Noyaux définis positifs

Cours DEA 2003/04

Jean-Philippe Vert

`Jean-Philippe.Vert@mines.org`

Plan

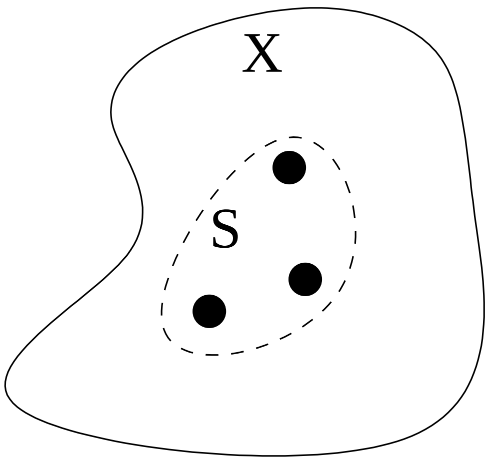
- Représentation des données par similarité
- Noyau défini positif
- Théoreme de Mercer
- Espace de Hilbert a noyau reproduisant (e.h.n.r.)
- Noyau de Mercer et e.h.n.r.
- E.h.n.r. et fonctions de Green
- Noyaux et régularisation par transformée de Fourier

Représentation des données par similarité

Les données

Soit $\mathcal{X}$ un ensemble. Un *objet* est un point $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$. Un ensemble de données a analyser sera souvent un ensemble fini de N objets: $\mathcal{S} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\}$. Par exemple:

- $\mathcal{X}$ est l'ensemble de toutes les séquences finies dans l'alphabet $\{A, C, G, T\}$
- Un objet $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ est une séquence d'ADN qui code pour un gene
- $\mathcal{S}$ est l'ensemble est 30.000 genes humains



Représentation classique des données

Soit un *algorithme* A capable de traiter des données d'un espace $\mathcal{F}$, par exemple $A : \mathcal{F}^N \mapsto \mathbb{R}$. Pour traiter $\mathcal{S}$, il faut soit $\mathcal{X} = \mathcal{F}$, soit définir une application $\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{F}$ et travailler sur l'ensemble:

$$\Phi\left(\mathcal{S}\right) = \left\{\Phi\left(\mathbf{x}_1\right), \ldots, \Phi\left(\mathbf{x}_N\right)\right\} \in \mathcal{F}^N.$$

Par example:

- $\mathcal{F} =$ l'ensemble des séquences finies, pour un algorithme de compression
- $\mathcal{F} = \mathbb{R}^d$, pour un algorithme qui calcule le barycentre

Représentation par comparaison

Plutôt que de représenter chaque objet $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ individuellement par $\Phi(xb) \in \mathcal{F}$, et donc $\mathcal{S} \in \mathcal{X}^N$ par $\Phi(\mathcal{S}) \in \mathcal{F}^N$, soit une *fonction de similarité*:

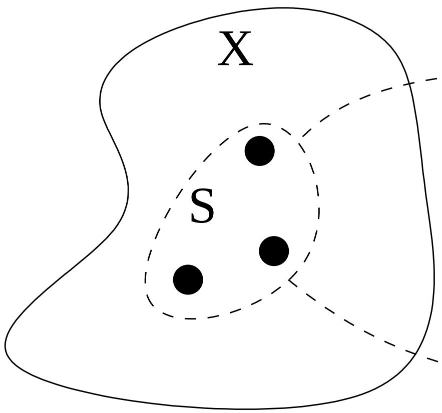
$$K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}.$$

On peut alors représenter $\mathcal{S}$ par la *matrice de similarité* $N \times N$:

$$[K]_{ij} := K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$$

On utilisera alors des algorithmes capables de traiter des matrices carrées.

Les deux représentations



$\phi(S)=(\texttt{aatcgagtcac},\texttt{atggacgtct},\texttt{tgcactact})$

$$K=\begin{pmatrix} 1 & 0.5 & 0.3 \\ 0.5 & 1 & 0.6 \\ 0.3 & 0.6 & 1 \end{pmatrix}$$

Remarques

- La représentation par similarité est *toujours une matrice carrée réelle*, quels que soient les objets (séquences, vecteurs, images, ...). Le même algorithme pourra traîter toutes ces données.
- Il y aura une complete *modularité* entre le choix de la fonction de similarité, d'une part, et le choix de l'algorithme qui sera appliqué a la matrice de similarité,d'autre part.
- La *taille* de la matrice de similarité est toujours $N \times N$, quelles que soient la nature et la complexité des objets
- Il est parfois plus simple de comparer des objets complexes que de les transformer en une forme imposée par un algorithme.

Noyaux définis positifs

Noyaux définis positifs (n.d.p.)

Nous nous restreindrons dans ce cours a une classe particuliere de fonction de similarité:

Definition 1 *Un* noyau défini positif (n.d.p.) *sur l'ensemble $\mathcal{X}$ est une fonction $K : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \to \mathbb{R}$* symétrique*:*

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = K\left(\mathbf{x}', \mathbf{x}\right),$$

et qui satisfait, pour tout $N \in \mathbb{N}$, $\left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\right) \in \mathcal{X}^N$ et $\left(a_1, a_2, \ldots, a_N\right) \in \mathbb{R}^N$:

$$\sum_{i=1}^{N} a_i a_j K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\right) \geq 0.$$

N.d.p. (suite)

- Définition équivalente: pour tout ensemble d'objets $\mathcal{S} \in \mathcal{X}^N$, la matrice de similarité est symétrique semi-définie positive.
- En nous restreignant aux n.d.p., nous allons pouvoir utiliser une large famille d'algorithmes, les *méthodes a noyau*, qui travaillent sur des matrices symétriques semi-définies positives.

Le plus simple n.d.p.

Soit $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ et la fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$ définie par:

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \right\rangle$$

On vérifie que K est un n.d.p., appelé le *noyau linéaire*:

- $\left\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \right\rangle = \left\langle \mathbf{x}', \mathbf{x} \right\rangle$,
- $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \left\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \right\rangle = \| \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{x}_i \|^2 \geq 0$

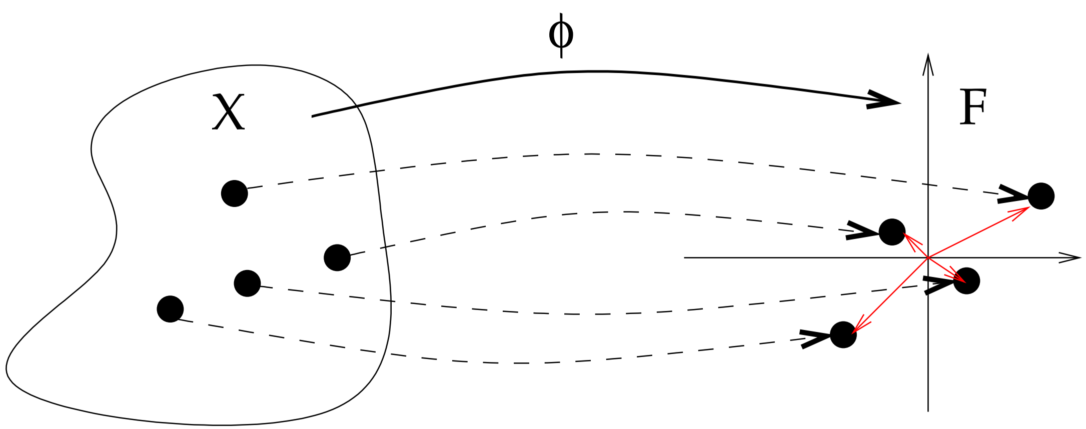
Un n.p.d. plus ambitieux

Soit $\mathcal{X}$ quelconque, et $\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}^d$. Alors la fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$ définie par:

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}'\right) = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right)\right\rangle$$

est un n.d.p, car:

- $\left\langle \Phi\left(\mathbf{x}_i\right), \Phi\left(\mathbf{x}_j\right)\right\rangle = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}'\right), \Phi\left(\mathbf{x}\right)\right\rangle$,
- $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N a_i a_j \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right)\right\rangle = \parallel \sum_{i=1}^N a_i \Phi\left(\mathbf{x}_i\right) \parallel^2 \geq 0$



Réciproquement...

Nous allons démontrer la réciproque suivante:

Theoreme 2 *Si* K *est un n.p.d. sur un espace* $\mathcal{X}$ *quelconque, alors* il existe un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ *muni du produit scalaire* $\langle .,. \rangle_{\mathcal{H}}$ *et une application*

$$\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{H},$$

telle que:

$$\forall \left(\mathbf{x},\mathbf{x}'\right) \in \mathcal{X}^2, \quad K\left(\mathbf{x},\mathbf{x}'\right) = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}\right), \Phi\left(\mathbf{x}'\right) \right\rangle_{\mathcal{H}}.$$

Au cas ou...

Definition 3

- *Un* produit scalaire *sur un $\mathbb{R}$-espace vectoriel $\mathcal{H}$ est une application $(f, g) \mapsto \langle f, g \rangle_{\mathcal{H}}$ de $\mathcal{H}^2$ dans $\mathbb{R}$ qui est* bilinéaire, symétrique *et telle que $\langle f, f \rangle > 0$ pour tout $f \in \mathcal{H} \backslash \{0\}$.*
- *Un espace vectoriel muni d'un produit scalaire est appelé* pré-hilbertien. *Il est muni d'une norme associée au produit scalaire par $\| f \|_{\mathcal{H}} = \langle f, f \rangle_{\mathcal{H}}^{\frac{1}{2}}$.*
- *Un* espace de Hilbert *est un espace vectoriel muni d'un produit scalaire et complet pour la norme associée.*

Preuves du Théoreme 2

- Depuis l'origine de l'algebre si $\mathcal{X}$ est fini
- Mercer (1909) pour $\mathcal{X} = [a, b] \subset \mathbb{R}$ et K continue
- Kolmogorov (1941) pour $\mathcal{X}$ dénombrable
- Aronszajn (1944, 1950) pour le cas général

Preuve: cas $\mathcal{X}$ fini

- On suppose $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N\}$ fini
- Si K est un n.d.p. alors la matrice $N \times N$ de similarité est *symétrique définie positive* donc *diagonalisable dans une base orthonormée* $(u_1, u_2, \ldots, u_N)$ avec des valeurs propres $0 \leq \lambda_1 \leq \ldots \leq \lambda_N$, ce qui s'écrit:

$$K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\right) = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k u_{i,k} u_{j,k} = \left\langle \Phi\left(\mathbf{x}_i\right), \Phi\left(\mathbf{x}_j\right)\right\rangle_{\mathbb{R}^N} ,$$

avec

$$\Phi\left(\mathbf{x}_i\right) = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} u_{i,1} \\ \vdots \\ \sqrt{\lambda_N} u_{i,N} \end{pmatrix}$$

Théoreme de Mercer

Noyau de Mercer

Nous allons prouver le théoreme dans le cas suivant:

- $\mathcal{X}$ est un *espace métrique compact* (typiquement, un fermé borné dans $\mathbb{R}^d$)
- K un n.d.p. *continu* sur $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$ (par rapport a la tribu Borélienne)

Un tel noyau est appelé *noyau de Mercer*. La preuve repose sur la construction d'un opérateur linéaire compact et sa diagonalisation.

Rappel (au cas ou...)

Definition 4 *Soit $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert*

- *Un* opérateur linéaire *est une application linéaire continue de $\mathcal{H}$ dans lui-même.*
- *On dit qu'un opérateur linéaire L est* compact *si pour toute suite bornée $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$, la séquence $\{Lf_n\}_{n=1}^{\infty}$ possede une sous-séquence convergente*
- *L est dit* auto-adjoint *si pour tout $f, g \in \mathcal{H}$:*

$$\langle f, Lg \rangle = \langle Lf, g \rangle .$$

- *L est dit* positif *ssi il est auto-adjoint et pour tout $f \in \mathcal{H}$:*

$$\langle f, Lf \rangle \geq 0$$

Un lemme important

- Soit ν un mesure de Borel sur $\mathcal{X}$, $L_2^\nu(\mathcal{X})$ l'espace de Hilbert des fonctions de carré intégrable
- Pour toute fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$, soit la tranformation L_K définie par:

$$\forall f \in L_2^\nu(\mathcal{X}), (L_K f)(\mathbf{x}) = \int K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) f(\mathbf{t}) d\nu(\mathbf{t}).$$

Proposition 5 *Si K est un noyau de Mercer, alors L_K est un opérateur linéaire borné compact de $L_2^\nu(\mathcal{X})$, auto-adjoint et positif.*

Preuve

L_K est une application de $L_2^\nu(\mathcal{X})$ ans $L_2^\nu(\mathcal{X})$:

Pour tout $f \in L_2^\nu(\mathcal{X})$ et $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) \in \mathcal{X}^2$:

$$
\begin{aligned}
\left| L_K f(\mathbf{x}_1) - L_K f(\mathbf{x}_2) \right| &= \left| \int \left(K(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}) - K(\mathbf{x}_2, \mathbf{t})\right) f(\mathbf{t})\, d\nu(\mathbf{t}) \right| \\
&\leq \| K(\mathbf{x}_1, \cdot) - K(\mathbf{x}_2, \cdot) \| \| f \| \text{ (Cauchy-Sc} \\
&\leq \sqrt{\nu(\mathcal{X})} \max_{\mathbf{t} \in \mathcal{X}} \left| K(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}) - K(\mathbf{x}_2, \mathbf{t}) \right| \| f \|
\end{aligned}
$$

K étant continu et $\mathcal{X}$ compact, K est uniformément continue,

donc $L_K f$ est continue. En particulier, $L_K f \in L_2^\nu(\mathcal{X})$. $\square$

Preuve

L_K est linéaire et continue
La linéarité est triviale.
D'autre part, on a $\forall f \in L_2^{\nu}(\mathcal{X})$ et $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}$:

$$\begin{aligned} |(L_K f)(\mathbf{x})| &= \left| \int K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) f(\mathbf{t}) d\nu(\mathbf{t}) \right| \\ &\leq \sqrt{\nu(\mathcal{X})} C_K \| f \|. \end{aligned}$$

avec $C_K = \max_{\mathbf{t} \in \mathcal{X}} | K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) |$. Donc:

$$\| L_K f \| = \left(\int L_K f(\mathbf{t})^2 d\nu(\mathbf{t}) \right)^{\frac{1}{2}} \leq \nu(\mathcal{X}) C_K \| f \|. \quad \square$$

Rappel: théoreme d'Ascoli

Soit $C(\mathcal{X})$ l'ensemble des fonctions continues sur $\mathcal{X}$, muni de la norme infinie $\| f \|_\infty = max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} | f(\mathbf{x}) |$.
Un ensemble de fonctions $G \subset C(\mathcal{X})$ est dit *equicontinu* ssi:

$$\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0, \forall (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{X}^2,$$
$$\| \mathbf{x} - \mathbf{y} \| < \delta \implies \forall g \in G, | g(\mathbf{x}) - g(\mathbf{y}) | < \epsilon.$$

Theoreme 6 *(Ascoli) Une partie $H \subset C(\mathcal{X})$ est* relativement compacte *(i.e., son adhérence est compacte) ssi elle est* uniformément bornée *et* équicontinue*.*

Preuve

L_K est compact:
Soit $(f_n)_{n\geq 0}$ une séquence bornée de $L_2^\nu(\mathcal{X})$ ($\| f_n \| < M$ pour tout n).
La suite $(f_n)_{n\geq 0}$ est une suite de fonctions continues, uniformément bornée car:

$$\| L_K f \|_\infty \leq \sqrt{\nu(\mathcal{X})} C_K \| f \| \leq \sqrt{\nu(\mathcal{X})} C_K M.$$

Elle est d'autre part equicontinue, car

$$| L_K f_n(\mathbf{x}_1) - L_K f_n(\mathbf{x}_2) | \leq \sqrt{\nu(\mathcal{X})} \max_{\mathbf{t}\in\mathcal{X}} | K(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}) - K(\mathbf{x}_2, \mathbf{t}) | M$$

Par le théoreme d'Ascoli, on peut extraire une sous-suite uniformément convergente dans $C(\mathcal{X})$, et donc dans $L_2^\nu(\mathcal{X})$. $\square$

Preuve

L_K est auto-adjoint: K étant symétrique, alors on a pour tout $f, g \in \mathcal{H}$:

$$\begin{aligned}
\langle f, Lg \rangle &= \int f(\mathbf{x}) (Lg)(\mathbf{x}) \nu(d\mathbf{x}) \\
&= \int \int f(\mathbf{x}) g(\mathbf{t}) K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \nu(d\mathbf{x}) \nu(d\mathbf{t}) \quad \text{(Fubini)} \\
&= \langle Lf, g \rangle .
\end{aligned}$$

Preuve

L_K est positif: On approxime l'intégrale par des sommes finies:

$$\begin{aligned} \langle f, Lf \rangle &= \int \int f(\mathbf{x}) f(\mathbf{t}) K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \nu(d\mathbf{x}) \nu(d\mathbf{t}) \\ &= \lim_{k \to \infty} \frac{\nu(\mathcal{X})}{k^2} \sum_{i,j=1}^{k} K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) f(\mathbf{x}_i) f(\mathbf{x}_j) \\ &\geq 0, \end{aligned}$$

car K est d.p. $\square$

Preuve

On peut maintenant appliquer le *théoreme spectral* suivant a L_K:

Theoreme 7 *Soit L un opérateur linéaire compact sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Alors il existe dans $\mathcal{H}$ un systeme orthonormal complet $(\psi_1, \psi_2, \ldots)$ de vecteurs propres de L. Les valeurs propres $(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$ sont réelles si L est auto-adjoint, et positives si L est positif.*

Dans le cas de L_K, les vecteurs propres ϕ_k associés aux valeurs propres $\lambda_k \neq 0$ sont des fonctions continues car:

$$\psi_k = \frac{1}{\lambda_k} L \psi_K$$

Preuve

On peut maintenant énoncer le *théoreme de Mercer*:

Theoreme 8 *Soit $\mathcal{X}$ un espace normé compact, ν une mesure Borélienne sur $\mathcal{X}$ est K un noyau de Mercer. Soit $(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$ les valeurs propres décroissantes de L_K, et $(\psi_1, \psi_2, \ldots)$ les vecteurs propres correspondants. Alors, on a pour tous $\mathbf{x}, \mathbf{t} \in \mathcal{X}$:*

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \phi_k(\mathbf{x}) \phi_k(\mathbf{t}),$$

ou la convergence est absolue pour chaque $\mathbf{x}, \mathbf{t} \in \mathcal{X}$, et uniforme sur $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$.

Preuve

Du théoreme de Mercer on déduit le résultat suivant:

Theoreme 9 *L'application*

$$\Phi : \mathcal{X} \mapsto l^2$$
$$\mathbf{x} \mapsto \left(\sqrt{\lambda_k \psi_k(\mathbf{x})}\right)_{k \in \mathbb{N}}$$

est bien définie, continue, et satisfait:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \langle \Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{t}) \rangle_{l^2} .$$

Preuve

Preuve du Thépreme 9:
Par le théoreme de Mercer on voit que pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$,
$\sum \lambda_k \psi_k^2(\mathbf{x})$ converge vers $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}) < \infty$, et donc $\Phi(\mathbf{x}) \in l^2$.
La continuité de Φ découle de:

$$|\,\Phi(\mathbf{x}) - \Phi(\mathbf{t})\,| = K(\mathbf{x}, \mathbf{x}) + K(\mathbf{t}, \mathbf{t}) - 2K(\mathbf{x}, \mathbf{t})$$

Bilan

Nous avons donc démontré qu'un noyau défini positif peut s'écrire comme un produit scalaire dans un espace de Hilbert si:

- $\mathcal{X}$ est fini, ou
- $\mathcal{X}$ est un espace métrique compact et K est continu.

Pour démontrer le résultat dans le cas général, nous introduisons une nouvelle construction explicite d'un espace de Hilbert, non basée sur la diagonalisation d'un opérateur: le r.k.h.s.

Espace de Hilbert a noyau reproduisant (e.h.n.r.)

Définitions

Soit $\mathcal{X}$ un espace quelconque, et $(\mathcal{H}, \langle ., . \rangle_{\mathcal{H}})$ un espace de Hilbert de fonctions ($\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^{\mathcal{X}}$).

Definition 10 *Une fonction $K : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$ est appelée un* noyau reproduisant (noté n.r.) *ssi:*

- *$\mathcal{H}$ contient toutes les fonctions de la forme*

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}, \quad K_{\mathbf{x}} : \mathbf{t} \mapsto K(\mathbf{x}, \mathbf{t})$$

- *Pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ et $f \in \mathcal{H}$, on a:*

$$f(\mathbf{x}) = \langle f, K_{\mathbf{x}} \rangle_{\mathcal{H}}$$

Si un n.r. existe, $\mathcal{H}$ est appelé un espace de Hilbert a noyau reproduisant (e.h.n.r.).

Propriétés des n.r. et e.h.n.r.

Theoreme 11 *(Aronszajn, 1950)*

- *Si un n.r. existe, il est unique.*
- *Un n.r. existe si et seulement si* $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}$*, la fonctionnelle* $f \mapsto f(\mathbf{x})$ *(de* $\mathcal{H}$ *dans* $\mathbb{R}$*) est continue.*
- *Un n.r. est un noyau d.p.*
- *Réciproquement, si* K *est d.p., alors il existe un e.h.n.r. ayant* K *pour n.r.*
- *Si* K *est un n.r., il vérifie la propriété reproduisante:*

$$\forall (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{X}^2, \quad \langle K_{\mathbf{x}}, K_{\mathbf{y}} \rangle_{\mathcal{H}} = K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \,.$$

Remarques

- Soit K un noyau d.p. sur un espace $\mathcal{X}$ quelconque. Par le point 4, on peut lui associer un e.h.n.r. $\mathcal{H}$. Soit $\Phi : \mathcal{X} \mapsto \mathcal{H}$ défini par $\Phi(\mathbf{x}) = K_{\mathbf{x}}$. Par le point 5, on a:

$$\forall (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{X}^2, \quad K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{y}) \rangle_{\mathcal{H}}$$

  ce qui prouve le Théoreme 2 dans le cas général.
- L'e.h.n.r. a de nombreuses autres propriétés que nous utiliserons par la suite pour développer des algorithmes puissants.

Preuve: unicité

Si K et K' sont deux n.r. sur $\mathcal{H}$, alors on a pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$:

$$\begin{aligned}
\| K_{\mathbf{x}} - K'_{\mathbf{x}} \|_{\mathcal{H}}^2 &= \left\langle K_{\mathbf{x}} - K'_{\mathbf{x}}, K_{\mathbf{x}} - K'_{\mathbf{x}} \right\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \left\langle K_{\mathbf{x}} - K'_{\mathbf{x}}, K_{\mathbf{x}} \right\rangle_{\mathcal{H}} - \left\langle K_{\mathbf{x}} - K'_{\mathbf{x}}, K'_{\mathbf{x}} \right\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= K_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) - K'_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) - K_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) + K'_{\mathbf{x}}(\mathbf{x}) \\
&= 0
\end{aligned}$$

donc $K = K'$ (dans $\mathcal{H}$ et donc partout). $\square$

Preuve: continuité

Si un n.r. K existe, alors on a pour tout $(\mathbf{x}, f) \in \mathcal{X} \times \mathcal{H}$:

$$
\begin{aligned}
|\, f(\mathbf{x}) \,| &= |\, \langle f, K_{\mathbf{x}} \rangle_{\mathcal{H}} \,| \\
&\leq \|\, f \,\|_{\mathcal{H}} . \|\, K_{\mathbf{x}} \,\|_{\mathcal{H}} \text{ (Cauchy-Schwarz)} \\
&\leq \|\, f \,\|_{\mathcal{H}} . K(\mathbf{x}, \mathbf{x})^{\frac{1}{2}} \,,
\end{aligned}
$$

car $\|\, K_{\mathbf{x}} \,\|_{\mathcal{H}}^2 = \langle K_{\mathbf{x}}, K_{\mathbf{x}} \rangle_{\mathcal{H}} = K(\mathbf{x}, \mathbf{x})$. Donc $f \in \mathcal{H} \mapsto f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ est une application linéaire *continue*. $\square$

Preuve: continuité (réciproque)

Réciproquement, supposons que pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, la forme linéaire $f \in \mathcal{H} \mapsto f(\mathbf{x})$ soit continue.
Par le théoreme de représentation de Riesz, il existe un unique $g_{\mathbf{x}} \in \mathcal{H}$ tel que:

$$f(\mathbf{x}) = \langle f, g_{\mathbf{x}} \rangle_{\mathcal{H}}$$

La fonction $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = g_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})$ est alors un n.r. pour $\mathcal{H}$. $\square$

Preuve: un n.r. est d.p.

Un n.r. est *symétrique* car, pour tout $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathcal{X}^2$:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle K_{\mathbf{x}}, K_{\mathbf{y}} \rangle_{\mathcal{H}} = \langle K_{\mathbf{y}}, K_{\mathbf{x}} \rangle_{\mathcal{H}} = K(\mathbf{y}, \mathbf{x}) .$$

Il est *d.p.* car pour tout $N \in \mathbb{N}$,$(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_N) \in \mathcal{X}^N$, et $(a_1, a_2, \ldots, a_N) \in \mathbb{R}^N$:

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j=1}^{N} a_i a_j K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &= \sum_{i,j=1}^{N} a_i a_j \left\langle K_{\mathbf{x}_i}, K_{\mathbf{x}_j} \right\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \| \sum_{i=1}^{N} a_i K_{\mathbf{x}_i} \|_{\mathcal{H}}^2 \\
&\geq 0. \quad \square
\end{aligned}$$

Preuve: un n.d.p. est un n.r.

Soit K un noyau d.p. Nous allons construire *explicitement* un espace de Hilbert de fonctions définies sur $\mathcal{X}$ qui admette K pour n.r.

Soit $\mathcal{H}_0$ le sous-espace vectoriel de $\mathbb{R}^{\mathcal{X}}$ engendré par les fonctions $\{K_{\mathbf{x}}\}_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}}$. Pour $f, g \in \mathcal{H}_0$ s'écrivant:

$$f = \sum_{i=1}^{m} a_i K_{\mathbf{x}_i}, \quad g = \sum_{j=1}^{n} b_j K_{\mathbf{y}_i},$$

définissons:

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_0} := \sum_{i,j} a_i b_j K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_j\right).$$

Preuve: un n.d.p. est un n.r.(cont.)

Cette fonction *ne dépend pas* de la décomposition de f ou g, car:

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_0} = \sum_{i=1}^{m} a_i g\left(\mathbf{x}_i\right) = \sum_{j=1}^{n} b_j f\left(\mathbf{y}_j\right).$$

Cela montre aussi que c'est une *forme bilinéaire symétrique*.
K étant d.p., on a d'autre part:

$$\| f \|_{\mathcal{H}_0}^2 = \sum_{i,j=1}^{m} a_i a_j K\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\right) \geq 0.$$

Preuve: un n.d.p. est un n.r.(cont.)

Cela montre aussi que pour tout $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ et $f \in \mathcal{H}_0$:

$$\langle f, K_{\mathbf{x}} \rangle_{\mathcal{H}_0} = f\left(\mathbf{x}\right).$$

On en déduit la propriété de *reproductibilité*:

$$\forall \left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right) \in \mathcal{X}^2, \quad \langle K_{\mathbf{x}}, K_{\mathbf{y}} \rangle_{\mathcal{H}_0} = K\left(\mathbf{x}, \mathbf{y}\right)$$

D'autre part, par Cauchy-Schwarz, on a $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{X}$:

$$\mid f\left(\mathbf{x}\right) \mid = \left| \langle f, K_{\mathbf{x}} \rangle_{\mathcal{H}_0} \right| \leq \parallel f \parallel_{\mathcal{H}_0} . K\left(\mathbf{x}, \mathbf{x}\right)^{\frac{1}{2}},$$

donc $\parallel f \parallel_{\mathcal{H}_0} = 0 \Leftrightarrow f = 0$.

Preuve: un n.d.p. et un n.r.(cont.)

$\langle .,. \rangle_{\mathcal{H}_0}$ est donc un *produit scalaire*, et $(\mathcal{H}_0, \langle .,. \rangle_{\mathcal{H}_0})$ un *espace pré-Hilbertien*.
Soit $\mathcal{H}$ l'espace de Hilbert obtenu en *complétant* $\mathcal{H}_0$ par les limites des suites de Cauchy (dans $\mathcal{H}_0$). Si $(f_n)_{n\geq 0}$ est une telle suite de Cauchy, alors:

$$\forall (\mathbf{x}, m, n) \in \mathcal{X} \times \mathbb{N}^2, \quad | f_m(\mathbf{x}) - f_n(\mathbf{x}) | \leq \| f_m - g_n \|_{\mathcal{H}_0} . K(\mathbf{x}, \mathbf{x})^{\frac{1}{2}} .$$

donc en tout point $\mathbf{x}$ la suite $(f_n(\mathbf{x}))_{n\geq 0}$ est une suite de Cauchy dont on appelle la limite $f(\mathbf{x})$ dans $\mathbb{R}$. En rajoutant ces fonctions f dans $\mathcal{H}_0$ et en étendant le produit scalaire par passage a la limite, on obtient un *espace de Hilbert* $\mathcal{H}$ de fonctions de $\mathcal{X}$ dans $\mathbb{R}$, qui admet K pour n.r. $\square$

Example: e.h.n.r. du noyau linéaire

Soit $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ et $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\mathbb{R}^d}$ le noyau linéaire.
L'e.h.n.r. associé est constitué des fonctions de la forme:

$$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \mapsto f(\mathbf{x}) = \sum_i a_i \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{x} \rangle_{\mathbb{R}^d} = \langle \mathbf{w}, \mathbf{x} \rangle_{\mathbb{R}^d}$$

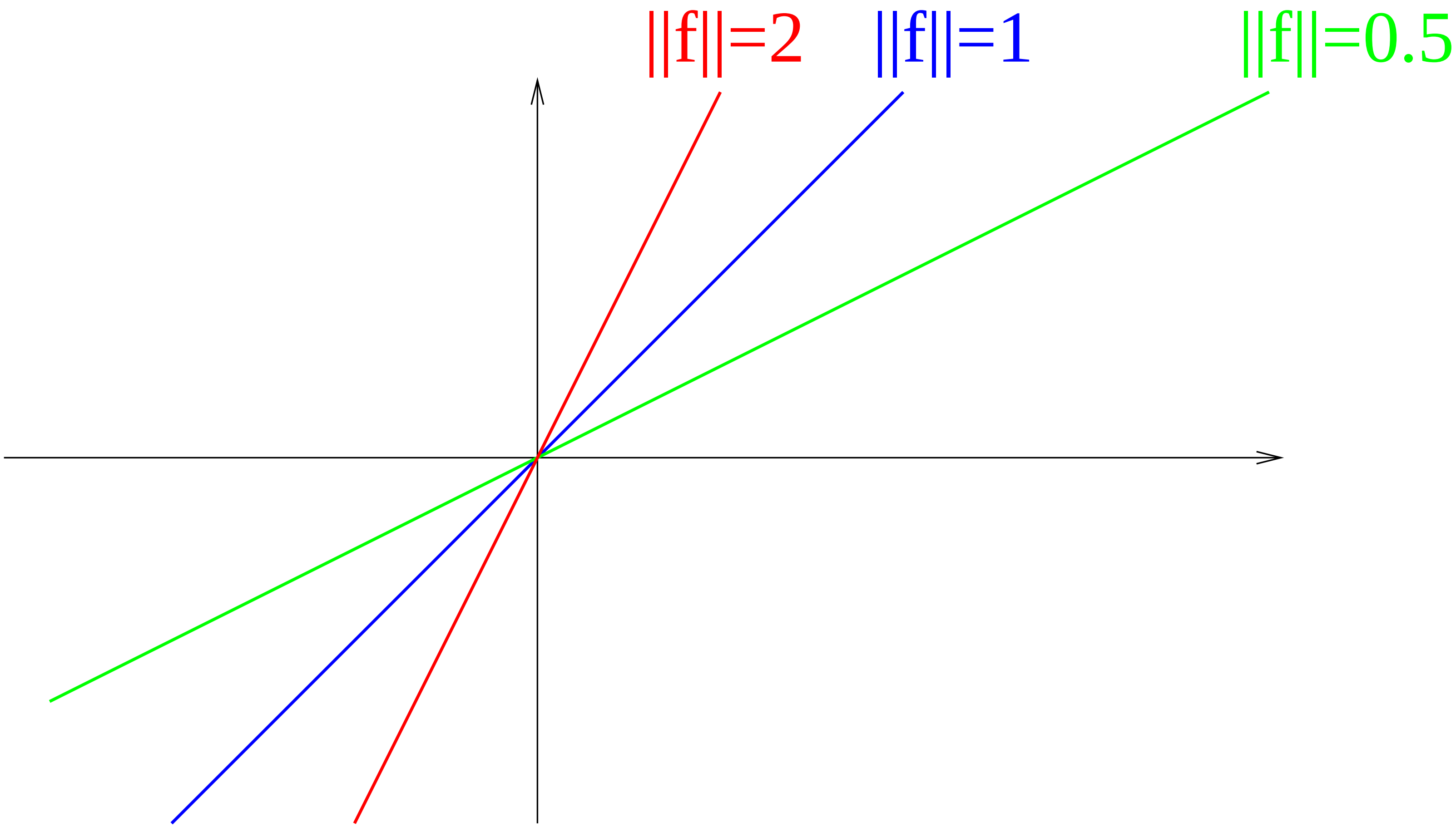
avec $\mathbf{w} = \sum_i a_i \mathbf{x}_i$. L'e.h.n.r. est donc l'ensemble des formes linéaires, muni du produit scalaire:

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_K} = \langle \mathbf{w}, \mathbf{v} \rangle_{\mathbb{R}^d}$$

avec $f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}.\mathbf{x}$ et $g(\mathbf{x}) = \mathbf{v}.\mathbf{x}$.

Example (cont.)

En particulier, $\| f \|_{\mathcal{H}_K} = \| \mathbf{w} \|_{\mathbb{R}^d}$, la pente de la forme linéraire.



Noyaux de Mercer et e.h.n.r.

Motivations

- Soit $\mathcal{X}$ un expace métrique compact, et K un noyau de Mercer (symétrique, d.p. et continu) sur $\mathcal{X}$.
- Dans cette partie nous faisons le lien entre l'e.h.n.r. associé et la décomposition du noyau fourni par le théoreme de Mercer.

Rappel: Théoreme de Mercer

Soit L_K l'opérateur linéaire sur $L_2^\nu(\mathcal{X})$ défini par:

$$\forall f \in L_2^\nu(\mathcal{X}), (L_K f)(\mathbf{x}) = \int K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) f(\mathbf{t}) d\nu(\mathbf{t}).$$

Soient $(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$ les valeurs propres décroissantes de L_K, et $(\psi_1, \psi_2, \ldots)$ les vecteurs propres correspondants. Alors on a pour tous $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{X}$:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \psi_k(\mathbf{x}) \psi_k(\mathbf{y}) = \langle \Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{y}) \rangle_{l^2},$$

avec $\Phi : \mathcal{X} \mapsto l^2$ défini par $\Phi(\mathbf{x}) = \left(\sqrt{\lambda_k}\psi_k(\mathbf{x})\right)_{k \in \mathbb{N}}$.

Construction de l'e.h.n.r.

Nous supposons que $\lambda_k > 0$ pour tout $k \geq 1$ (sinon, le résultat et la preuve restent valide dans le sous-espace engendrés par les vecteurs propres de valeur propres non nulles).

Soit l'espace de Hilbert:

$$H_K = \left\{ f \in L_2^\nu(\mathcal{X}) : f = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i, \quad \text{avec} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a_k^2}{\lambda_k} < \infty \right\}$$

muni du produit scalaire:

$$\langle f, g \rangle_K = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{a_k b_k}{\lambda_k}, \quad \text{pour } f = \sum_k a_k \psi_k, g = \sum_k b_k \psi_k.$$

Construction de l'e.h.n.r. (cont.)

Pour montrer que H_K est l'e.h.n.r. associé au noyau K, nous devons montrer que:

- c'est un *espace de fonctions* de $\mathcal{X}$ dans $\mathbb{R}$,
- pour chaque $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, $K_x \in H_K$,
- pour chaque $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ et $f \in H_K$, $f(\mathbf{x}) = \langle f, K_x \rangle_{H_K}$.

Construction de l'e.h.n.r. (cont.)

Si $f = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i \in H_K$ et $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, on a:

$$
\begin{aligned}
| f(\mathbf{x}) | &= \left| \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i(\mathbf{x}) \right| = \left| \sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_i}{\sqrt{\lambda_i}} \sqrt{\lambda_i} \psi_i(\mathbf{x}) \right| \\
&\leq \left(\sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_i^2}{\lambda_i} \right)^{\frac{1}{2}} . \left(\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i(\mathbf{x})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \| f \|_{H_K} . K(\mathbf{x}, \mathbf{x})^{\frac{1}{2}} .
\end{aligned}
$$

donc la convergence dans $\| . \|_{H_K}$ implique la convergence ponctuelle.

Construction de l'e.h.n.r. (cont.)

On en déduite que toute fonction $f = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i \in H_K$ est bien une fonction définie ponctuellement, et continue (comme les ψ_i).
Soit maintenant $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$. Pour montrer que $K_x \in H_K$, soit $a_i = \lambda_i \psi_i (\mathbf{x})$. On a bien:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_i^2}{\lambda_i} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i (\mathbf{x})^2 = K (\mathbf{x}, \mathbf{x}) < \infty,$$

donc $\phi_x := \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i \in H_K$.

Construction de l'e.h.n.r. (cont.)

Par le précédent résultat, cette convergence dans H_K a aussi lieu ponctuellement, donc pour tout $\mathbf{t} \in \mathcal{X}$:

$$\phi_x(\mathbf{t}) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i \psi_i(\mathbf{t}) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{t}) = K(\mathbf{x}, \mathbf{t}),$$

donc $\phi_x = K_x \in H_K$.
Finalement, pour $g = \sum_{i=1}^{\infty} b_i \psi_i \in H_K$, on a:

$$\langle g, K_x \rangle_{H_K} = \langle g, \phi_x \rangle_{H_K} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\lambda_i \psi_i(\mathbf{x}) b_i}{\lambda_i} = f(\mathbf{x}),$$

ce qui termine la preuve. $\square$

Remarques

- Bien que H_K ait été construit a partir des fonctions propres de L_K, lui-meme défini a partir de la mesure $\nu(\mathbf{x})$, ce résultat montre que *H_K est indépendant de ν et L_K*.
- Le théoreme de Mercer fournit une *maniere concrete* de construire un e.h.n.r., en prenant des combinaisons linéaires des fonctions propres de L_K (et la condition sur les coefficients).
- Les $(\psi_i)_{i\in\mathbb{N}}$ forment une *base orthogonale* de l'e.h.n.r.:

$$\langle \psi_i, \psi_j \rangle_{H_K} = 0 \quad \text{si } i \neq j, \quad \| \psi_i \|_{H_K} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}.$$

E.h.n.r. et régularisation par fonctions de Green

Motivation

- A tout noyau d.p. est associé un espace de Hilbert fonctionnel: l'e.h.n.r.
- Dans le cas $\mathcal{X}$ compact, le théoreme de Mercer fournit une premiere intuition sur cet espace.
- Quid de cas plus généraux, par exemple $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$?
- Nous allons montrer que dans le cas des noyaux invariants par translation, on peut interpréter $\| f \|_{\mathcal{H}}$ comme une *mesure de la régularité* de f.

Exemple

Soit

$\mathcal{H} = \{f : [0,1] \mapsto \mathbb{R},$ cont., dérivable p.p., $f' \in L^2([0,1]), f(0) =$

C'est un *espace de Hilbert* quand on le muni du produit scalaire:

$$\forall (f,g) \in \mathcal{F}^2 \langle f,g \rangle_{\mathcal{H}} = \int_0^1 f'(u) g'(u) du.$$

La norme $\| f \|_{\mathcal{H}}$ mesure la régularité de f:

$$\| f \|_{\mathcal{H}} = \left(\int_0^1 f'(u)^2 du \right) = \| f' \|_{L^2([0,1])}.$$

Exemple (cont.)

Theoreme 12 $\mathcal{H}$ est un e.h.n.r. *ayant pour n.r. la fonction:*

$$\forall (x, y) \in \mathcal{X}^2, \quad K(x, y) = \min(x, y).$$

Comme $\| f \|_{\mathcal{H}} = \| f' \|_{L^2}$, cela montre que la norme dans l'e.h.n.r. est justement cette fonctionnelle de régularité.

Exemple (cont.)

Pour prouver ce théoreme, nous allons montrer que:

- Les fonctionnelles d'évaluation sont continues,
- $\forall x \in [0,1]$, $K_x \in \mathcal{F}$,
- $\forall (x,f) \in [0,1] \times \mathcal{H}, \langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} = f(x)$.

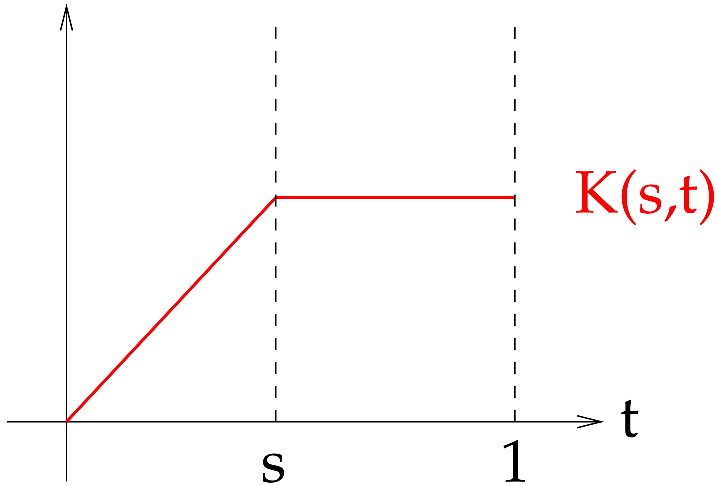
La premiere propriété découle de:

$$f(x) = f(x) - f(0) = \int_0^t f'(u)du \leq \sqrt{t} \| f \|_{\mathcal{H}},$$

valable pour tout $x \in [0,1]$ et $f \in \mathcal{H}$.

Exemple (cont.)

Pour la seconde propriété, soit $K_x(y) = K(x, y) = \min(x, y)$ sur $[0, 1]^2$.



K_x est dérivable sauf en s, a une dérivée de carré intégrable, et $K_x(0) = 0$, donc $K_x \in \mathcal{H}$ pour tout $x \in [0, 1]$.

Exemple (cont.)

Enfin, pour la troisieme propriété, observons que l'égalité suivante est valable pour tout $x \in [0,1]$ et $f \in \mathcal{H}$:

$$\langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} = \int_0^1 f'(u) K_x'(u) du = \int_0^x f'(u) du = f(x),$$

ce qui montre que K est le n.r. associé a $\mathcal{H}$. $\square$

Généralisation

Soit $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ et D un opérateur différentiel sur une classe de fonctions $\mathcal{H}$ telle que munie du produit scalaire:

$$\forall (f,g) \in \mathcal{H}^2, \quad \langle f, g \rangle_{\mathcal{H}} = \langle Df, Dg \rangle_{L^2(\mathcal{X})},$$

ce soit un espace de Hilbert.

Theoreme 13 *$\mathcal{H}$ est un e.h.n.r. dont le n.r. est la fonction de Green de l'opérateur D^*D, ou D^* est l'adjoint de D.*

Rappel: fonction de Green

Soit l'équation différentielle sur $\mathcal{H}$:

$$f = Dg,$$

ou g est l'inconnu. Pour la résoudre, on peut chercher g de la forme:

$$g(x) = \int_{\mathcal{X}} k(x, y) f(y) \, dy$$

pour une certaine fonction $k : \mathcal{X}^2 \mapsto \mathbb{R}$. k doit vérifier, pour tout $x \in \mathcal{X}$,

$$f(x) = Dg(x) = \langle Dk_x, f \rangle_{L^2(\mathcal{X})}$$

k est appelée *fonction de Green* de l'opérateur D.

Preuve du Théoreme 13

Soit donc $\mathcal{H}$ un espace de Hilbert muni du produit scalaire:

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{X}} = \langle Df, Dg \rangle_{L^2(\mathcal{X})} ,$$

et K la fonction de Green de l'opérateur D^*D.
Pour tout $x \in \mathcal{X}$, $K_x \in \mathcal{H}$ car:

$$\langle DK_x, DK_x \rangle_{L^2(\mathcal{X})} = \langle D^*DK_x, K_x \rangle_{L^2(\mathcal{X})} = K_x(x) < \infty .$$

D'autre part, pour tout $f \in \mathcal{H}$ et $x \in \mathcal{X}$, on a:

$$f(x) = \langle D^*DK_x, f \rangle_{L^2(\mathcal{X})} = \langle DK_x, Df \rangle_{L^2(\mathcal{X})} = \langle K_x, f \rangle_{\mathcal{H}}$$

ce qui montre $\mathcal{H}$ est un e.h.n.r. dont le n.r. est K. $\square$

Noyaux et régularisation par transformée de Fourier

Mercer sur domaines non borné

Supposons $\mathcal{X}$ non compact, par exemple $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$. Dans ce cas, les valeurs propres de l'équation:

$$\int_{\mathcal{X}} K(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \psi(\mathbf{t}) = \lambda \psi(\mathbf{t})$$

ne sont pas nécessairement dénombrables, le théoreme de Mercer n'est pas valable.

Rappel: transformée de Fourier

Definition 14 *Soit $f \in L^1\left(\mathbb{R}^d\right)$.*

- *On appelle* transformée de Fourier *de f, et note $\hat{f}$ ou $\mathcal{F}f$, la fonction définie pour tout $\omega \in \mathbb{R}^d$ par:*

$$\hat{f}\left(\omega\right) = \int_{\mathbb{R}^d} e^{-ix.\omega} f\left(x\right) dx.$$

- *$\hat{f}$ est a valeur complexe, continue, tend vers 0 a l'infini et $\parallel \hat{f} \parallel_{L^\infty} \leq \parallel f \parallel_{L^1}$.*
- *Si en plus $\hat{f} \in L^1\left(\mathbb{R}^d\right)$, alors on a la formule d'*inversion de Fourier*:*

$$\forall x \in \mathbb{R}^d, \quad f\left(x\right) = \frac{1}{\left(2\pi\right)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{ix.\omega} \hat{f}\left(\omega\right) d\omega.$$

Rappel: formule de Parseval

Theoreme 15 *Si $f \in L^1\left(\mathbb{R}^d\right)$ est en plus de carré sommable, alors la* formule de Parseval *est valide:*

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\, f(x) \,|^2 \, dx = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \left|\, \hat{f}(\omega) \,\right|^2 d\omega$$

Noyaux invariants par translation (i.t.)

Definition 16 *Un noyau* $K : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}$ *est dit* invariant par translation *s'il ne dépend que de la différence entre ses arguments, i.e.:*

$$\forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d}, \quad K(x, y) = K(x - y).$$

La plupart des noyaux sur $\mathbb{R}^d$ que nous rencontrerons sont i.t.

Mercer pour noyaux i.t.?

Soit K un noyau i.t. sommable. On a alors, pour tout $(x, y) \in \mathbb{R}^{2d}$:

$$K(x-y) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i(x-y).\omega} \hat{K}(\omega)\, d\omega$$
$$= \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\hat{K}(\omega)}{(2\pi)^d} e^{i\omega(x)} e^{i\omega(-y)} d\omega.$$

Cela ressemble a la décomposition d'un noyau de Mercer sur un domaine compact:

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_i \lambda_i \psi_i(\mathbf{x}) \psi_i(\mathbf{y})$$

E.h.n.r. pour noyaux i.t.

Theoreme 17 *Soit K un noyau d.p., i.t., sommable et de transformée de Fourier $\hat{K}$ sommable sur $\mathbb{R}^d$. Le sous-espace $\mathcal{H}_K$ de $L_2\left(\mathbb{R}^d\right)$ des fonctions f continues telles que:*

$$\| f \|_K := \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\left| \hat{f}(\omega) \right|}{\hat{K}(\omega)} d\omega < +\infty,$$

muni du produit scalaire:

$$\langle f, g \rangle := \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\hat{f}(\omega)\hat{g}\,(\omega)^*}{\hat{K}(\omega)} d\omega$$

est un e.h.n.r. avec K pour n.r.

Preuve du Théoreme 17

Pour $x \in \mathbb{R}^d$, $K_x(y) = K(x-y)$ donc:

$$\hat{K}_x(\omega) = \int e^{-i\omega.u} K(u-x)du = e^{-i\omega.x}\hat{K}(\omega).$$

On en déduit que $K_x \in \mathcal{H}$, car:

$$\int_{\mathbb{R}^d} \frac{\left|\hat{K}_x(\omega)\right|^2}{\hat{K}(\omega)} \leq \int_{\mathbb{R}^d} \left|\hat{K}(\omega)\right| < \infty,$$

De plus, si $f \in \mathcal{H}$ et $x \in \mathbb{R}^d$, on a:

$$\langle f, K_x \rangle_{\mathcal{H}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\hat{K}_x(\omega)\hat{f}(\omega)^*}{\hat{K}(\omega)} d\omega = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{f}(\omega)^* e^{-i\omega.x} = f($$

Application: Théoreme de Bochner

Theoreme 18 *Une fonction* $K(x-y)$ *sur* $\mathbb{R}^d$ *est définie positive si et seulement si elle est la transformée de Fourier d'une fonction* $\hat{K}(\omega)$ symétrique, positive, et tendant vers 0 a l'infini.

Exemple: noyau Gaussien

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

correspond a:

$$\hat{K}\left(\omega\right)=e^{-\frac{\sigma^2\omega^2}{2}}$$

et

$$\mathcal{H}=\left\{f:\int\left|\hat{f}(\omega)\right|^2 e^{\frac{\sigma^2\omega^2}{2}}d\omega<\infty\right\},$$

l'ensemble des fonctions infiniment différentiables dont toutes les dérivées sont L^2.

Exemple: noyau de Laplace

$$K\left(x,y\right)=\frac{1}{2}e^{-\gamma\left|\,x-y\,\right|}$$

correspond a:

$$\hat{K}\left(\omega\right)=\frac{\gamma}{\gamma^2+\omega^2}$$

et

$$\mathcal{H}=\left\{f:\int\left|\,\hat{f}(\omega)\right|^2\frac{\left(\gamma^2+\omega^2\right)}{\gamma}d\omega<\infty\right\},$$

l'ensemble des fonctions L^2 differentiables dont la dérivée est L^2 (Sobolev).

Exemple: noyau passe-bande

$$K(x,y) = \frac{\sin\left(\Omega(x-y)\right)}{\pi(x-y)}$$

correspond a:

$$\hat{K}(\omega) = U(\omega+\Omega) - U(\omega-\Omega)$$

et

$$\mathcal{H} = \left\{ f : \int_{|\omega|>\Omega} \left| \hat{f}(\omega) \right|^2 d\omega = 0 \right\},$$

l'ensemble des fonctions dont le spectre est inclus dans $[-\Omega, \Omega]$.