = X_b - X_a$
$t = \frac{e\cdot(x-X_a)}{||e||^2}$
return $f(X_a)(1-t) + tf(X_b)$

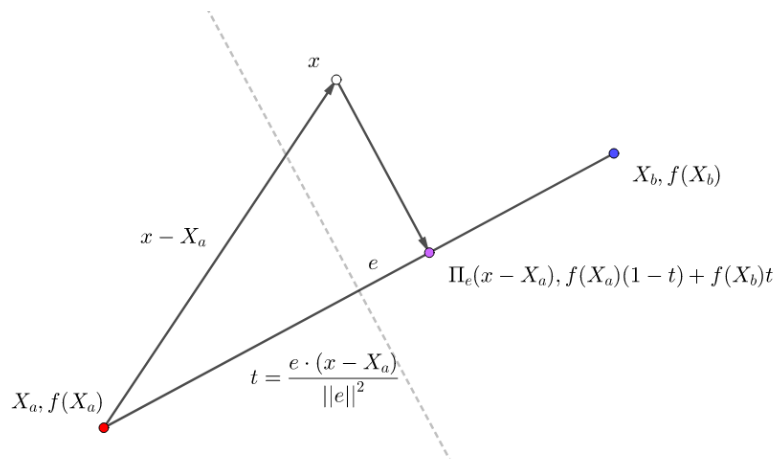
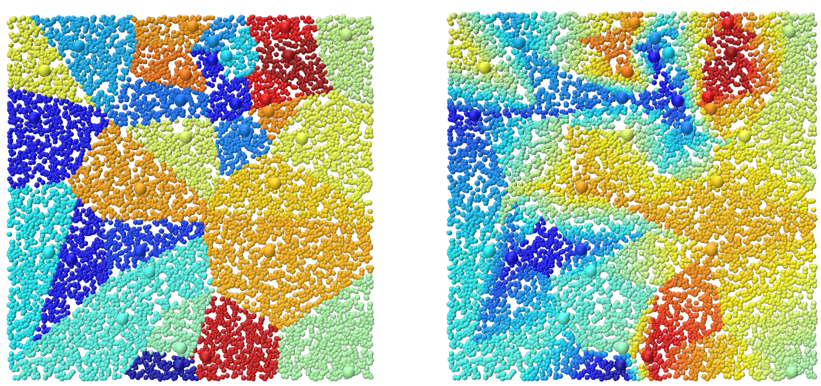


Figure 3: interpolation entre 2 points

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



(a) Interpolation constante par morceaux π_0

(b) Interpolation affine par morceaux proposée π_1

Figure 4: Comparaison des interpolations

[11] 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^{DE} par $\pi^{\mathrm{DE}}(f)$.

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 point (Voray étant logarithmique puis linéaire par rapport au nombre de points en très haute dimension).

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 arrêtes 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 substentiel (voir section suivante), et, encore une fois, permet la maîtrise de la complexité. L'interpolation est affine par morceaux sur les doubles prismes[12] suivants:

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

$$V_{a,b} = \{x \in \Omega, \mathrm{Voray}(X_a, x - X_a) = b \wedge \mathrm{Voray}(X_b, x - X_b) = a\} \tag{16}$$

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 controle initiale[13] est intégrable par quadrature par la formule (7) qui ne fait pas intervenir la dimension. Pareillement, comme I^{DE} est affine par morceaux, i.e.:

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

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,:

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

Ainsi, on peut intégrer exactement h avec uniquement les barycentres et les volumes[14], quantités qui ne dépendent pas de f (qu'on suppose inaccessible hors des sites).[15]

A noter également qu'il existe une interpolation afiine 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.

3.3 Comparaison des résultats

On observe en pratique une division par 2 de l'erreur quadratique moyenne par rapport à π_0.

J'ai prouvé par ailleurs, en dimension 1, voir Annexe, qu'on a:

[12] vides si a et b non voisins

[13] constante par morceaux donc de degré 0

[14] Bien sûr, l'évaluation des volumes et barycentres est une tâche en soit, mais, comme vu en partie 2, estimable très correctement et facilement en toute dimension par rejet global.

[15] 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

Théorème 1.

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

En d'autres termes, ce théorème nous dit que la méthode proposée est meilleure pour toute fonction dont les variations à l'intérieur de chaque cellule sont au plus 2 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 continue.

3.4 Conclusion

Ainsi, la nouvelle variable de contrôle divise en pratique la *MSE* par deux, 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[16] 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 dimesion.
3. En raison des différentes symétries du problème, l'existance 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.

En somme, la nouvelle variable de contrôle fait strictement mieux que (6), 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 du 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[17]
4. système de génération puis d'écriture/lecture de fichiers, "ground truth" pour estimer la convergence des approches.

[16] relativement aux techniques d'interpolation par morceaux qui doivent être quadraturables.

[17] on a également explorer d'autres techinques 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

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 Voray 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 trouvée, 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'examen, nous avions 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 placé 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.

Annexe

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

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

4.4 Preuve du théorème 1

Je pensais initialement que l'intégrale de toute fonction continue était mieux approchée par π_1 que par π_0, or ce n'est pas le cas, on peut trouver des contre-exemples, par exemple, sur $[0, 1]$

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-10(x-0.5)}}$$

est mieux intégrée par I^{NN} que par I^{DE}. La question qui se posa alors est de trouver l'espace de fonctions qui soient mieux intégrable par ma méthode, intuitivement un espace de fonctions qui "ne peuvent pas varier trop vite", car ce sont les fonctions proche d'être discontinue qui sont mieux approchées par I^{NN}.

Après multes essais, le point de vue le plus adapté semble être celui d'une approche géométrique pour comparer les distances entre la fonction à intégrer et celles qui les approximent.

En effet, si 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 intégrale d'une fonction f est équivalente à la comparaison des distances, i.e.

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

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 $x \in [x_i, x_j]$

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

et

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

On définit l'espace fonctionnelle considéré ainsi,

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

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

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

On cherche donc le plus grand L tel que,

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

où

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

d'où

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

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

$$\min_{f \in K_L} \langle f, I^{\mathrm{DE}} - I^{\mathrm{NN}} \rangle \tag{18}$$

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 bornée, en effet:

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

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

Donc (18) admet une solution unique et finie.

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

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

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

On vérifie qu'elle est bien solution par un argument de dualité:[18]

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:

$$[f(x)\varphi(x)]_0^W - \int_0^W f(x)\varphi'(x) - L|\varphi(x)|dx \leq 0$$

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

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 φ quelconque, on peut prendre $\varphi' = I^{\mathrm{DE}} - I^{\mathrm{NN}}$, donc φ est une primitive de $I^{\mathrm{DE}} - I^{\mathrm{NN}}$, définie à une constante près, on note donc $\varphi = \varphi_0 + d$, où φ_0 est la primitive qui vaut 0 en 0.

Ainsi, $\forall f \in K_L$,

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

De plus, en prenant $f = f_L^*$ et $d = \frac{D_L^2}{2}$, on peut vérifier[19] qu'on a :

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

Donc f_L^* est bien le minimum.

[18]Je remercie sincèrement M.Filippo Santambrogio pour son aide sur cette argument

[19]inutile de déployer les formules ici

On peut vérifier[20], qu'on obtient:

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

On cherche donc à déterminer la plus grande valeur de L telle que cette quantité soit positive, donc ici sa plus grande racine[21] pour obtenir la borne recherchée, en posant $x = WL$ on a:

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

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

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

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 $Q(2) = 2 > 0$), donc:

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

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:

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

□.

4.5 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'échantillions 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.

[20] calcul fait avec wolfram alpha, je ne suis pas fou à ce point

[21] terme dominant négatif donc négatif en $+\infty$

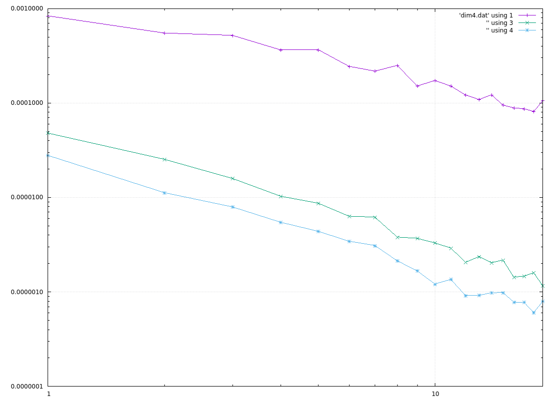


Figure 5: Convergence de l'erreur en dimension 4

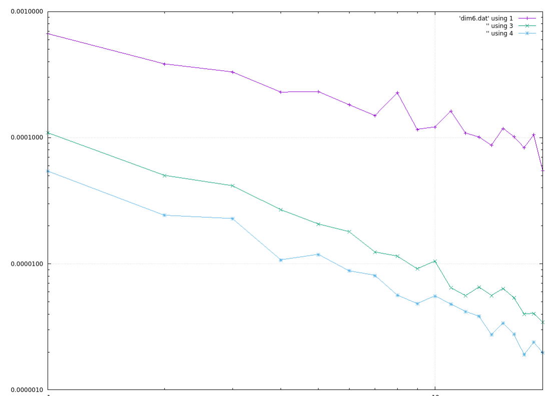


Figure 6: Convergence de l'erreur en dimension 6

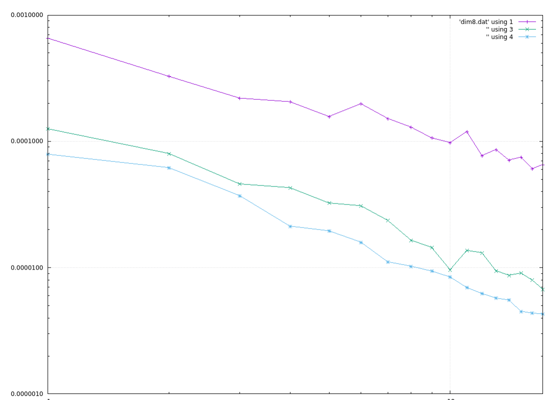


Figure 7: Convergence de l'erreur en dimension 8

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.

[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