

T.E.R : Noyau énergie distance pour le recalage de forme

SOUTARSON Bruny

Juin 2024

Supervisé par François-Xavier Vialard

Table des matières

1	Présentation	2
2	Remerciements	2
3	Introduction	3
3.1	Motivations : recalage d'images médicales	3
3.2	Méthodes de recalage par flot de difféomorphismes	3
3.3	Espace à noyaux reproduisants	5
4	Implémentation numérique	12
4.1	Schéma d'Euler sur des particules	12
5	Conclusion	18
6	Bibliographie	19

1 Présentation

Durant le second semestre de mon Master 1 en Mathématiques et Applications à l'Université Gustave Eiffel (UGE), j'ai entrepris un Travail Encadré de Recherche (TER). Ce module académique comprend des réunions hebdomadaires ou bihebdomadaires, destinées à évaluer les progrès d'un projet de recherche supervisé par un professeur, et contribue à l'acquisition de 6 ECTS. Souhaitant explorer un domaine à l'intersection de l'informatique et des mathématiques, j'ai sollicité la supervision de François-Xavier Vialard, enseignant-chercheur au Laboratoire d'Informatique Gaspard Monge de l'UGE. Il a accepté avec bienveillance de m'encadrer durant ce semestre sur un projet focalisé sur le noyau énergie distance pour le recalage de formes. Nous détaillerons d'abord les fondements théoriques de ce concept, puis nous présenterons les implémentations numériques que j'ai développées.

2 Remerciements

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à François-Xavier Vialard pour avoir accepté de me guider dans ce projet de recherche, pour ses réponses éclairées à mes interrogations et pour ses conseils avisés. Mes remerciements s'étendent également à Siwan Boufadene, doctorant, pour sa contribution significative à ma compréhension approfondie du sujet. Ce TER s'est révélé être une expérience profondément enrichissante, non seulement en élargissant mon horizon académique dans des domaines jusqu'alors inexplorés de ma formation en mathématiques, mais aussi en me permettant d'apprécier de l'intérieur la dynamique et les défis du monde de la recherche.

3 Introduction

3.1 Motivations : recalage d’images médicales

Le domaine de l’imagerie médicale englobe diverses techniques d’acquisition et de restitution d’images du corps humain. En pratique, l’imagerie médicale joue un rôle crucial dans plusieurs domaines :

- **Prévention** : Par exemple, des radiographies des poumons sont réalisées pour détecter certaines maladies.
- **Diagnostic** : Elle permet d’effectuer des diagnostics en visualisant l’intérieur du corps humain sans nécessiter une intervention chirurgicale.
- **Thérapie** : Elle est utilisée pour guider les traitements, comme l’utilisation d’images vidéo pendant une intervention thérapeutique.

La modélisation obtenue à partir de ces images est donc extrêmement importante à chaque étape du processus. Une des problématiques majeures dans ce domaine est la capacité à comparer deux images ou objets géométriques de même nature. Cette comparaison pourrait non seulement faire gagner du temps au personnel médical, mais aussi permettre de repérer des différences invisibles ou très difficiles à discerner à l’œil nu. Prenons, par exemple, le cas d’un patient dont on souhaite évaluer l’évolution d’un cancer à travers des radiographies.

Nous nous intéresserons plus particulièrement à la technique du recalage d’images, qui consiste à trouver la meilleure déformation permettant de passer d’une image à une autre de même nature, en les superposant. Pour ce faire, il est possible d’identifier des correspondances entre les deux images, un processus connu sous le nom d’appariement.

3.2 Méthodes de recalage par flot de difféomorphismes

Pour mettre en œuvre efficacement cette technique, il est indispensable de formaliser mathématiquement la notion de déformation. Envisageons une image I , supposée définie sur un domaine continu Ω . Une déformation implique le repositionnement des points dans Ω . Cette modification est formalisée par une transformation $\phi : \Omega \rightarrow \Omega$, qui mappe chaque point x à sa position initiale, transformant ainsi l’image I en $\tilde{I} = I \circ \phi^{-1}$. Pour prévenir les pertes d’information ou ambiguïtés, il est crucial que ϕ soit bijective. Nous imposons également une certaine régularité en requérant que ϕ et son inverse soient continus, ou que ces fonctions soient continûment dérivables, ce qui qualifie ϕ de difféomorphisme. Une approche naturelle pour combiner les difféomorphismes est la composition, relation par laquelle on obtient un groupe. Cependant, il n’existe pas de technique efficace permettant de travailler sur un tel espace. On peut alors penser à utiliser des combinaisons linéaires de difféomorphismes ; cependant, une telle combinaison n’a aucune raison de rester un difféomorphisme. Poussé par la popularité des techniques linéaires, on a toutefois souhaité continuer vers cette approche en représentant ϕ sous la forme $\phi = \text{id} + u$, avec u un champ de déplacement dont les variations sont supposées être faibles afin que ϕ reste un

difféomorphisme. Comment construire ce u ?

En reprenant une approche venant de la physique, on peut prendre $v(t, x)$ qui donne le moment associé à une particule se trouvant à l'instant t dans la position x . En posant $\phi(t, x)$ la position à l'instant t de la particule qui se trouvait en x à l'instant 0, on obtient l'équation,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(t, x) = v(t, \phi(t, x)).$$

Maintenant que nous savons que nous avons besoin de difféomorphismes pour effectuer nos transformations, nous souhaitons obtenir le difféomorphisme optimal. Nous cherchons à trouver le difféomorphisme tel que le “transport” du premier objet soit le plus proche possible du second. Comment y parvenir ?

Le problème se formule comme suit : étant données deux images I_0 et I_1 (comme fonctions sur Ω), il s'agit de trouver un difféomorphisme $\phi : \Omega \rightarrow \Omega$ tel que $I_1 \circ \phi \approx I_0$. Une méthode courante est de minimiser

$$\int_{\Omega} |I_0 \circ \phi^{-1} - I_1|^2 dx$$

sur l'ensemble des difféomorphismes possibles. Ce problème est souvent mal posé, le minimum n'étant pas nécessairement atteint, mais des algorithmes de descente de gradient appliqués à cette fonctionnelle peuvent produire des solutions viables, à condition qu'ils soient exécutés correctement et arrêtés à temps. Traditionnellement, on ajoute un terme de régularisation à cette fonctionnelle pour minimiser

$$J(\phi) = \int_{\Omega} |I_0 \circ \phi^{-1} - I_1|^2 dx + \lambda R(\phi), \quad (1)$$

où R quantifie la régularité de ϕ comme fonction.

Pour déterminer une mesure adéquate de régularité, il est crucial de comprendre l'espace mathématique sous-jacent. Un cadre idéal serait un espace de Hilbert V de champs de vecteurs, dont la norme mesure le coût des déformations tout en assurant une régularité suffisante des champs de vecteurs.

Définition 3.1. Un espace vectoriel V de champs de vecteurs sur \mathbb{R}^d sera dit admissible s'il vérifie les conditions suivantes :

1. V est un espace de Hilbert. Sa norme sera notée $\|\cdot\|_V$ et son produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_V$.
2. $(V, \|\cdot\|_V)$ s'injecte continûment dans $C_0^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$, les champs de classe C^1 sur \mathbb{R}^d s'annulant à l'infini, ainsi que leurs dérivées partielles. Il existe donc une constante $c_V > 0$ telle que pour tout $v \in V$,

$$\|v\|_{\infty} \leq c_V \|v\|_V.$$

D'après [1], dans ce nouveau contexte, minimiser par ϕ revient à minimiser par v un champs de vecteurs, (1) devient donc :

$$J(v) = \int_{\Omega} |I_0 \circ \phi^{-1} - I_1|^2 dx + \lambda \int_0^1 \|v_t\|^2 dt. \quad (2)$$

3.3 Espace à noyaux reproduisants

Dans un but de construction du cadre idéal on s'intéresse aux noyaux (*kernel* en anglais) et on établit le lien entre leurs propriétés de régularité et celle de l'espace dans lequel ils évoluent.

Définition 3.2. Un **espace à noyau reproduisant** (ENR) est un espace de Hilbert \mathcal{H} de fonctions définies sur un ensemble \mathcal{X} tel que pour tout $x \in \mathcal{X}$, l'évaluation en x est une application linéaire continue sur \mathcal{H} . Formulée mathématiquement, cela signifie qu'il existe une unique fonction $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ (ou \mathbb{C}), appelée *noyau reproduisant*, telle que pour tout $x \in \mathcal{X}$ et pour tout $f \in \mathcal{H}$, on a :

$$f(x) = \langle f, K(x, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}}.$$

Définition 3.3. Un **noyau positif** est une fonction $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ (ou \mathbb{C}) qui satisfait les deux propriétés suivantes :

1. K est symétrique : $K(x, y) = K(y, x)$ pour tout $x, y \in \mathcal{X}$.
2. K est positif : pour tout ensemble fini $\{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subset \mathcal{X}$ et pour tout vecteur $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^n$ (ou \mathbb{C}^n), on a :

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) \geq 0.$$

Ou de manière équivalente, $\forall n \in \mathbb{N}, \forall x_1, \dots, x_n \in \mathcal{X}$, la matrice de Gram \mathbf{K} est une matrice symétrique, semi positive.

Les noyaux positifs possèdent plusieurs propriétés intéressantes :

1. **Symétrie** : $K(x, y) = K(y, x)$ pour tous $x, y \in X$.
2. **Propriété de cône** : Si K_1 et K_2 sont des noyaux définis positifs, alors $aK_1 + bK_2$ est également un noyau défini positif pour $a, b \geq 0$.
3. **Produit** : Si K_1 et K_2 sont des noyaux définis positifs, alors leur produit $K(x, y) = K_1(x, y)K_2(x, y)$ est également un noyau défini positif.
4. **Exponentiation** : Si K est un noyau défini positif, alors $e^{K(x, y)}$ est aussi un noyau défini positif.

Exemple 3.4. Le noyau linéaire est défini par :

$$K(x, y) = \langle x, y \rangle.$$

Le noyau de Gauss est défini par :

$$K(x, y) = \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{2\sigma^2}\right),$$

où $\sigma > 0$ est un paramètre qui contrôle la largeur du noyau.

Introduisons également une définition moins forte que la positivité que l'on utilisera plus tard.

Définition 3.5. Un noyau symétrique $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ est dit **conditionnellement positif (ou CD)** si, pour tout ensemble de points distincts $\{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \mathcal{X}$ et pour tout vecteur non nul $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^n$ tel que :

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 0,$$

on a :

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j K(x_i, x_j) \geq 0.$$

Exemple 3.6. La fonction de noyau est donnée par :

$$K(x, y) = -\|x - y\|^2 = -\|x\|^2 - \|y\|^2 + 2\langle x, y \rangle. \quad (3)$$

Démonstration. Soit $\{x_1, \dots, x_n\} \subseteq \mathcal{X}$ avec $\sum_{j=1}^n c_j = 0$. Nous avons :

$$\sum_{j,k=1}^n c_j c_k K(x_j, x_k) = - \sum_{j,k=1}^n c_j c_k (\|x_j\|^2 + \|x_k\|^2 - 2\langle x_j, x_k \rangle) \quad (4)$$

$$= - \sum_{k=1}^n c_k \left(\sum_{j=1}^n c_j \|x_j\|^2 \right) - \sum_{j=1}^n c_j \left(\sum_{k=1}^n c_k \|x_k\|^2 \right) \quad (5)$$

$$+ 2 \sum_{j,k=1}^n c_j c_k \langle x_j, x_k \rangle \quad (6)$$

$$= 2 \sum_{j,k=1}^n c_j c_k \langle x_j, x_k \rangle \geq 0. \quad (7)$$

Ce noyau respecte donc bien la propriété nécessaire pour être conditionnellement positif. \square

L'intérêt de cette définition repose sur le théorème fondamentale suivant :

Théorème 3.7. *Les noyaux vectoriels positifs de dimension m sur \mathcal{X} sont exactement les noyaux reproduisants des ENR de fonctions définies sur \mathcal{X} et à valeurs dans \mathbb{R}^m . Plus précisément,*

- i) *Le noyau reproduisant d'un ENR est un noyau positif.*
- ii) *À tout noyau positif k sur \mathcal{X} de dimension m , il correspond un unique ENR sur \mathcal{X} , à valeurs dans \mathbb{R}^m , dont k est le noyau reproduisant.*

On peut donc, à partir d'un ENR, obtenir un noyau positif, et l'inverse est également vrai. De plus, la proposition suivant nous montre les liens de régularité entre les deux.

Proposition 3.8. *Soit k un noyau vectoriel positif de dimension m , continu et borné sur \mathbb{R}^d , et tel que pour tout $x \in \mathbb{R}^d$, $k(x, \cdot)$ est nul à l'infini. Alors l'espace reproduisant de k s'injecte continûment dans $C_0(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^m)$.*

Démonstration. Par hypothèse, les fonctions $k(x, \cdot)\alpha$ appartiennent toutes à $C_0(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^m)$. Donc, l'espace H_0 qu'elles engendrent est inclus dans $C_0(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^m)$. D'autre part, par définition du noyau reproduisant, pour tous $f \in H_0$ et $x \in \mathbb{R}^d$, $\alpha \in \mathbb{R}^m$, nous avons :

$$f(x) \cdot \alpha = \langle f, k(x, \cdot)\alpha \rangle_H = \langle k(x, \cdot)\alpha, f \rangle_H.$$

En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, nous obtenons :

$$|f(x) \cdot \alpha| \leq \|k(x, \cdot)\alpha\|_H \|f\|_H = \sqrt{\langle k(x, \cdot)\alpha, k(x, \cdot)\alpha \rangle_H} \|f\|_H,$$

et donc :

$$\|f\|_\infty \leq \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|k(x, \cdot)\|_H \|f\|_H.$$

Par conséquent, les suites de Cauchy dans H_0 convergent au sens de la norme uniforme, et donc les éléments de H (limites simples des suites de Cauchy) appartiennent à $C_0(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^m)$ et vérifient :

$$\|f\|_\infty \leq \|k\|_\infty \|f\|_H.$$

Ainsi, H s'injecte continûment dans $C_0(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^m)$. □

La construction de l'espace de Hilbert V des champs de vecteurs peut donc se faire avec une méthode simple : choisir un noyau assez régulier puis définir V comme l'unique ENR lui correspondant.

D'après [1], dans le cas où $\mathcal{X} = \{x^1, \dots, x^n\}$, les points x^i étant distincts. Pour tout élément $v \in H$, il existe alors des vecteurs $\alpha^i \in \mathbb{R}^d$ tels que :

$$v(x) = \sum_{i=1}^n k_V(x, x^i) \alpha^i. \quad (8)$$

Les trajectoires $x_t^i = \phi_t(x^i)$ vérifiant

$$x_t^i = x^i + \int_0^t \sum_{j=1}^n k_V(x_s^i, x_s^j) \alpha^j ds.$$

On voit donc que l'on va pouvoir paramétrer l'espace de minimisation par les vecteurs α^i . Cependant, pour définir un nouvel espace de minimisation sur ces variables, nous avons besoin de contrôler la norme des α^i . Ceci est possible si l'on suppose la stricte positivité du noyau k_V . En effet, on a l'égalité :

$$\|v\|_V^2 = \sum_{i,j=1}^n \alpha^i \cdot k_V(x_t^i, x_t^j) \alpha^j.$$

On obtient alors une nouvelle version de (1) :

Proposition 3.9. *Supposons que le noyau k_V est strictement positif. Alors lorsque $\mathcal{X} = \{x^1, \dots, x^n\}$, les points x^i étant tous distincts, la fonctionnelle d'appariement vu précédemment peut être écrite comme fonction des paramètres α^i dans l'espace $L^2([0, 1], (\mathbb{R}^d)^n)$:*

$$J(\{\alpha^i\}) = \lambda \int_0^1 \sum_{i,j} \alpha^i \cdot k_V(x_t^i, x_t^j) \alpha^j dt + A(\{\alpha^i\}), \quad (9)$$

où les trajectoires $x_t^i \in \mathbb{R}^d$ étant calculées par résolution du système intégral précédent. Et

$$A((x_i)_{1 \leq i \leq n}) = \sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^2.$$

Remarquons que la somme dans (9) s'effectue à priori pour un noyau positif quelconque en $O(n^2)$

Récemment, les travaux de [2] se sont intéressés au noyau suivant en raison de sa complexité.

Définition 3.10. Noyau Energie Distance (ED Kernel)

Soient $x, y \in X$, où X est un espace métrique. Le *Noyau Energie Distance* entre x et y est défini par la formule suivante :

$$K(x, y) = -\|x - y\|,$$

où $\|x - y\|$ représente la norme induite par la métrique de l'espace X .

La démonstration de la complexité [2] de ce dernier étant non trivial, on donnera simplement l'idée derrière. En dimension 1, pour une liste triée de $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}}$, on obtient

$$\sum_{\substack{i \in [1, N] \\ j \in [0, N]}} |x_i - x_j| = \sum_{i=1, \dots, N} (2i - 1 - N) x_i. \quad (10)$$

Le trie d'une liste s'effectuant en $O(n \log(n))$ et le calcul de la somme étant en temps linéaire, on obtient bien une complexité en $O(n \log(n))$.

Cependant, ce noyau n'est pas positif, il est seulement conditionnellement positif. Pour le démontrer, introduisons les notions suivantes.

Définition 3.11. Un espace métrique (\mathcal{X}, d) est dit de type négatif si, pour tout ensemble de points distincts $\{x_1, x_2, \dots, x_n\} \subseteq \mathcal{X}$ et pour tout vecteur non nul $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}$ tel que :

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 0,$$

on a :

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i \alpha_j d(x_i, x_j) \leq 0.$$

D'après [4], on a :

Théorème 3.12. \mathcal{X} est de type négatif s'il existe un espace de Hilbert H et une fonction $\phi : \mathcal{X} \rightarrow H$ tel $\forall x, x' \in \mathcal{X}, d(x, x') = \|\phi(x) - \phi(x')\|^2$.

Démontrons dans le cas simple où $\mathcal{X} = \mathbb{R}$ que le noyau energie distance est conditionnellement positif pour cela vérifions que $(\mathbb{R}, |\cdot|)$ est de type négatif.

En utilisant $\phi(x) := \mathbb{1}_{[0, \infty[} - \mathbb{1}_{[x, \infty[}$ dans $L^2(\mathbb{R}, \lambda)$, où λ est la mesure de Lebesgue. Nous considérons plusieurs cas pour démontrer l'égalité avec cette fonction et calculons la norme dans $L^2(\mathbb{R}, \lambda)$ de la différence des fonctions indicatrices $\mathbb{1}_{[0, x]}$ et $\mathbb{1}_{[0, y]}$.

Cas 1 : $x = y$

Si $x = y$, alors $\mathbb{1}_{[0, x]} = \mathbb{1}_{[0, y]}$ et donc :

$$\mathbb{1}_{[0, x]} - \mathbb{1}_{[0, y]} = 0,$$

et :

$$\|\mathbb{1}_{[0,x]} - \mathbb{1}_{[0,y]}\|_{L^2}^2 = 0.$$

Cas 2 : $x \neq y$

Sous-cas 2.1 : $x < y$

Dans ce cas, nous avons :

$$\mathbb{1}_{[0,x]}(t) - \mathbb{1}_{[0,y]}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \in [0, x], \\ -1 & \text{si } t \in (x, y], \\ 0 & \text{si } t > y. \end{cases}$$

La norme L^2 au carré de cette fonction est calculée comme suit :

$$\|\mathbb{1}_{[0,x]} - \mathbb{1}_{[0,y]}\|_{L^2}^2 = \int_x^y 1 d\lambda(t) = y - x.$$

Sous-cas 2.2 : $x > y$

Dans ce cas :

$$\mathbb{1}_{[0,x]}(t) - \mathbb{1}_{[0,y]}(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \in [0, y], \\ 1 & \text{si } t \in (y, x], \\ 0 & \text{si } t > x. \end{cases}$$

La norme L^2 au carré de cette fonction est :

$$\|\mathbb{1}_{[0,x]} - \mathbb{1}_{[0,y]}\|_{L^2}^2 = \int_y^x 1 d\lambda(t) = x - y.$$

Finalement, on obtient bien :

$$\|\mathbb{1}_{[0,x]} - \mathbb{1}_{[0,y]}\|_{L^2}^2 = |x - y|,$$

d'où le résultat attendu.

Toute la construction théorique abordée dans la partie précédente repose sur deux aspects essentiels du noyau : sa positivité et sa régularité. Étant donné les avantages en termes de complexité que le noyau énergie distance offre, nous souhaiterions pouvoir l'utiliser dans ce contexte.

Deux approches sont alors envisagées :

- **Mathématiquement** : Cette approche consiste à examiner la régularité des déformations engendrées par les flots. C'est un problème complexe qui ne rentre pas dans le cadre de mon TER.
- **Numériquement** : La question fondamentale est : est-ce que ça fonctionne ? En effet, tout l'objectif de l'approche du recalage de forme repose, en fin de compte, sur des applications numériques. Si cela ne fonctionne pas numériquement, il n'y a pas beaucoup d'intérêt à étudier la question théoriquement.

Dans la prochaine partie, nous observerons des applications numériques permettant de déterminer si ce noyau est viable. Nous le comparerons avec le noyau gaussien et une version étendue du noyau énergie distance que nous définissons comme suit.

Définition 3.13 (Noyau ED modifié). Soient $x, y \in \mathbb{R}$ (ou l'espace approprié). Le *Noyau ED modifié* $K(x, y)$ est défini par la formule :

$$K(x, y) := -|x - y| + |x| + |y|,$$

où $|x|$ et $|y|$ dénotent les normes de x et y , respectivement, et $|x - y|$ est la distance entre x et y .

L'avantage de cette version modifiée est qu'elle reste calculable en $O(n \log n)$, car les éléments ajoutés ne nécessitent qu'un temps de calcul linéaire. De plus on obtient un noyau positif.

Démonstration. Remarquons que :

$$K(x, y) = -|x - y| + |x| + |y| = 2 \min(x, y),$$

ce qui est deux fois le noyau de covariance du mouvement brownien. Plus précisément, soit $(W_t)_{t>0}$ un mouvement brownien et $s, t > 0$. Alors, on a

$$\text{Cov}(W_s, W_t) = \min(s, t) = \frac{1}{2} K(x, y).$$

Les matrices de covariance sont toujours symétriques et semi-définies positives. Puisque $K(x, y)$ peut être exprimé comme deux fois une covariance de mouvement brownien, cela implique que $K(x, y)$ est un noyau semi-défini positif. \square

4 Implémentation numérique

4.1 Schéma d'Euler sur des particules

On rappelle que l'on a $(v(t, x))_{t \in [0,1]}$ famille de champs de vecteurs qui donne le moment associé à une particule x à l'instant t et $\phi(t, x)$ la position à l'instant t de la particule qui se trouvait en x à l'instant 0. On a alors, selon l'équation de flot, l'identité définit selon l'équation de flot

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(t, x) = v(t, \phi(t, x)).$$

Afin de simuler des mouvements de particules sous l'influence de forces, on réalise le schéma d'Euler explicite associé à l'équation différentielle précédente. Il permet d'obtenir une valeur approchée à l'instant $t + 1$ de ϕ_{t+1} à partir de sa valeur en t comme ceci :

$$\phi(t + 1, x) = \phi(t, x) + v(t, \phi(t, x)).$$

De plus, on rappelle que d'après (8), on a $v(x) = \sum_{i=1}^n k_V(x, x^i) \alpha^i$. On implémente alors l'algorithme suivant.

Algorithm 1 Optimisation de la trajectoire entre des points en utilisant un schéma d'Euler explicite

- 1: Initialiser les positions initiales q_0 , les quantités de mouvement initiales p_0 , et les positions cibles z .
 - 2: Définir le nombre de pas de temps nt .
 - 3: Définir le noyau h que l'on veut.
 - 4: Créer l'optimiseur pour p_0 .
 - 5: **for** $i = 1$ **to** nt **do**
 - 6: **for all** *membre* **in** $q[i]$ **do**
 - 7: $q_l(i + 1) = q_l(i) + 1/nt \times v_i(q(i))$
 - 8: **end for**
 - 9: Ajouter la nouvelle position à la liste des positions.
 - 10: **end for**
 - 11: Optimiser p_0 pour minimiser la perte par rapport à z .
-

Voici une illustration des résultats obtenus.

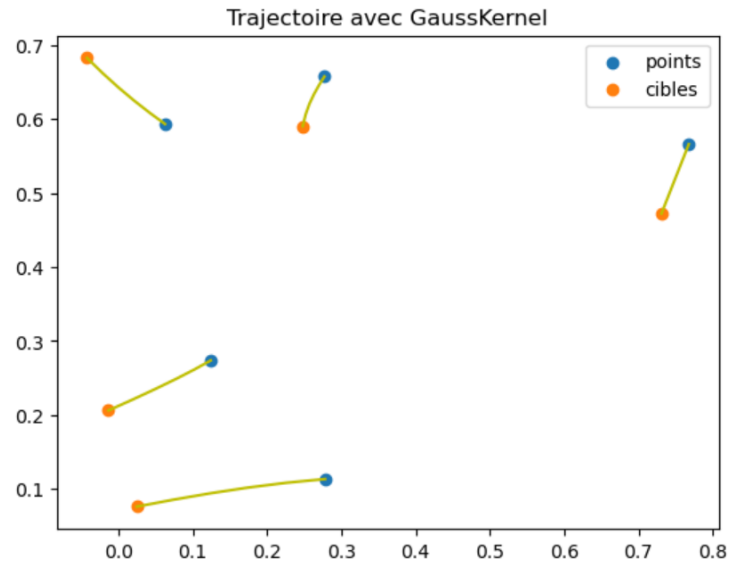


FIGURE 1 – Trajectoire avec GaussKernel de points avec $\sigma = 0.25$

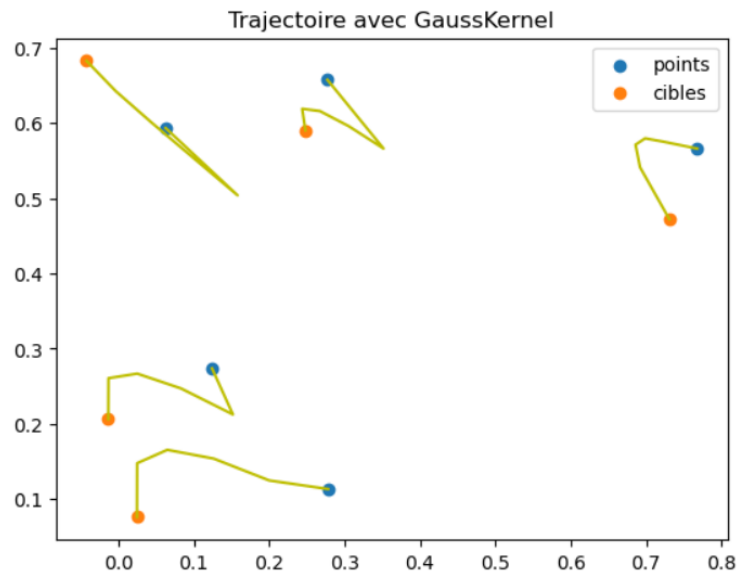


FIGURE 2 – Trajectoire avec GaussKernel de points $\sigma = 0.9$

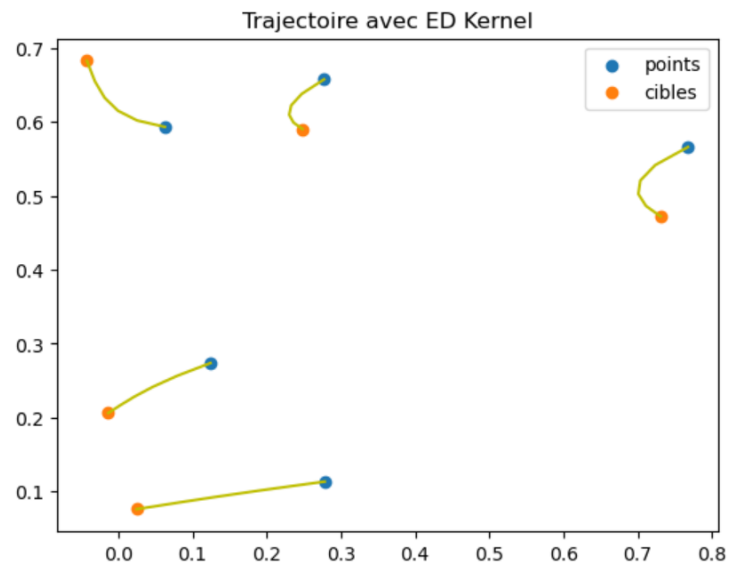


FIGURE 3 – Trajectoire avec ED Kernel Modifié de points

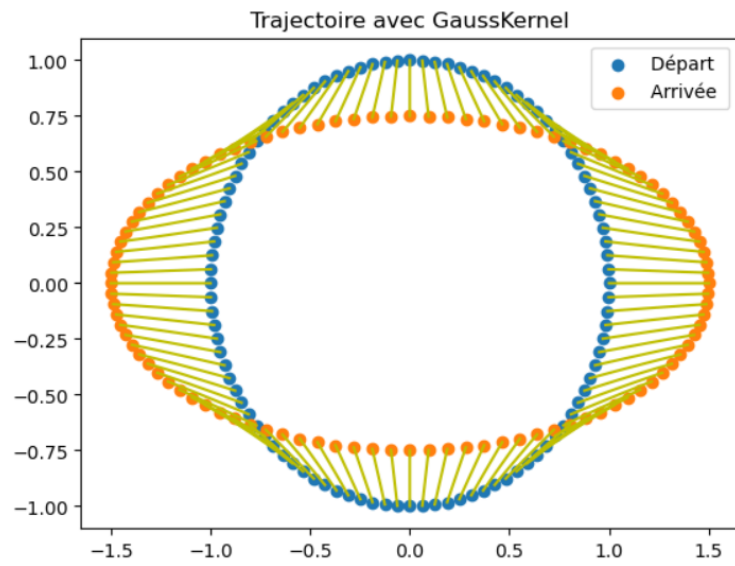


FIGURE 4 – Trajectoire avec GaussKernel (Cercle à ellipse) $\sigma = 0.25$

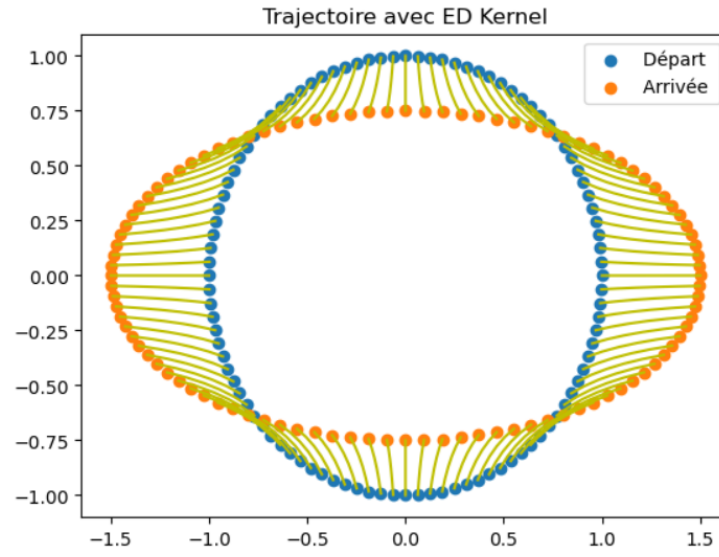


FIGURE 5 – Trajectoire avec ED Kernel Modifié (Cercle à ellipse)

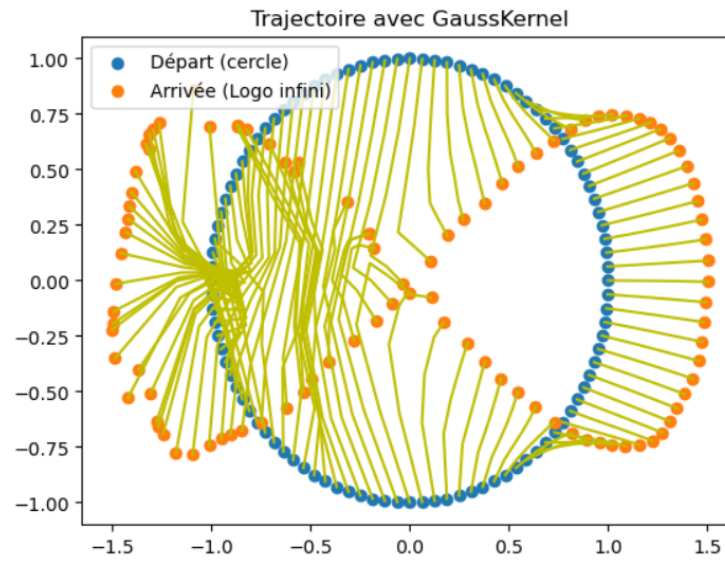


FIGURE 6 – Trajectoire avec GaussKernel (Cercle à infini) $\sigma = 0.25$

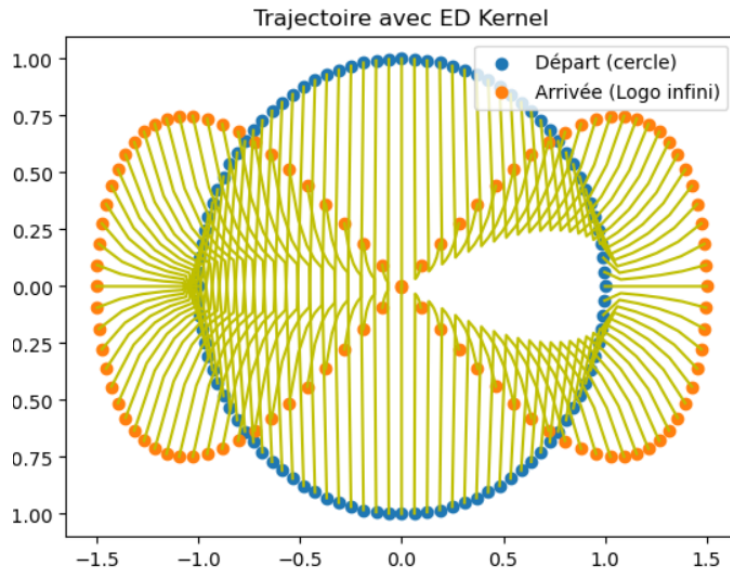


FIGURE 7 – Trajectoire avec ED Kernel Modifié (Cercle à infini)

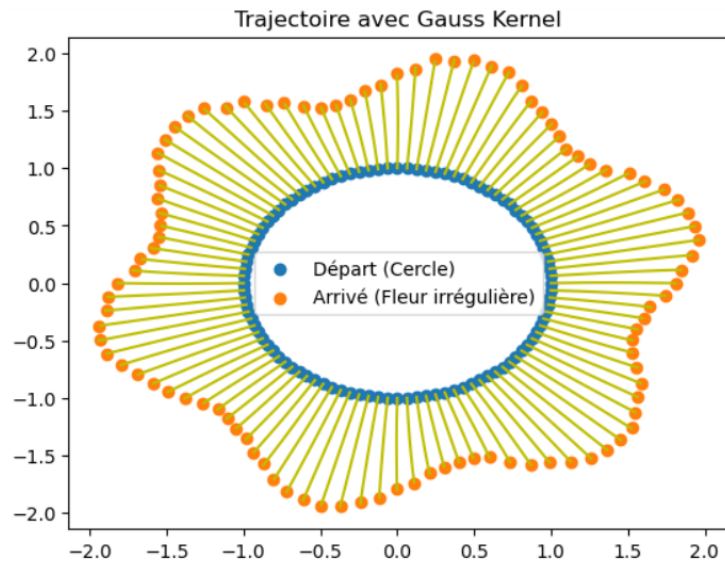


FIGURE 8 – Trajectoire avec GaussKernel (Cercle à fleur irrégulière) $\sigma = 0.25$

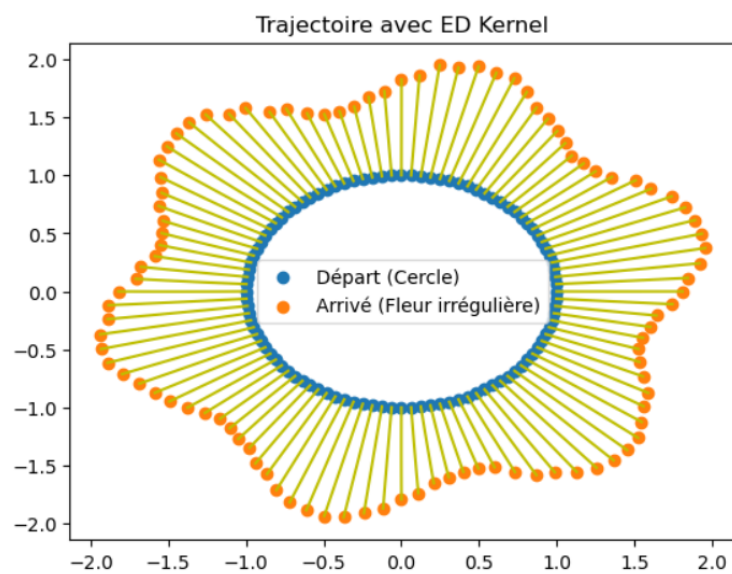


FIGURE 9 – Trajectoire avec ED Kernel Modifié (Cercle à fleur irrégulière)

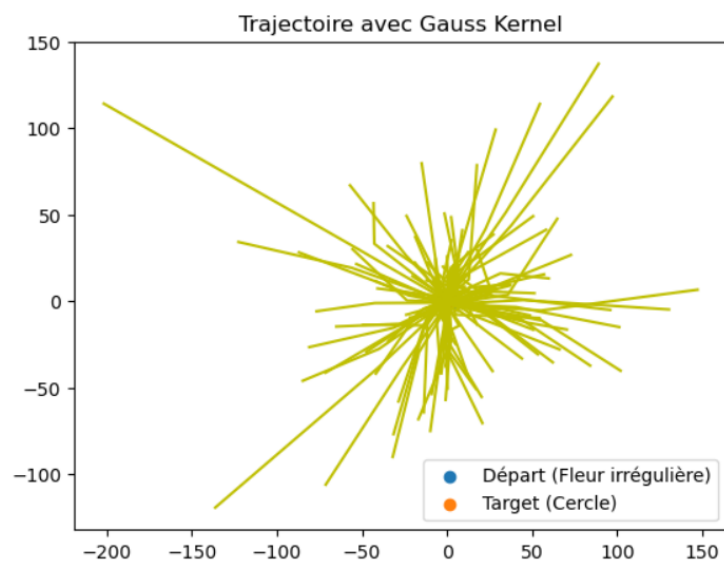


FIGURE 10 – Trajectoire avec GaussKernel (Fleur irrégulière à cercle) $\sigma = 0.25$

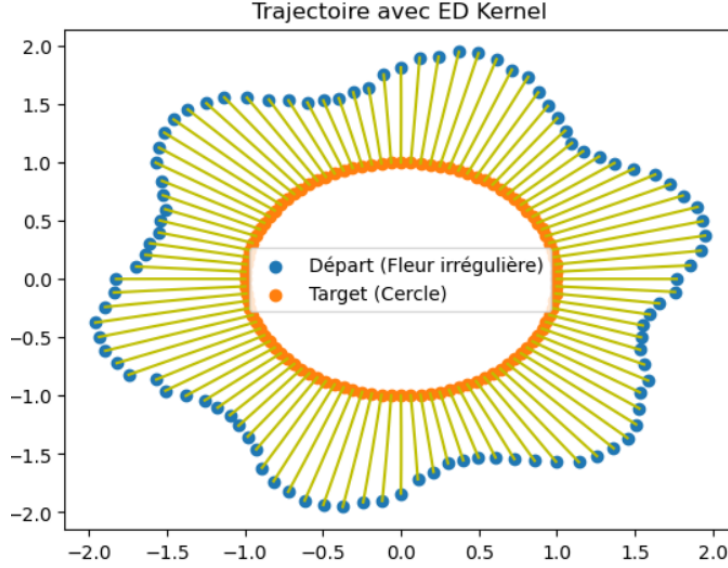


FIGURE 11 – Trajectoire avec ED Kernel Modifié (Fleur irrégulière à cercle)

Lors de simples appariements de points (cf. 1, 2, 3), la performance du noyau gaussien est fortement influencée par le choix de σ . En effet, lorsque σ est très petit, on observe principalement des lignes droites. La performance du noyau ED modifié, quant à elle, est meilleure que celle du noyau gaussien lorsque σ est grand. Lors du passage d'une forme à une autre avec des trajectoires linéaires (cf. 4, 5, 8, 9), aucune différence notable n'est observée. Cependant, la complexification des formes met en évidence les supériorités du noyau ED modifié, qui produit de meilleurs résultats (cf. 6, 7). En outre, lors de la contraction d'une forme, une différence significative est constatée : le noyau gaussien s'avère inefficace dans ce contexte (cf. 11, 10).

5 Conclusion

Les observations faites à partir de plusieurs exemples montrent des résultats très encourageants pour le noyau énergie distance, révélant des avantages qui dépassent sa moindre complexité. Par exemple, contrairement au noyau gaussien utilisé pour la comparaison, qui dépend d'un paramètre spécifique, le noyau énergie distance n'en nécessite aucun. Ces observations numériques incitent donc à une exploration théorique.

A priori, le noyau ED, étant moins régulier, génère un espace de déformations plus riche que celui produit par un noyau gaussien. Cependant, cela pourrait entraîner des déformations qui ne correspondent plus à des difféomorphismes. L'étude de cette perspective va au-delà du cadre de ce projet.

6 Bibliographie

Références

- [1] Glaunes. [Transport par difféomorphismes de points, de mesures et de courants pour la comparaison de formes et l'anatomie numérique.](#)
- [2] Johannes Hertrich, Christian Wald, Fabian Altekriiger, and Paul Hagemann. [Generative Sliced MMD Flows with Riesz Kernels.](#) *arXiv*, preprint arXiv :2305.11463, 2023. doi : 10.48550/arXiv.2305.11463.
- [3] Russell Lyons. [Distance covariance in metric spaces.](#) *Annals of Probability*, 41(5), 2013. doi : 10.1214/12-AOP803.
- [4] I. J. Schoenberg. [On certain metric spaces arising from Euclidean spaces by a change of metric and their imbedding in Hilbert space.](#) *Ann. of Math.*, 1937.
- [5] Alain Trouvé. Cours géométrie et espaces de formes. Cours présenté au master MVA.
- [6] Alain Trouvé and Laurent Younes. Mise en correspondance d'objets déformables.