

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

ANÁLISIS ESPECTRAL DE PROCESOS GAUSSIANOS

MÁSTER UNIVERSITARIO EN INVESTIGACIÓN E
INNOVACIÓN EN INTELIGENCIA COMPUTACIONAL Y
SISTEMAS INTERACTIVOS

Autor: Muñoz Perera, Adrián
Tutor: Suárez González, Alberto
Departamento de Ingeniería Informática

Junio, 2020

Glosario

ADF Análisis de Datos Funcionales. 7

BO Base Ortonormal. 6, 7, 9, 20, 25, 72

MB Movimiento Browniano. 18, 24–26, 33–35, 38, 42, 43, 53, 61, 68, 69, 72

PB Puente Browniano. 18, 34–36, 43, 47, 53, 61, 68, 69, 72

PCA Análisis de Componentes Principales. 18

PG Proceso Gaussiano. 5–7, 9, 10, 12–14, 18, 19, 21, 24, 34, 44, 53, 60, 63, 68, 69, 72

RBF Función de Bases Radiales. 53–55, 60, 61, 66, 68, 69

RKHS Espacio de Hilbert con Núcleo Reprodutor. 5, 7–10, 13, 16, 18, 19, 21–24, 30–34, 42, 43, 51, 52, 57–59, 64–67, 69

Índice

1. Resumen	3
2. Abstract	4
3. Introducción	5
3.1. Procesos Gaussianos	5
3.2. Espacios de Hilbert con Núcleo Reprodutor	7
3.3. Espacios de Sobolev	10
4. Experimentos	13
4.1. Planteamiento	13
4.1.1. Regularización mediante monitorización discreta en el dominio (<i>domain sampling</i>)	14
4.1.2. Regularización de trayectorias de Procesos Gaussianos	18
4.1.3. Descripción de los experimentos	19
4.2. Movimiento Browniano	24
4.3. Puente Browniano	34
4.4. Núcleo Exponencial	44
4.5. Función de Bases Radiales	53
4.6. Matérn	60
5. Conclusión	69
Appendices	72
A. Expresión de los coeficientes de interpolantes lineales a trozos en las bases de autofunciones del Movimiento Browniano y Puente Browniano	72

1. Resumen

En este trabajo se presenta un análisis computacional de las propiedades de la representación espectral de las trayectorias de un proceso Gaussiano. Estos procesos Gaussianos definidos en un compacto se caracterizan por una función de covarianzas (o núcleo) continua. En el caso general, la dimensión del espacio de Hilbert con núcleo reproductor (RKHS) asociado es infinita. Las muestras de tal proceso, a pesar de ser trayectorias continuas y de cuadrado integrable (es decir, están en L^2), no pertenecen a dicho RKHS con probabilidad 1.

En particular, se estudia la evolución de la representación espectral de aproximaciones de las trayectorias de dichos procesos monitorizadas en tiempo discreto. Dichas aproximaciones se pueden analizar como interpolantes que pertenecen a un espacio funcional de dimensión finita. Dicho espacio está contenido en el RKHS infinito-dimensional correspondiente. Por esta razón, la monitorización discreta se puede entender como una aproximación regularizada de las trayectorias originales. Dado que el RKHS en cuestión es denso en L^2 , en el límite de monitorización continua (es decir, cuando los instantes en los que el proceso es monitorizado forman un subconjunto denso del dominio de la función), las trayectorias regularizadas se aproximan con precisión arbitraria a las originales del proceso.

El análisis realizado incluye procesos Gaussianos con distintos núcleos, tanto no estacionarios (Browniano, puente Browniano) como estacionarios (Exponencial, Matérn, RBF). En dicho análisis se observa como la regularidad del núcleo afecta profundamente a la estructura de los coeficientes de la representación espectral de dichas trayectorias. Los resultados obtenidos proporcionan una perspectiva novedosa de la convergencia de la representación por interpolantes para trayectorias de procesos Gaussianos.

2. Abstract

In this report a computational analysis of properties of spectral representation of trajectories of Gaussian processes is addressed. These Gaussian processes are defined on a compact time interval and are characterized by a continuous covariance function (or kernel). In general the dimension of the Reproducing Kernel Hilbert Space (RKHS) is infinite. Sample paths of such a process despite of being continuous and square integrable (thus in L^2), do not belong to the RKHS with probability 1.

In particular the evolution of the spectral representation of approximations to trajectories of such processes monitored at discrete times is studied. These approximations can be analyzed as monitored in a functional space of finite dimension. This space is embedded in the respective infinite-dimensional RKHS. Thus the discrete monitoring can be understood as a regularized approximation to original trajectories. As the concerning RKHS is dense in L^2 , in the limit of continuous monitoring (i.e. when the time grid over which sample paths are monitored is dense in the time domain), these regularized trajectories are arbitrarily close to original trajectories of the process.

The analysis includes Gaussian processes with several covariance kernels, both not stationary (Brownian Motion, Brownian Bridge) and stationary (Exponential, Matérn, RBF). The analysis shows that the regularity of the kernel function of the process has a deep effect in the structure of coefficients of spectral representations of such trajectories. Results obtained provide a novel perspective of the convergence of interpolating representations for trajectories of Gaussian processes.

3. Introducción

En esta sección preliminar, los conceptos teóricos relevantes serán explicados de manera breve. En primer lugar en la sección 3.1 se explicarán brevemente los conceptos relacionados con Proceso Gaussiano (PG) que atañen al trabajo presente. En la sección 3.3 se explicarán brevemente conceptos básicos de Espacio de Hilbert con Núcleo Reprodutor (RKHS) y finalmente en la sección 3.3 se desarrollará brevemente la teoría de espacios de Sobolev, que son los espacios naturales de las trayectorias de PG.

3.1. Procesos Gaussianos

En primer lugar definamos lo que es un Proceso Gaussiano (GP).

Definition 3.1 (Proceso Gaussiano). *Un proceso estocástico $\{X_t\}_{t \in T}$ es un Proceso Gaussiano si para cada $t_1, \dots, t_k \in T$, el vector multivariante*

$$X_{t_1, \dots, t_k} = (X_{t_1}, \dots, X_{t_k}),$$

sigue una distribución Gaussiana multivariante. Si $X_t, t \in T$ es un proceso Gaussiano, la media $\mu(\cdot)$ de X_t se define como

$$\mu(t) = \mathbb{E}[X_t] \quad \forall t \in T,$$

y la función de covarianzas o autocovarianzas γ de X se define como

$$\gamma(s, t) = \text{Cov}(X_s, X_t) \quad \forall s, t \in T.$$

Escribimos $X_t \sim GP(m, \gamma)$.

Nos reducimos al caso cuando $T = [0, 1]$, luego sus trayectorias serán funciones $x \in L^2[0, 1]$. Como consecuencia de la definición se puede comprobar que cualquier combinación de las marginales $\{X(t_n)\}_{n=1}^N, t_n \in [0, 1]$ también será una variable Gaussiana multivariante. Sin pérdida de generalidad, consideraremos PG centrados, es decir, con $m(t) \equiv 0$. También nos limitaremos a funciones de autocovarianza continuas, lo que nos garantiza algunas propiedades deseables como por ejemplo la continuidad de las trayectorias.

Para cada proceso Gaussiano existe un operador lineal correspondiente llamado operador de autocovarianza. Este operador es el equivalente continuo a la multiplicación por la matriz de covarianza del caso multivariante. Una excepción esencial en esta analogía entre el caso finito Gaussiano y el caso funcional Gaussiano es el hecho de que en el caso finito, una matriz de covarianza Σ en general se asume no singular (con rango máximo o de manera equivalente con todos sus autovalores no nulos), lo que implica que es invertible, mientras que el objeto análogo para el caso funcional, que es el

operador de covarianza \mathcal{K} no es invertible. Este operador tiene la expresión, para $f \in L^2[0, 1]$

$$\mathcal{K}[f] = \int_0^1 \gamma(t, s)f(s)ds \in L^2[0, 1]. \quad (1)$$

Asumido que la función de covarianzas es continua, el operador de covarianzas del proceso es un operador hermítico [5]. Este operador, al contrario que su análogo multivariante no es invertible al ser compacto. Una función de covarianzas es un núcleo, concepto definido por Mercer en 1909 [11] en el contexto funcional de ecuaciones integrales. A continuación se muestra una adaptación al contexto del trabajo

Definition 3.2 (Núcleo semidefinido positivo). *Un núcleo semidefinido positivo k es una función simétrica $k : [0, 1] \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ con*

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n k(s_i, s_j)c_i c_j \geq 0$$

para cuales quiera $n \in \mathbb{N}$, $\{s_i\}_{i=1}^n \subset [0, 1]$ y $\{c_i\}_{i=1}^n \subset \mathbb{R}$

Es inmediato comprobar que por definición una función de autocovarianzas γ de un PG es un núcleo semidefinido positivo. Utilizando el teorema de Mercer podemos obtener una descomposición de un núcleo en términos de una base del espacio funcional $L^2[0, 1]$.

Theorem 3.3 (Teorema de Mercer). *Si γ es un núcleo continuo semidefinido positivo, entonces existe una Base Ortonormal (BO) $\{e_k\}_{k=1}^\infty$ de $L^2[0, 1]$ de autofunciones del operador lineal $\mathcal{K} : L^2[0, 1] \rightarrow L^2[0, 1]$ definido como*

$$\mathcal{K}[f](t) = \int_0^1 \gamma(t, s)f(s)ds, \quad f \in L^2[0, 1], \quad (2)$$

tal que la secuencia correspondiente de autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$ es no negativa y las autofunciones correspondientes son continuas en $[0, 1]$. Además la función γ admite una descomposición en esta base

$$\gamma(s, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k e_k(s)e_k(t), \quad (3)$$

donde la convergencia es absoluta y uniforme.

Una prueba de este teorema puede encontrarse en [7]. Esta última ecuación también revela que

$$\int_{[0,1]} \int_{[0,1]} K(s, t)^2 ds dt = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 < \infty.$$

En términos de los coeficientes y autofunciones de esta descomposición de la función de autocovarianzas, a su vez se obtiene una descomposición en serie del propio proceso. Esta descomposición la proporciona el teorema de Karhunen-Loève enunciado a continuación y cuya prueba puede encontrarse en [2].

Theorem 3.4 (Expansión de Karhunen-Loève). *Sea $X \sim GP(0, \gamma)$. Sea $\{e_k\}_{k=1}^{\infty} \subset L^2[0, 1]$ la BO de $L^2[0, 1]$ de autofunciones de su operador de covarianza con los correspondientes autovalores $\{\lambda_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \mathbb{R}$, entonces X admite la representación*

$$X = \sum_{k \geq 1} \xi_k e_k(t), \quad (4)$$

donde la convergencia es en $L^2[0, 1]$, uniforme en t , y ξ_k se puede expresar como

$$\xi_k = \langle e_k, X \rangle_2 = \int_0^1 X(t) e_k(t) dt. \quad (5)$$

Los coeficientes $\{\xi_k\}_{k=1}^{\infty}$ son variables aleatorias con

$$\mathbb{E}[\xi_k] = 0, \quad k = 1, 2, \dots \quad (6)$$

$$\text{Cov}(\xi_k, \xi_j) = \delta_{j,k} \lambda_k, \quad k, j = 1, 2, \dots \quad (7)$$

Del operador de covarianzas de un PG, se define el operador raíz cuadrada del mismo como el único operador $\mathcal{K}^{1/2} : L^2[0, 1] \rightarrow L^2[0, 1]$ con $\mathcal{K}^{1/2} \mathcal{K}^{1/2} = \mathcal{K}$. Este operador raíz cuadrada de covarianza es también semi-definido positivo [9]. Juega un papel importante en la teoría de PG, dado que la imagen del espacio de funciones $L^2[0, 1]$ por este operador $\mathcal{K}^{1/2}$ forma un Espacio de Hilbert con Núcleo Reprodutor (*Reproducing Kernel Hilbert Space*, RKHS). Estos espacios de funciones tienen propiedades muy interesantes y son relevantes en problemas como la resolución de ecuaciones diferenciales por su fuerte relación con las funciones de Green [13] o en aprendizaje automático, ya que los conocidos como *feature maps* definen un núcleo semidefinido positivo, y por lo tanto, como se verá en la siguiente subsección con el teorema de Moore-Aronszajn 3.8, un RKHS.

3.2. Espacios de Hilbert con Núcleo Reprodutor

Los espacios de Hilbert con núcleo reproductor (en inglés *Reproducing Kernel Hilbert Space*, RKHS) fueron introducidos por Aronszajn en 1950 [1] y aplicados por Parzen en 1959 al campo de la estadística. Estos espacios son subespacios de espacios de Hilbert que incorporan un objeto adicional llamado núcleo reproductor que lo caracteriza. En general es difícil describir estos espacios como clases de funciones, al igual que obtener el núcleo correspondiente a un RKHS como clase de funciones. Sin embargo, la teoría de RKHS juega un papel central en el contexto del Análisis de Datos Funcionales (ADF) y del la inferencia estadística con este tipo de datos. Una

manera de definir el concepto de RKHS es la siguiente, adaptada al contexto del trabajo

Definition 3.5 (Espacio de Hilbert con Núcleo Reprodutor (i)). *Un espacio H de funciones reales $f(t), t \in [0, 1]$ es un RKHS si para cualquier $\forall s \in [0, 1]$ el funcional de evaluación,*

$$\begin{aligned} L_s : H &\rightarrow \mathbb{R} \\ f &\mapsto f(s), \end{aligned}$$

es continuo en cada $f \in H$.

Esta definición da poca información sobre la utilidad de este tipo de espacios, sin embargo, mediante el teorema de representación de Riesz, se puede ver que esta condición de continuidad del operador de evaluación funcional tiene como consecuencia una propiedad muy interesante: se puede expresar este funcional de valuación como el producto interior con un elemento del espacio.

Theorem 3.6 (Teorema de representación de Riesz). *Sea H un espacio de Hilbert, para cada φ en el espacio dual H' de funcionales, existe un único $f \in H$ con*

$$\varphi[g] = \langle f, g \rangle_H, \quad (8)$$

para todo $g \in H$, y además

$$\|\varphi\|_{H'} = \|f\|_H.$$

Este teorema de representación sugiere que en un RKHS se puede reemplazar el funcional de evaluación en un punto por el producto interior con alguna función en el propio espacio, es decir se tiene, si $f \in H$ con H un RKHS que

$$L_s(f) = f(s) = \langle k_s, f \rangle_H, \quad s \in [0, 1],$$

para algún $k_s \in H$. Aplicando la misma idea para k_s se puede escribir

$$k_s(t) = L_t(K_s) = \langle k_s, k_t \rangle_H, \quad s, t \in [0, 1],$$

lo que implica que $k_s(t) = k_t(s)$. Finalmente definiendo la función

$$\begin{aligned} \gamma : [0, 1] \times [0, 1] &\rightarrow \mathbb{R} \\ (s, t) &\mapsto \gamma(s, t) = \langle k_s, k_t \rangle_H, \end{aligned}$$

se tiene que γ es un núcleo semidefinido positivo. Esto permite definir un RKHS en términos de su función de núcleo reproductor.

Definition 3.7 (Espacio de Hilbert con Núcleo Reprodutor (ii)). *Un espacio de Hilbert H es un RKHS si existe un núcleo semidefinido positivo $\gamma(s, t), s, t \in [0, 1]$ con*

- $K(s, \cdot) \in H$,
- $\langle K(s, \cdot), f \rangle_H = f(s)$, para cualesquiera $f \in H, s \in [0, 1]$.

Si se cumplen estas condiciones denotamos $H \equiv \mathcal{H}(\gamma)$.

La notación $\mathcal{H}(\gamma)$ refleja la fuerte relación entre un RKHS y su correspondiente núcleo reproductor γ . esta relación es unaria: el teorema de representación de Riesz 3.6 implica que para cada RKHS existe un único $K(s, \cdot) \in \mathcal{H}(\gamma)$ con la propiedad reproductora, mientras que el teorema de Moore-Aronszajn 3.8 enunciado a continuación implica que cada núcleo γ define un único RKHS $\mathcal{H}(\gamma)$.

Theorem 3.8 (Moore-Aronszajn theorem). *Dado un núcleo γ , existe un único espacio de Hilbert $\mathcal{H}(K)$ de funciones para el que γ es un núcleo reproductor.*

En el contexto de los PG, el concepto de RKHS tiene un papel importante. Como ya ha sido mencionado, la imagen del espacio $L^2[0, 1]$ de funciones por el operador raíz cuadrada de covarianza de un PG define un RKHS [12].

$$\mathcal{H}(\gamma) = \left\{ \mathcal{K}^{1/2} f : f \in L^2[0, 1] \right\}.$$

Esta definición es muy natural y útil dado que por ejemplo se puede utilizar para describir el producto interior de $\mathcal{H}(\gamma)$ en términos del producto interior en $L^2[0, 1]$ a través de la preimagen por el operador de covarianzas. Para $f, g \in \mathcal{H}(\gamma)$ se tiene

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{K}} = \langle \mathcal{K}^{-1/2} f, \mathcal{K}^{-1/2} g \rangle_2. \quad (9)$$

Utilizando la descomposición espectral del proceso que provee el teorema de Karhunen-Loève puede verse que la imagen de la BO de autofunciones del proceso por el operador raíz cuadrada de covarianzas $\{\sqrt{\lambda_k} e_k\}_{k=1}^{\infty}$ forma una BO del RKHS del espacio, que puede ser caracterizado como

$$\mathcal{H}(\gamma) = \left\{ f = \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_k} c_k e_k(\cdot) : \sum_{k=1}^{\infty} c_k^2 < \infty \right\},$$

y entonces el producto interior en el RKHS del proceso tiene una expresión muy conveniente. Si

$$f = \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_k} f_k e_k, \quad \sum_{i \geq 1} f_k^2 < \infty,$$

$$g = \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_k} g_k e_k, \quad \sum_{i \geq 1} g_k^2 < \infty,$$

entonces de nuevo por la descomposición espectral se puede comprobar que se tiene

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{K}} = \sum_{k=1}^{\infty} f_k g_k,$$

y entonces es trivial comprobar que las funciones evaluadoras $\gamma(t, \cdot)$ se encuentran en el RKHS dado que

$$\gamma(s, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_k} e_k(t) \sqrt{\lambda_k} e_k(\cdot).$$

Recordando que $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k e_k(s)^2 = K(s, s) < \infty$ por ser γ continua. Se satisface la propiedad reproductora dado que

$$\langle f, \gamma(s, \cdot) \rangle_{\mathcal{K}} = \sum_{k=1}^{\infty} f_k \sqrt{\lambda_k} e_k(s) = f(s).$$

El problema principal en el caso de PG es que si $x \in L^2[0, 1]$ es una trayectoria del PG $X \sim GP(0, \gamma)$ con RKHS natural H de dimensión infinita, entonces

$$\mathbb{P}(x \in H) = 0. \quad (10)$$

Luego la norma en el RKHS no está definida para las trayectorias del propio proceso. Por otro lado, al tener dimensión infinita, el RKHS es denso en $L^2[0, 1]$, por lo tanto cualquier trayectoria $x \in L^2[0, 1]$ se puede aproximar por una sucesión de proyecciones en el RKHS cuyo límite es la trayectoria original. Es esta la temática principal del trabajo, estudiar la sucesión de interpolantes lineales en un conjunto de nodos de interpolación creciente. En la sección 4 se desarrollan en profundidad los experimentos realizados en este sentido, y se mostrarán algunos ejemplos de estas sucesiones para aproximar trayectorias de PG.

3.3. Espacios de Sobolev

Para explicar el concepto de espacio de Sobolev, es necesario introducir el concepto de derivada débil, que extiende el concepto convencional de derivada. Para ello primero es requisito definir primero el espacio de las funciones test $C_0^\infty[0, 1]$

$$C_0^\infty[0, 1] = \{\phi \in C^\infty[0, 1] : \phi(0) = \phi(1) = 0\} \quad (11)$$

Dada una función f , se dice que f' es una derivada débil de f si para cualquier función test $\phi(t) \in C_0^\infty[0, 1]$ se cumple la fórmula de integración por partes

$$\int_0^1 \phi'(t) f(t) dt = - \int_0^1 \phi(t) f'(t) dt. \quad (12)$$

En nuestro caso unidimensional, la derivada débil de una función tiene una sencilla interpretación. Si la función admite derivada débil, se puede interpretar como una derivada en casi todo punto para la función. Esto permite que una misma función pueda tener dos derivadas débiles diferentes, pero estas por definición coinciden en casi todo punto. El concepto de derivada débil extiende el convencional de derivada y es muy utilizado en el análisis funcional. En el caso de existir derivada la derivada débil coincide con la derivada convencional.

En particular la derivada débil se utiliza para definir los espacios funcionales de Sobolev. Estos espacios de Sobolev son esencialmente espacios L^p funcionales que imponen propiedades de regularidad relacionadas con la diferenciabilidad de las funciones. Nos limitaremos a desarrollar la explicación para los de tipo Hilbert (cuadrado integrable) por razones de brevedad y ser los más relevantes para el trabajo. Para $k = 1, 2, \dots, \infty$, se puede definir como conjunto de funciones el espacio de Sobolev $W^{k,p=2}[0, 1]$, abreviado $H^k[0, 1]$ como

$$H^k[0, 1] = \left\{ f \in L^2 : f^{(d)} \in L^2[0, 1], d = 1, 2, \dots, k \right\}. \quad (13)$$

donde $f^{(d)}$ es la d -ésima derivada en el sentido débil de f . Este conjunto equipado con la norma

$$\|f\|_{H^k[0,1]} = \|f^{(k)}\|_2 + \|f\|_2, \quad (14)$$

forma un espacio de Hilbert. La caracterización de estos espacios de Sobolev para el caso de una dimensión es sencilla, no así cuando el soporte de las funciones tiene más dimensiones o una topología complicada. En este particular unidimensional, como espacio de funciones se puede escribir

$$H^k[0, 1] = \left\{ f \in L^2[0, 1] : f^{(d-1)} \text{ a.c.}, f^{(d)} \in L^2[0, 1], d = 1, 2, \dots \right\}, \quad (15)$$

donde $f^{(k)}$ es la k -ésima derivada débil de f y a.c. significa absolutamente continua. Es decir las funciones y sus $k - 1$ primeras derivadas débiles son absolutamente continuas (se pueden expresar como una integral) y las funciones y sus k derivadas débiles están en $L^2[0, 1]$. Estos espacios se pueden extender a índices fraccionarios, utilizando la continuidad de Hölder, imponiendo condiciones de regularidad extra. Para $\alpha > 0$, una función $f \in L^2[0, 1]$ es α -Hölder continua si

$$|f(s) - f(t)| \leq l|s - t|^\alpha, \quad t \in [0, 1]. \quad (16)$$

Esta condición es una extensión de la condición de Lipchitz, que es el caso particular cuando $\alpha = 1$. Este tipo de regularidad se utiliza a su vez para extender la definición de espacio de Sobolev. Tomando la seminorma de

Slobodeckij para $\theta \in (0, 1)$

$$[f]_{\theta} = \sqrt{\int_0^1 \int_0^1 \frac{|f(s) - f(t)|^2}{|s - t|^{2\theta+1}} dt ds}, \quad (17)$$

se define el espacio de Sobolev–Slobodeckij para $r > 0$,

$$H^r[0, 1] = \left\{ f \in H^{\lfloor r \rfloor}[0, 1] : \sup_{d \leq \lfloor r \rfloor} [f^{(d)}]_{\theta} < \infty \right\}, \quad (18)$$

donde $f^{(d)}$ es la d -ésima derivada débil de f y $\theta = r - \lfloor r \rfloor \in (0, 1)$ es la parte no entera de r . La pertenencia a estos espacios de Sobolev fraccionarios caracterizan con más precisión la regularidad de las funciones en ellos, y son por ejemplo los espacios naturales en los que residen las trayectorias de PG [15].

4. Experimentos

En esta sección se desarrollan los experimentos realizados para la representación mediante interpolantes lineales de las trayectorias de un PG. En primer lugar en la sección 4.1 se explicará el modelo teórico que se ha implementado en las simulaciones. En las secciones siguientes se desarrollan los propios experimentos para distintos PG definidos por sus funciones de covarianza.

4.1. Planteamiento

Para un PG con dimensión infinita (existen infinitos autovalores positivos del operador de covarianza del proceso), las trayectorias $x \in L^2[0, 1]$ del proceso no están en el RKHS natural del proceso con probabilidad 1 [6]. Es decir, si $x \in L^2[0, 1]$ es una trayectoria del PG $X \sim GP(0, \gamma)$ con RKHS natural $\mathcal{H}(\gamma)$

$$\mathbb{P}(x \in \mathcal{H}(\gamma)) = 0. \quad (19)$$

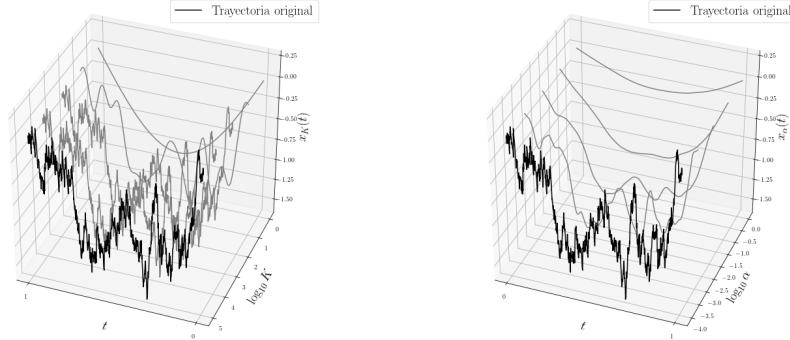
Las trayectorias de un PG se encuentran en un espacio de Sobolev fraccionario intermedio entre $L^2[0, 1]$ y el RKHS natural del proceso. Se puede demostrar que si el RKHS del proceso está inmerso en el espacio de Sobolev fraccionario H^r , para $r > \frac{1}{2}$, entonces las trayectorias están en los subespacios $H^{r-\frac{1}{2}-\epsilon}$ para $\epsilon > 0$. Se puede entender intuitivamente que las trayectorias son la mitad de suaves que el propio proceso, en el sentido que si el RKHS natural del proceso está formado por funciones con d derivadas en el espacio $L^2[0, 1]$ de funciones, las trayectorias del proceso tendrán $d/2$ derivadas en $L^2[0, 1]$ [15].

Consideraremos procesos con trayectorias continuas con probabilidad 1, en [3] se ve que para PG, es suficiente que la función de autocovarianzas del proceso sea continua. Dada trayectoria $x(t) \in L^2[0, 1]$ continua, se puede obtener una sucesión de funciones en el RKHS natural de su proceso que converja en $L^2[0, 1]$ a la trayectoria original. Un ejemplo es tomar la aproximación por truncamiento de la base del espacio de funciones $L^2[0, 1]$ extraída de [8]. Dado un PG, en la base de autofunciones de su operador de covarianzas, $\{e_k\}_{k=1}^\infty$ y un tamaño $K \in \mathbb{N}^+$ se define la sucesión $\{x_K(t)\}_{K=1}^\infty \subset L^2[0, 1]$, con

$$x_K(t) = \sum_{k=1}^K \langle x, e_k \rangle_2 e_k(t), \quad t \in [0, 1], K = 1, 2, \dots \quad (20)$$

Estas proyecciones x_K están en el RKHS, podemos calcular su norma en este espacio, que mediante la identidad de Parseval se ve que cumple

$$\|x_K\|_{\mathcal{K}}^2 = \sum_{k=1}^K \frac{\langle x, e_k \rangle_2^2}{\lambda_k}. \quad (21)$$



(a) Regularizado por truncamiento. (b) Regularizado por penalización L^2 .

Figura 1: Visualización de las regularizaciones para un ejemplo de trayectoria.

Otra alternativa es la siguiente regularización por penalización L^2 extraída de [4] similar a la regularización de Tíjnov o *ridge regression*. Para el parámetro continuo $\alpha > 0$ se define la familia de aproximaciones $\{x_\alpha\}_{\alpha>0}$ con

$$x_\alpha = \arg \min_{f \in \mathcal{H}(K)} \|x - f\|_2^2 + \alpha \|f\|_{\mathcal{K}}^2. \quad (22)$$

Mediante el teorema espectral para operadores compactos [5] se tiene la siguiente representación para estas proyecciones en términos de la base de autofunciones del operador de covarianzas del proceso $\{e_k\}_{k=1}^\infty$ y el correspondiente conjunto de autovalores $\{\lambda_k\}_{k=1}^\infty$

$$x_\alpha(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_k}{\alpha + \lambda_k} \langle x, e_k \rangle_2 e_k(t), \quad t \in [0, 1]. \quad (23)$$

En la Figura 1 se pueden visualizar el efecto de estas regularizaciones para un ejemplo de trayectoria de un PG.

La selección de la regularización a aplicar es arbitraria y dado que cada núcleo de cada PG tiene unas propiedades de regularidad en sus trayectorias diferentes,

4.1.1. Regularización mediante monitorización discreta en el dominio (*domain sampling*)

Dada una trayectoria $x(t), t \in [0, 1]$ del proceso $X(t) \sim GP(0, \gamma)$, y dado un mallado temporal $T_N = \{t_1, t_2, \dots, t_N\}$, con $t_1 = 0$ y $t_N = 1$, consideramos la representación de la trayectoria mediante el interpolante

$x_N(t)$. Este interpolante se construye a partir de los nodos de interpolación $\{(t_n, x(t_n))\}_{n=1}^N$. Por simplicidad consideraremos mallas uniformes, es decir, llamamos $h = \frac{1}{N-1} = t_n - t_{n-1}, n = 1, 2, \dots, N$ al ancho del grid. El interpolante en tales nodos tiene la siguiente expresión, en términos de los elementos de una base nodal $\{\varphi_n(t)\}_{n=1}^N$, para una función f

$$f_N(t) = \sum_{n=1}^N f(t_n)\varphi_n(t), \quad t \in [0, 1]. \quad (24)$$

Para estos elementos de la base nodal $\{\varphi_n(t)\}_{n=1}^N$ se cumple la siguiente propiedad

$$\varphi_n(t_m) = \delta_{n,m}, \quad (25)$$

es decir en los tiempos correspondientes a los nodos de interpolación, cada uno de ellos tiene altura uno en un único nodo. En el caso de interpolantes lineales, estos elementos de la base nodal tienen la siguiente definición

$$\varphi_n(t) = \begin{cases} 0 & t < t_{n-1} \\ w_n & t_{n-1} \leq t < t_n \\ 1 - w_{n+1} & t_n \leq t < t_{n+1} \\ 0 & t_{n+1} \leq t \end{cases} \quad (26)$$

para $n \neq 1, N$ y

$$\varphi_1(t) = \begin{cases} 0 & t < t_1 \\ 1 - w_1 & t_1 \leq t < t_2 \\ 0 & t_2 \leq t \end{cases}, \quad (27)$$

$$\varphi_N(t) = \begin{cases} 0 & t < t_{N-1} \\ w_N & t_{N-1} \leq t < t_N \\ 0 & t_N \leq t \end{cases} \quad (28)$$

donde $w_n = \frac{t - t_{n-1}}{h}$. se pueden visualizar las gráficas correspondientes a estos elementos de la base nodal en la figura 2. Esquemas de mayor grado pueden

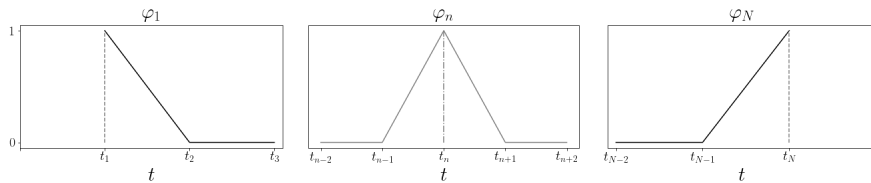


Figura 2: Elementos de la base nodal de interpolantes lineales. Nótese la forma de los elementos correspondientes al primer y al último nodo.

considerarse en los que estos elementos de la base nodal son un polinomio

a trozos de mayor grado. Cuanto mayor sea el grado de los elementos de la base nodal, más regularidad tendrá el interpolante resultante.

Cada aproximación por interpolantes está en el RKHS con probabilidad 1. Son funciones absolutamente continuas en un soporte compacto, luego en $L^1[0, 1] \cap L^\infty[0, 1]$. Por lo tanto estas funciones son L^p para cualquier $1 \leq p \leq \infty$, es decir para un interpolante $f_N(t), t \in [0, 1]$ se tiene

$$\|f_N\|_p = \sqrt[p]{\int_0^1 |f_N(s)|^p ds} < \infty, 1 \leq p < \infty, \quad (29)$$

$$\|f_N\|_\infty = \sup_{s \in [0,1]} |f_N(s)| = \max_{s \in [0,1]} |f_N(s)| < \infty.$$

Además estos interpolantes lineales a trozos admiten una derivada débil. Para el caso particular de los interpolantes lineales a trozos, se tiene la siguiente expresión para la derivada débil de una función, obtenida derivando la ecuación 24

$$f'_N(t) = \sum_{n=1}^N f(t_n) \varphi'_n(t), \quad t \in [0, 1], \quad (30)$$

donde φ'_n es la derivada débil de φ_n , para $n = 1, 2, \dots, N$. La expresión de la derivada débil φ'_n es la siguiente

$$\varphi'_n(t) = \begin{cases} 0 & t < t_{n-1} \\ 1/h = N & t_{n-1} \leq t < t_n \\ -1/h = -N & t_n \leq t < t_{n+1} \\ 0 & t_{n+1} \leq t \end{cases} \quad (31)$$

para $n \neq 1, N$, y

$$\varphi_1(t) = \begin{cases} 0 & t < t_1 \\ -1/h = -N & t_1 \leq t < t_2, \\ 0 & t_2 \leq t \end{cases} \quad (32)$$

$$\varphi_n(t) = \begin{cases} 0 & t < t_{N-1} \\ 1/h = N & t_{N-1} \leq t < t_N \\ 0 & t_N \leq t \end{cases} \quad (33)$$

A medida que aumentamos el tamaño N , el número de nodos de la función original a interpolar, monitorizamos en más tiempos y obtenemos un interpolante más preciso. Consideraremos el parámetro B , con la relación $N = 2^{B-1} + 1$, que como se verá es más conveniente para entender el ritmo al que la regularidad de la interpolación evoluciona. De esta manera, aumentar en una unidad B se refleja en añadir un nodo entre cada dos nodos de la monitorización. Al aplicar el aumento a un mallado de tamaño N , en el

siguiente paso tendremos $2N - 1$ nodos en el mallado resultante. De manera que si comenzamos con $N = 2$ (los bordes del dominio), tenemos $N = 2, 3, 5, \dots, 2^{B_{max}-1} + 1$ muestras en B_{max} pasos sucesivos. Para números grandes de nodos, esta manera de añadir nuevos tiempos de monitorización es en la práctica equivalente a doblar el número de nodos. Esto se puede ver con la expresión del cociente entre el número de nodos en dos pasos consecutivos,

$$\frac{2^{N+1} + 1}{2^N + 1} \rightarrow_{N \rightarrow \infty} 2, \quad (34)$$

de manera que esencialmente podemos considerar que a cada paso doblamos el número de puntos a monitorizar.

En la Figura 3 se puede observar un ejemplo de la progresión de este tipo de monitorización discreta para una función, y en la Figura 4 puede observarse las interpolaciones que se obtendrían con estas monitorizaciones.

Si la función original es Hölder continua de orden $\alpha > 0$ entonces es tri-

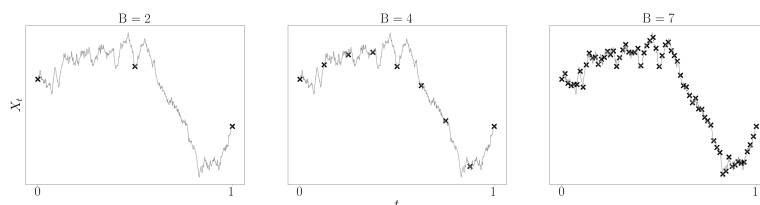


Figura 3: Ejemplos de monitorización discreta progresiva.

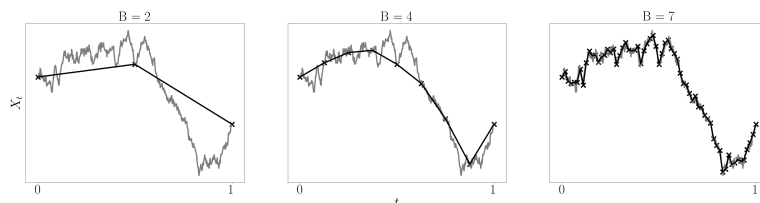


Figura 4: Ejemplos de representación mediante interpolantes lineales.

vial probar la convergencia puntual de la representación, dado que para un mallado $T_N = t_1, t_2, \dots, t_N$ tenemos

$$|f(s) - f_N(s)| = \left| f(s) - \left[f(\tau^+) \frac{s - \tau^-}{\tau^+ - \tau^-} + f(\tau^-) \frac{\tau^+ - s}{\tau^+ - \tau^-} \right] \right|,$$

donde τ^-, τ^+ son los nodos de interpolación que quedan respectivamente a la izquierda y a la derecha de s . Escribiendo $\tau^+ = \tau^- + \frac{1}{N-1} = \tau^- + h$ se puede observar que $h = (s - \tau^-) + (\tau^+ - s)$, luego se puede ver que dado si

f es Hölder continua de orden $\alpha > 0$ de constante l

$$\begin{aligned} |f(s) - f_N(s)| &\leq \frac{1}{h} |(f(s) - f(\tau^+))(s - \tau^-) + (f(s) - f(\tau^-))(\tau^+ - s)| \\ &\leq |(f(s) - f(\tau^+))| + |f(s) - f(\tau^-)| \leq 2lh^\alpha \end{aligned} \quad (35)$$

Y dado que $h = \frac{1}{N-1}$, tenemos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |f(s) - f_N(s)| = 0, \quad s \in [0, 1]. \quad (36)$$

Por ejemplo las trayectorias de los procesos Movimiento Browniano (MB) y Puente Browniano (PB) son casi seguramente Hölder continuas para $\alpha < \frac{1}{2}$, luego la representación de una trayectoria mediante interpolantes converge casi seguramente para estas trayectorias.

El interés de estos interpolantes lineales a trozos en el contexto del trabajo viene del hecho que estos interpolantes lineales a trozos son la solución al siguiente problema variacional, adaptado de [16], que consiste en dada una muestra de entrenamiento $\{t_n, x(t_n)\}_{n=1}^N$, encontrar f^* con

$$f^* = \arg \min_{f \in H^1[0,1]} \|f'\|_2 \text{s.a. } f(t_n) = x(t_n), n = 1, 2, \dots, N. \quad (37)$$

4.1.2. Regularización de trayectorias de Procesos Gaussianos

En general las trayectorias de un PG no están en el RKHS del proceso con probabilidad 1, lo que supone una dificultad a la hora de extender técnicas estadísticas clásicas al paradigma funcional, como es el ejemplo de la distancia de Mahalanobis, la regla de Fisher o Análisis de Componentes Principales (PCA). Una manera de esquivar esta singularidad es el regularizado de las trayectorias, tomando una sucesión de proyecciones de estas trayectorias en el RKHS.

La regularización mediante interpolantes lineales se puede aplicar trayectorias de PG. Para las trayectorias originales puede obtenerse una representación por un interpolante lineal, construido mediante una monitorización discreta del dominio. Estas aproximaciones están en el RKHS del proceso y añadiendo nuevos nodos a la representación obtendremos progresivamente una versión más fiel. Para una trayectoria $x(t), t \in [0, 1]$, obtenemos su versión regularizada monitorizando la trayectoria en un conjunto finito de tiempos de un cierto tamaño N . Con estos nodos obtenemos las versiones interpolantes $x_N(t), t \in [0, 1]$, que sí estando en el RKHS, podemos calcular sus coeficientes en el RKHS. La regularidad de las trayectorias, que se refleja de manera clara mediante el análisis del espectro del proceso, es un factor importante en el estudio. Los distintos tipos de decaimiento de los autovalores representan la regularidad del proceso, y la convergencia de estas

representaciones está fuertemente ligada a esta regularidad. Queremos ver experimentalmente la evolución del siguiente límite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|x_N\|_{\mathcal{K}}^2, \quad (38)$$

es decir, la norma en el RKHS de los interpolantes $x_N(t), t \in [0, 1]$ de una trayectoria $x(t), t \in [0, 1]$. Como para las trayectorias originales sabemos que la serie de los coeficientes en el RKHS no es convergente, pero para las representaciones mediante interpolantes sí, esperamos ver como a medida que aumenta el número de nodos en el interpolante N evoluciona la serie 38. Para $f \in H(\mathcal{K})$ utilizando la identidad de Parseval se calcula la norma en el RKHS como

$$\|f\|_{\mathcal{K}}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_k^2}{\lambda_k}. \quad (39)$$

donde

$$f_k = \langle f, e_k \rangle_2. \quad (40)$$

Estudiaremos como estos coeficientes evolucionan para las representaciones mediante interpolantes. Los autovalores del operador de covarianzas del proceso λ_k juegan un papel fundamental en el proceso. En general el decaimiento de estos autovalores es rápido y $\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k = 0$, por lo que el cálculo de los coeficientes de la Ecuación 40 presenta ciertas dificultades. En particular este decaimiento de autovalores para un PG depende de la función de autocovarianzas del proceso, estudiaremos en qué grado afecta esta función a los resultados del método.

4.1.3. Descripción de los experimentos

En las siguientes secciones, estudiamos diversos núcleos que utilizaremos como funciones de covarianza de PG. Asumimos que los procesos están centrados, de manera que cada PG se define únicamente con su función de autocovarianzas. Observaremos el espectro de un PG. En este sentido se estudia la base de autofunciones y autovalores del proceso, así como los coeficientes en $L^2[0, 1]$, el espacio natural de las trayectorias y en el RKHS del proceso, que se obtienen al regularizar las trayectorias y cómo esta regularización afecta a los resultados obtenidos. A continuación se describe la metodología que se repite para cada núcleo distinto. Dado un PG $X \sim GP(0, \gamma)$ y tamaño para la representación base N_0 (grande), consideramos la representación base mediante la variable multivariante

$$X_{N_0} = (X(t_1), X(t_2), \dots, X(t_{N_0}))' \sim \mathcal{N}(0, \gamma_{N_0}), \quad (41)$$

donde γ_{N_0} es la matriz de autocovarianzas o matriz de Gram

$$\gamma_{N_0} = \begin{pmatrix} \gamma(t_1, t_1) & \gamma(t_1, t_2) & \dots & \gamma(t_1, t_{N_0}) \\ \gamma(t_2, t_1) & \gamma(t_2, t_2) & \dots & \gamma(t_2, t_{N_0}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma(t_{N_0}, t_1) & \gamma(t_{N_0}, t_2) & \dots & \gamma(t_{N_0}, t_{N_0}) \end{pmatrix}.$$

Obtendremos una aproximación de los autovalores y autofunciones del proceso original mediante la diagonalización de la matriz de autocovarianzas γ_{N_0} . De esta matriz se extrae la descomposición en valores singulares

$$\gamma_{N_0} = E_{N_0} \Lambda_{N_0} E'_{N_0}, \quad (42)$$

donde Λ es la matriz diagonal de los autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{N_0} > 0$ y la matriz E_{N_0} está compuesta por los autovectores

$$E_{N_0} = \begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \\ \vdots \\ v^{N_0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1^1 & v_2^1 & \dots & v_{N_0}^1 \\ v_1^2 & v_2^2 & \dots & v_{N_0}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_1^{N_0} & v_2^{N_0} & \dots & v_{N_0}^{N_0} \end{pmatrix} \quad (43)$$

Con esta BO de autovectores se considera la representación base de las autofunciones del proceso, que se aproxima como

$$e_k(t) \simeq \sum_{n=1}^{N_0} v_n^k \varphi_n(t), \quad t \in [0, 1], \quad (44)$$

donde v_n^k es la n -ésima coordenada del autovector v^k .

Para ciertos procesos en los que se conoce fórmula cerrada para su espectro, es decir, los autovalores y autofunciones de su operador de covarianzas, se compararán los resultados obtenidos a partir esta aproximación multivariante con los obtenidos con la expresión analítica.

Considerando los tamaños $N = 2, 3, 5, \dots, 2^{B_{max}-1} + 1$, se obtiene el mallado temporal uniforme

$$T_N = (t_1 = 0, t_2, \dots, t_{N-1}, t_N = 1). \quad (45)$$

A la hora de simular trayectorias para un proceso, partiremos de la representación multivariante base. Las trayectorias continuas $x(t), t \in [0, 1]$ tienen la representación base mediante el interpolante construido con la monitorización en los nodos $(x(t_0), x(t_1), \dots, x(t_{N_0}))$. Este interpolante se utiliza a su vez para construir las sucesivas representaciones que obtendremos añadiendo nodos a los interpolantes. Tendremos para cada trayectoria $x(t), t \in [0, 1]$ en su representación base $x_{N_0}(t), t \in [0, 1]$, las representaciones $x_N(t), t \in [0, 1]$ para $N = 2, 3, 5, \dots, 2^{B_{max}-1} + 1$. En la figura 5 se ilustra una maqueta

de este proceso, en el que se añade a cada paso un nodo entre cada dos nodos consecutivos de la representación anterior. Esta estrategia garantiza que a partir de un tamaño mayor para la representación que el tamaño base ($N > N_0$), tenemos $x_N(t) \equiv x_{N_0}(t), t \in [0, 1]$. Con otra estrategia para añadir nodos o un tamaño de representación base distinto los interpolantes tienen una evolución mucho más complicada, como se ilustra en la Figura 6. Se puede observar como al pasar el tamaño de la representación base, el interpolante no captura ciertos picos en la función, provocando que estas versiones sean más regulares que la representación base. Este efecto es no deseado ya distorsiona los resultados

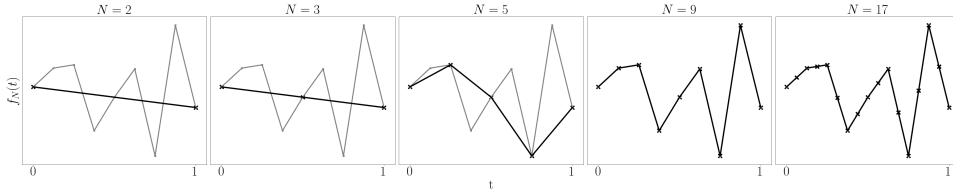


Figura 5: Ejemplo de monitorización discreta para representaciones mediante interpolantes. Obsérvese que con este procedimiento las representaciones con más nodos que la representación base son equivalentes a esta representación base, y cómo la irregularidad de las versiones es creciente.

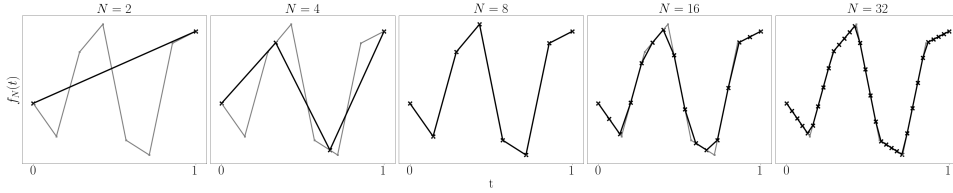


Figura 6: Ejemplo de monitorización discreta para representaciones mediante interpolantes. En cada paso se dobla el número de nodos en el interpolante. En este caso cuando el número de nodos es igual que el tamaño de la representación base, se alcanza la máxima irregularidad.

Para estos interpolantes se obtienen los coeficientes de su descomposición en la base de $L^2[0, 1]$ de autofunciones del PG $\{e_k\}_{k=1}^{\infty}$. Estos coeficientes tienen la expresión siguiente

$$\xi_{k;N} = \int_0^1 x_N(t) e_k(t) dt, \quad k = 1, 2, \dots \quad (46)$$

Sabemos que una base del RKHS es la obtenida como imagen por el operador raíz cuadrada de covarianzas del proceso [12], luego una base es $\{\sqrt{\lambda_k} e_k\}_{k=1}^{\infty}$. Se puede ver que los coeficientes de un interpolante $x_N(t), t \in [0, 1]$ en el

RKHS tienen la expresión

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \int_0^1 x_N(t) e_k(t) dt, \quad k = 1, 2, \dots \quad (47)$$

Consideramos la aproximación numérica a estas integrales, equivalente en este caso a una norma L^2 para vectores.

$$\xi_{k;N} \sim \frac{1}{N_0} \sum_{n=1}^{N_0} x_N(t_n) e_k(t_n). \quad (48)$$

En el caso de aquellos procesos para los cuales existe fórmula cerrada y conocida para estos coeficientes de interpolantes, se compararán los resultados obtenidos con las aproximaciones numéricas. Los parámetros K, N pueden combinarse para regularizar las trayectorias, por ejemplo obteniendo para una función $f \in L^2[0, 1]$ la versión

$$f_{K;N}(t) = \sum_{k=1}^K \langle f_N(t), e_k(t) \rangle_2 e_k(t), \quad t \in [0, 1]. \quad (49)$$

En la Figura 7 puede verse un ejemplo de el efecto que estos parámetros tienen en el regularizado de una trayectoria. Con respecto al parámetro K , la regularización funciona como un filtro de frecuencias altas para el RKHS natural del proceso.

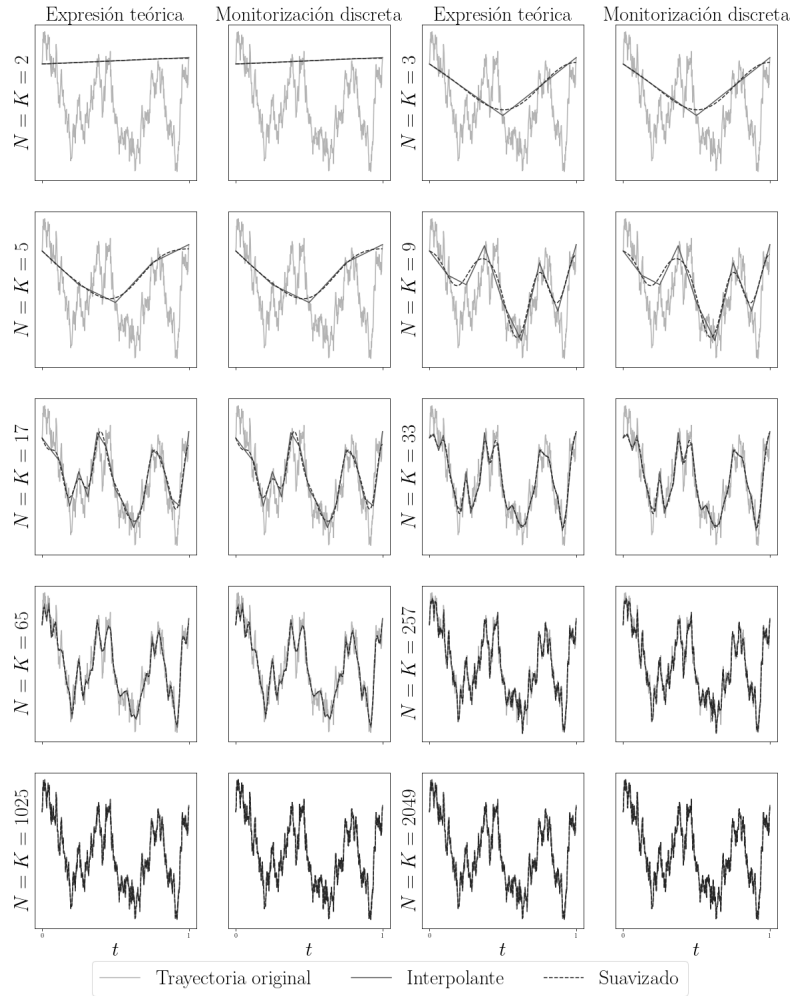


Figura 7: Ejemplos de regularización de trayectorias mediante los parámetros K y N .

Observaremos los coeficientes $\xi_{k;N}$ en el espacio de funciones $L^2[0,1]$ de las trayectorias en la base de autofunciones, así como los coeficientes $\xi_{k;N}/\sqrt{\lambda_k}$, los coeficientes de las trayectorias en el RKHS. Dado que las versiones por interpolantes se encuentran en el RKHS del proceso, tenemos que para cualquier N , la norma en el RKHS está acotada. Es decir, mediante

la identidad de Parseval sabemos que

$$\|x_N\|_2^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \xi_{k;N}^2, \quad (50)$$

que aproximaremos truncando como

$$\|x_N\|_2^2 \simeq \sum_{k=1}^K \xi_{k;N}^2. \quad (51)$$

Respectivamente para la norma en el RKHS tenemos

$$\|x_N\|_{\mathcal{K}}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\xi_{k;N}^2}{\lambda_k} < \infty. \quad (52)$$

De nuevo aproximaremos esta serie truncándola sumando hasta un índice finito

$$\|x_N\|_{\mathcal{K}}^2 \simeq \sum_{k=1}^K \frac{\xi_{k;N}^2}{\lambda_k}. \quad (53)$$

4.2. Movimiento Browniano

En esta sección estudiaremos el PG del Movimiento Browniano también conocido como proceso de Wiener, un proceso clásico. El MB es un PG no estacionario a priori definido para tiempos $[0, \infty]$, consideraremos el proceso cortado con soporte en tiempos $t \in [0, 1]$. La función de autocovarianza del movimiento browniano es la siguiente

$$\gamma(s, t) = \sigma^2 \min(s, t). \quad (54)$$

Las trayectorias de este proceso son continuas pero diferenciables en ningún punto, por lo tanto no absolutamente continuas. Esta propiedad de absoluta continuidad es importante, pues las funciones en el RKHS de este proceso cumplen esta cualidad.

En la Figura 8 se encuentra un ejemplo de visualización del núcleo correspondiente. Este proceso tiene un punto degenerado en $t = 0$, dado que $\gamma(0, 0) = \text{Var}[X_0] = 0$, lo que provoca que si se toma la monitorización en este tiempo, la matriz a diagonalizar presenta un autovalor nulo. Para evitar este problema, en lugar de tomar el intervalo $[0, 1]$, se considera el intervalo $(0, 1]$, que en la implementación se simula como $[\epsilon, 1]$, con ϵ pequeño.

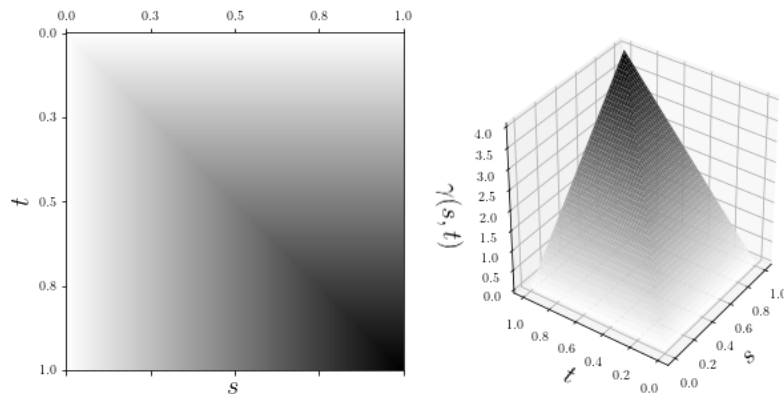


Figura 8: Visualización de la función de autocovarianzas de un MB con $\sigma = 2$.

En primer lugar se calcula el espectro del proceso, es decir, se obtienen las autofunciones $\{e_k\}_{k=1}^{\infty}$, y los correspondientes autovalores $\{\lambda_k\}_{k=1}^{\infty}$. Este conjunto de autofunciones forma una BO del espacio $L^2[0, 1]$ de funciones. Recordemos que en la simulación obtenemos un conjunto finito de autofunciones y autovectores, por lo tanto no la base completa de $L^2[0, 1]$. En particular se toma un número $K = N_0 = 1025 = 2^{10} + 1$ de autofunciones y autovalores, que recordemos es el tamaño de la matriz de covarianzas de la representación base. Es el rango de esta matriz y el número de autovalores que podemos aproximar, que es $K = N_0$. En el caso del MB, conocemos una fórmula cerrada para estos autovalores y autofunciones del proceso, compararemos los valores obtenidos mediante esta expresión teórica con la obtenida mediante la diagonalización de la matriz de la representación base. Para $k = 1, 2, \dots$ tenemos las autofunciones

$$e_k = \sigma^2 \sin\left(\left(k - \frac{1}{2}\right)\pi t\right), \quad (55)$$

con los autovalores correspondientes

$$\lambda_k = \frac{\sqrt{2}\sigma^2}{\left(k - \frac{1}{2}\right)^2\pi^2}. \quad (56)$$

En la Figura 9 pueden visualizarse algunas autofunciones de la base y el decaimiento de los autovalores calculados. Se observa que para autovalores pequeños, la aproximación multivariante incluye un error. Este efecto numérico del cálculo de los autovalores más pequeños se propaga a lo largo de los demás resultados, de manera que aparecen ciertas diferencias con respecto a los valores obtenidos mediante la monitorización discreta del dominio.

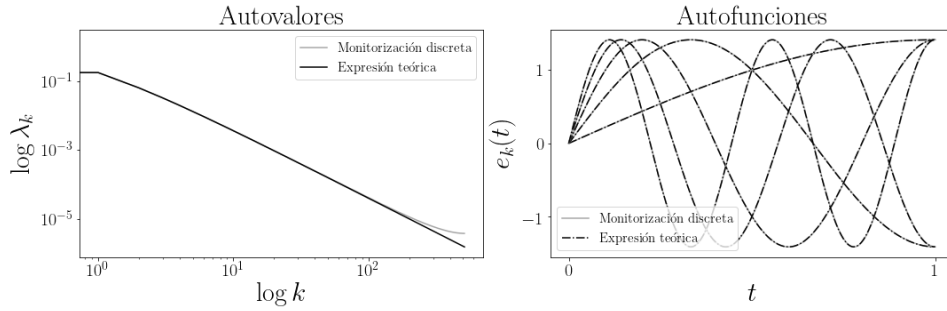


Figura 9: Decaimiento de los autovalores y primeros elementos de la base de autofunciones de un MB.

Se simulan un conjunto de trayectorias, como las mostradas en la Figura 10. Recordemos que estas trayectorias se obtienen con una representación base multivariante de tamaño N_0 . Se puede observar que la regularidad de las trayectorias

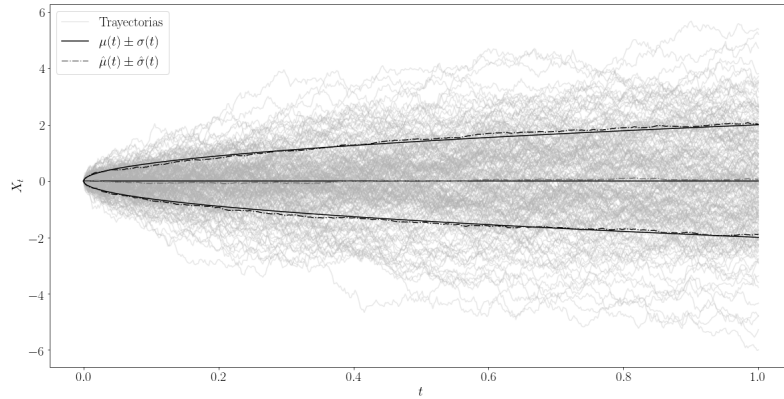
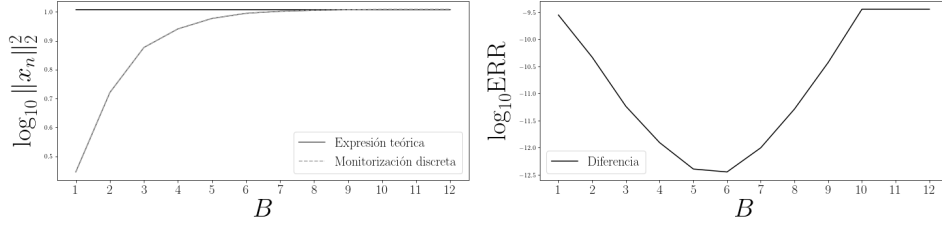


Figura 10: Ejemplos de trayectorias simuladas para un movimiento browniano centrado con $\sigma = 2$.

Para cada trayectoria simulada, se obtienen las representaciones mediante interpolantes para los distintos tamaños considerados para las monitorizaciones discretas $N = 2, 3, \dots, 2^{B_{max}-1} + 1$. En la Figura 11 se puede observar cómo es la obtención del interpolante para un ejemplo de trayectoria de la muestra.



(a) Media de la norma $L^2[0,1]$ de las versiones de las trayectorias. (b) Error de aproximación de la monitorización discreta del dominio.

Figura 12: Media de la norma $L^2[0,1]$ de las versiones de las trayectorias en función del tamaño del mallado temporal.

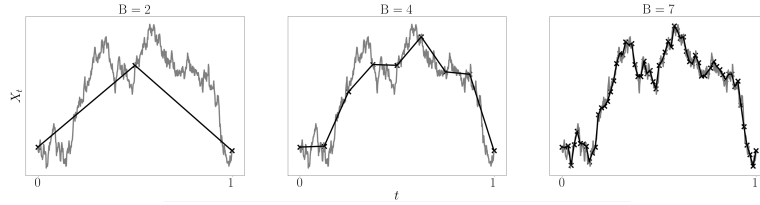


Figura 11: Ejemplos de representación mediante interpolantes lineales para las trayectorias mediante los nodos monitorizados para distintos tamaños de la malla temporal.

A medida que se aumenta el número de nodos de interpolación N , la versión converge puntualmente a la trayectoria original. En la Figura 12 puede observarse como crece la media de las normas en $L^2[0,1]$ de estas representaciones de la muestra.

En la Figura 13 se puede ver para cada valor del parámetro B el valor del coeficiente $\xi_{k;N}$ frente al autovalor correspondiente λ_k utilizando la expresión para obtener su aproximación. Se puede observar como cuando $N \ll K$, se aprecia una pendiente de 1 y cuando $K \geq N$, se aprecia una pendiente de 1/2. Este último efecto se aprecia mejor en la Figura 14, en la que se muestran en conjunto las gráficas para las expresiones teóricas. En la Figura 15 puede observarse el resultado obtenido al utilizar los autovalores estimados mediante monitorización discreta del dominio. Se observa el efecto del error numérico en el cálculo de los autovalores más pequeños. De las Figura 14 se deduce empíricamente la siguiente cota

$$\lambda_k \leq \mathbb{E} [|\xi_{k;N}|] \leq \sqrt{\lambda_k}. \quad (57)$$

Estas imágenes también sirven como demostración visual del teorema de Nyquist. Cuando las trayectorias no se monitorizan con frecuencia suficiente, se pierde información, que en este caso se refleja en una forma esencialmente diferente para valores pequeños de N , por debajo de la mitad de N_0 .

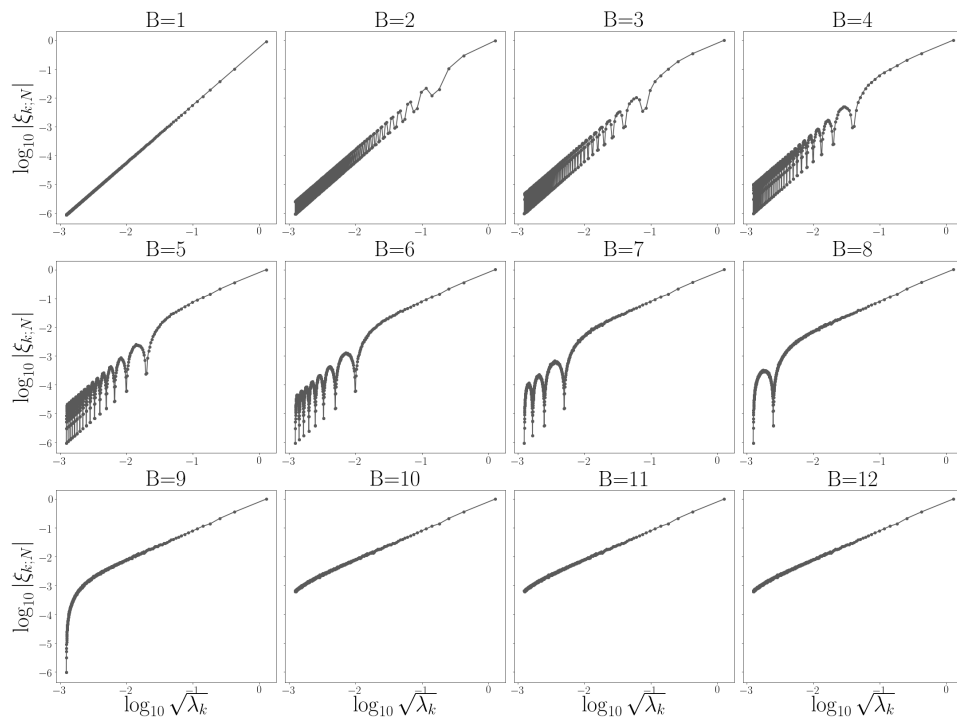


Figura 13: Expresión teórica de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k para las trayectorias de la muestra.

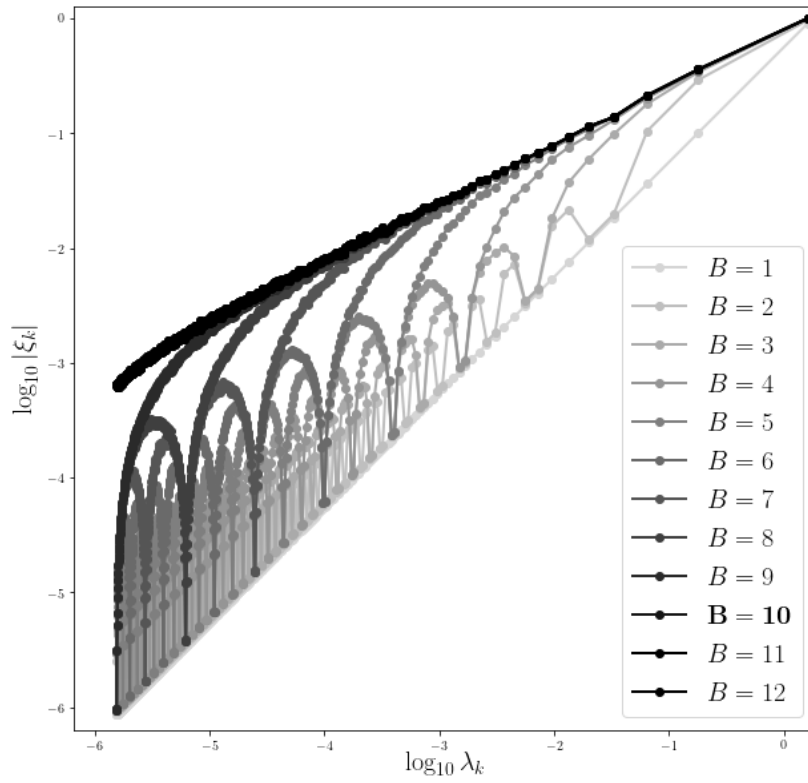


Figura 14: Expresión teórica de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k . Puede observarse como la región ocupada por los valores es la intersección entre los semiplanos $\log \lambda_k \leq \log |\xi_{k;N}|$ y $\log |\xi_{k;N}| \leq \frac{1}{2} \log \lambda_k$

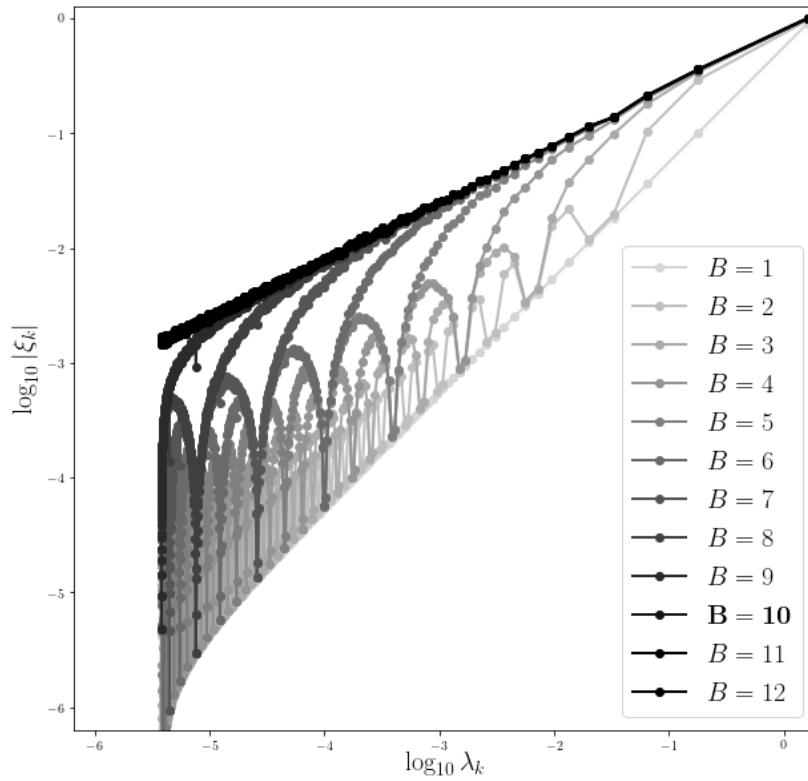


Figura 15: Aproximación por monitorización discreta del dominio de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k . Se puede visualizar el efecto del error de estimación de los autovalores del operador de covarianzas mediante la diagonalización de la matriz de la representación base.

Una visualización de los coeficientes en el RKHS de las trayectorias en función del tamaño de la representación se puede observar en la Figura 16.

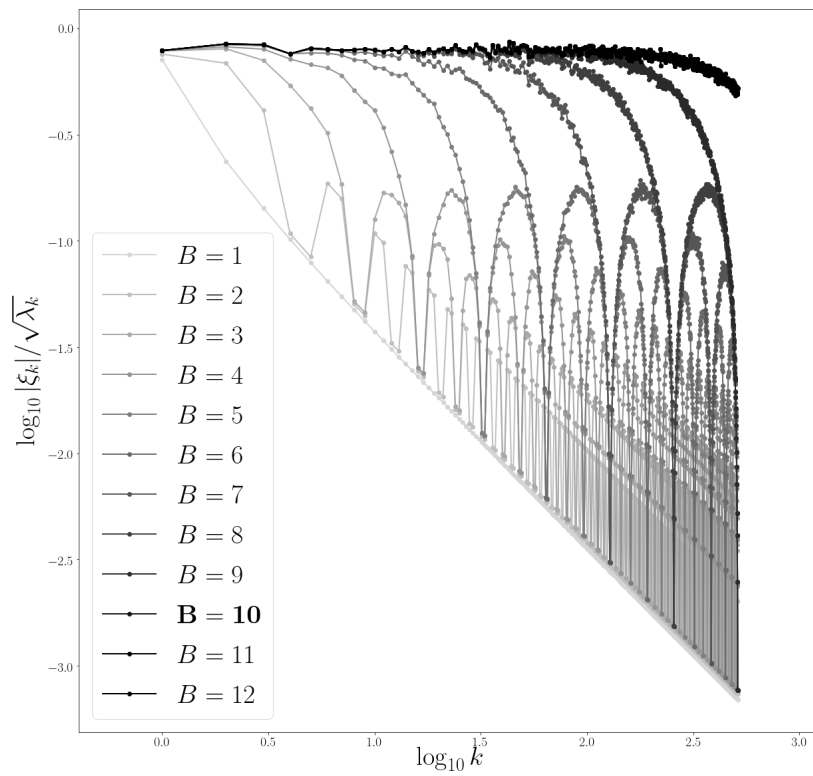


Figura 16: Media del valor absoluto los coeficientes en el RKHS de las trayectorias.

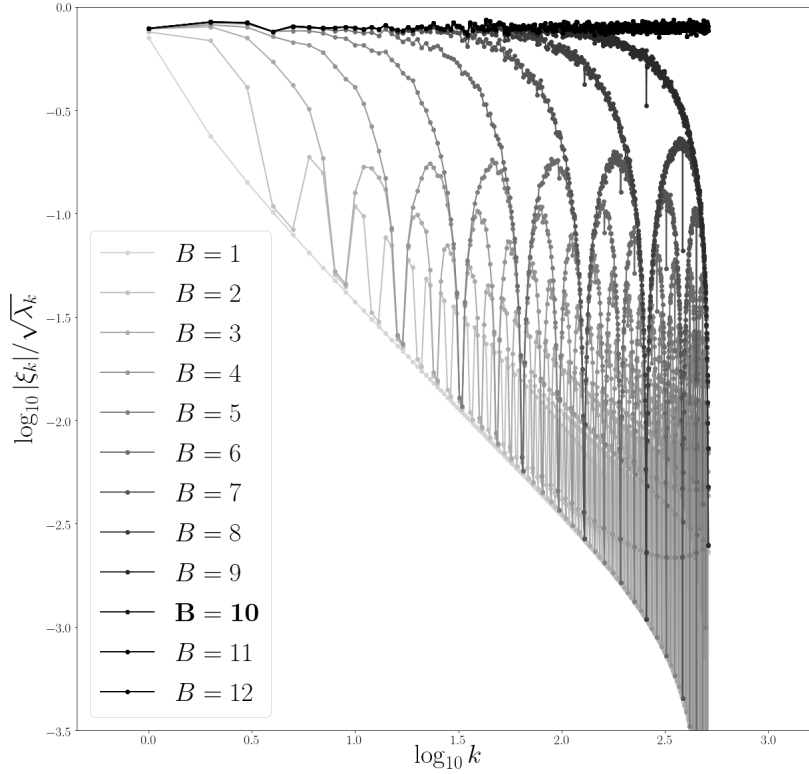


Figura 17: Aproximación mediante monitorización discreta del dominio de la media de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias.

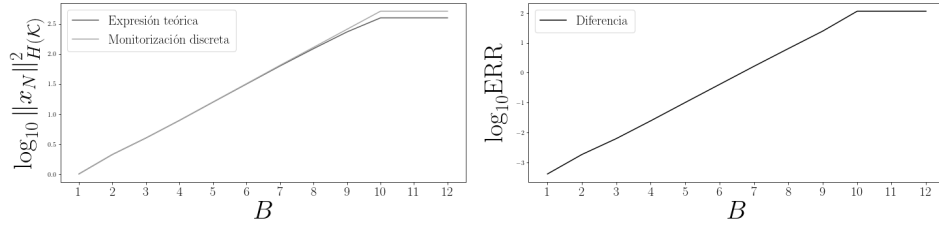
Como se ha mencionado anteriormente mediante la identidad de Parseval, se aproxima la norma en el RKHS de las versiones de las trayectorias como

$$\|x_N\|_{\mathcal{K}}^2 \simeq \sum_{k=1}^K \frac{\xi_{k,N}^2}{\sqrt{\lambda_k}}. \quad (58)$$

En la Figura 18 se puede observar la evolución de la media de la norma en el RKHS de las versiones $\|x_N\|_{\mathcal{K}}^2$ con el parámetro B , es decir para cada B se ilustra la aproximación mediante la muestra de trayectorias S

$$\mathbb{E} [\|X_N\|_{\mathcal{K}}^2] \simeq \frac{1}{|S|} \sum_{x \in S} \|x_N\|_{\mathcal{K}}^2 \quad (59)$$

De la Figura 18 se deduce empíricamente que la norma en el RKHS crece exponencialmente a medida que el tamaño de la monitorización aumenta.



(a) Media de la norma en el RKHS. (b) Error de aproximación.

Figura 18: 18a Media de la norma en el RKHS de las versiones de las trayectorias en función del tamaño del mallado temporal. 18b Valor absoluto de la diferencia entre el resultado teórico y la monitorización discreta.

También se observa cómo la diferencia entre las estimaciones obtenidas mediante la expresión teórica y la monitorización discreta aumenta exponencialmente con este tamaño. Este efecto se debe al cálculo de los autovalores más pequeños (λ_k para k grande), en la Figura 9 se puede apreciar como existe diferencias entre los métodos en la estimación de estos autovalores para valores grandes de k .

En la Figura 19 puede observarse la superficie que definen las medias de los valores absolutos de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias de la muestra situando los parámetros K y N en los ejes.

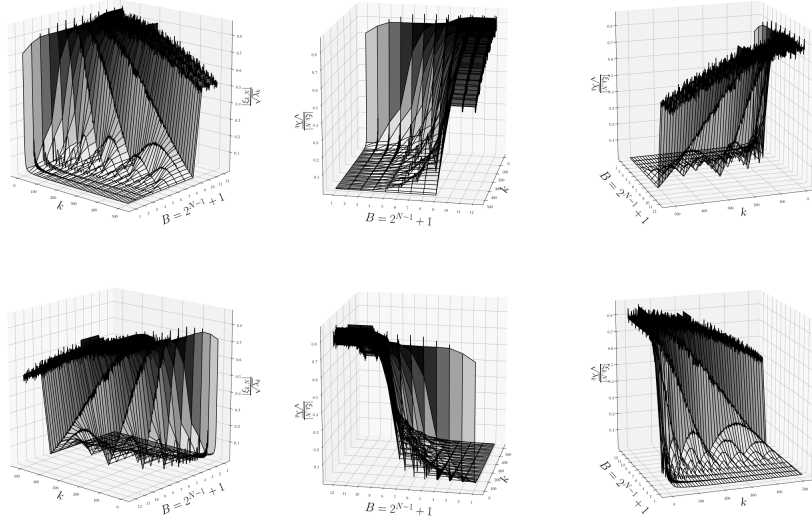


Figura 19: Coeficientes en el RKHS de las trayectorias de la muestra.

Para el proceso MB, cuyas trayectorias son no derivables en casi todo punto, se observa como los coeficientes en el RKHS de representaciones me-

dianter interpolantes crecen a medida que aumentamos el número de nodos utilizados en este interpolante. Estas representaciones son más regulares que las trayectorias originales, lo suficiente para estar en el RKHS con probabilidad 1, y a medida que aumentamos el número de nodos esta representación converge en $L^2[0, 1]$ a la trayectoria original. De manera paralela, la norma en el RKHS de estas representaciones diverge con el aumento de nodos, como es de esperar si estas representaciones convergen a la trayectoria original, para la cual esta norma no está definida.

4.3. Puente Browniano

El PB es un PG no estacionario. Se puede interpretar como un MB condicionado a $X(1) = 0$. La función de autocovarianza del PB es la siguiente

$$\gamma(s, t) = \sigma^2 (\min(s, t) - st) \quad (60)$$

En la Figura 20 se muestra el núcleo correspondiente. Se puede observar que existe una cierta simetría temporal, si $X(t)$ es un PB para $t \in [0, 1]$, $X(1 - t)$ también lo es. Este proceso al igual que el MB presenta puntos degenerados. En particular $X(0)$ y $X(1)$ tienen varianzas nulas. En este caso se considera en lugar del intervalo $[0, 1]$, el intervalo $(0, 1)$ evitando estos momentos degenerados.

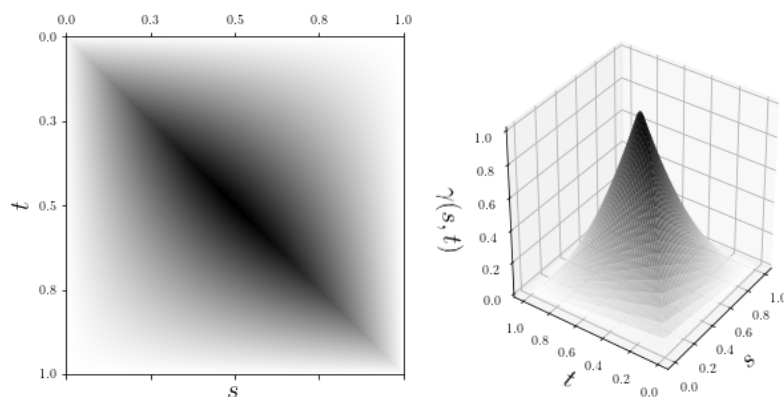


Figura 20: Visualización de la función de autocovarianzas de un PB con amplitud $\sigma = 2$.

Al igual que en el caso del MB, este es un proceso para el que se conoce fórmula cerrada tanto para los autovalores del operador de covarianza del proceso como para la base correspondiente de autofunciones. Para $k = 0, 1, \dots$ se tienen las autofunciones

$$e_k = \sigma^2 \sin(k\pi t), \quad (61)$$

con los autovalores

$$\lambda_k = \frac{\sqrt{2}\sigma^2}{k^2\pi^2}. \quad (62)$$

En la Figura 21 pueden visualizarse algunas autofunciones de la base y el decaimiento de los autovalores calculados. Comparando con el espectro de un proceso MB ilustrado en la Figura 9, se puede comprobar cómo el decaimiento de los autovalores es similar, mientras que existen diferencias en las autofunciones. La base de autofunciones del PB refleja la restricción adicional del proceso $X(1) = 0$. Ambos procesos tienen una estructura común en el espectro. Ambos cumplen la expresión para las autofunciones

$$e_k = \sigma^2 \sin(\omega_k t), \quad (63)$$

con los autovalores

$$\lambda_k = \frac{\sqrt{2}\sigma^2}{\omega_k^2}, \quad (64)$$

con $\omega_k \sim k$.

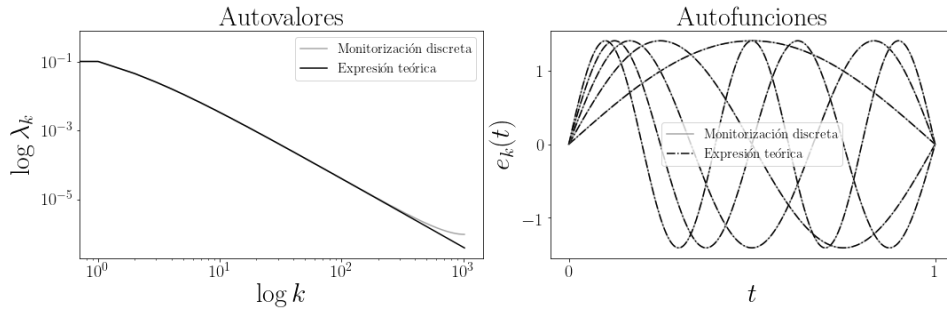


Figura 21: Decaimiento de los autovalores y primeros elementos de la base de autofunciones de un PB.

En la siguiente figura puede observarse una muestra simulada de trayectorias. Se puede apreciar visualmente comparando con la Figura 10 que la irregularidad de las trayectorias de este proceso es efectivamente similar a las del MB.

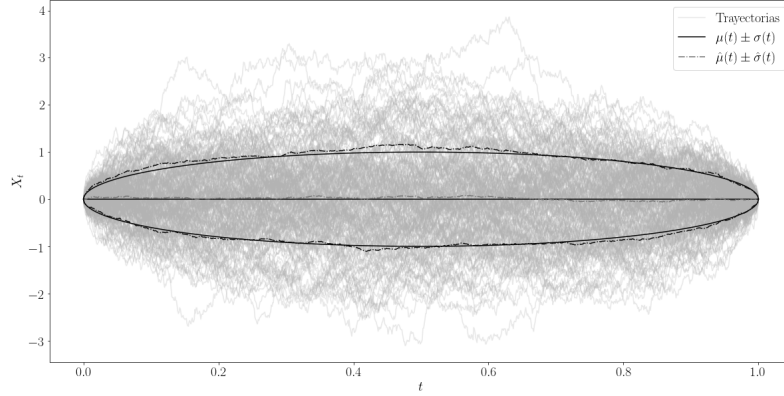


Figura 22: Ejemplos de trayectorias simuladas para un PB centrado con $\sigma = 2$.

A la hora de obtener la representaciones mediante monitorización discreta de las trayectorias, existe una diferencia con respecto al resto de procesos. Dado que al cumplir las trayectorias la restricción $x(t_1 = 0) = x(t_2 = 1) = 0$ tomar únicamente una monitorización en dos puntos da como resultado siempre $x_{N=2}(t) \equiv 0, t \in [0, 1]$ para este proceso. En la Figura 23 se pueden observar representaciones mediante interpolantes para los distintos tamaños considerados $N = 3, 5, \dots, 2^{B_{max}-1} + 1$

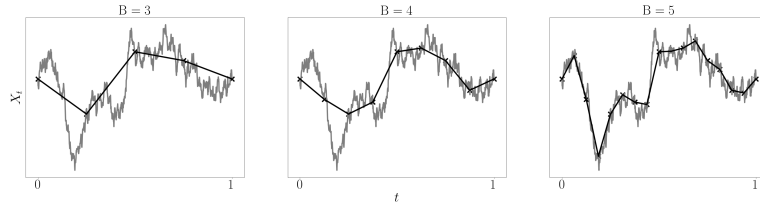
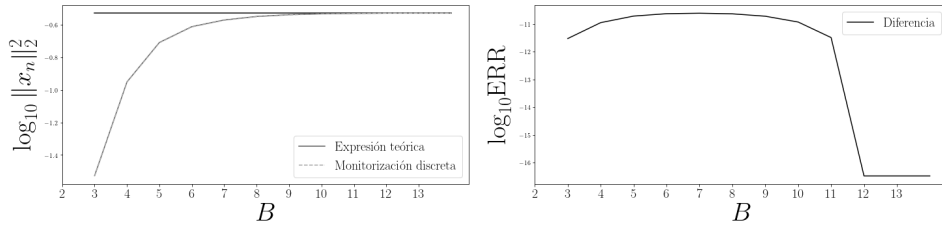


Figura 23: Ejemplos de representación mediante interpolantes lineales para las trayectorias.

Igual que en el caso anterior, el crecimiento de la media de la norma de las trayectorias en $L^2[0, 1]$ es monótono con el número de nodos en la representación, ilustrado en la Figura 24a. También se puede observar en la Figura 24b la evolución del error en función del tamaño de la representación. De esta gráfica se deduce empíricamente que la monitorización discretizada aproxima razonablemente bien en los mallados utilizados, los errores relativos son insignificantes. Recordemos que estas normas son calculadas utilizando la identidad de Parseval, luego sumando los cuadrados de los coeficientes calculados en la base de autofunciones de $L^2[0, 1]$.



(a) Media de la norma $L^2[0,1]$ de las versiones de las trayectorias. (b) Error de aproximación de la monitorización discreta del dominio.

Figura 24: Media de la norma $L^2[0,1]$ de las versiones de las trayectorias en función del tamaño del mallado temporal.

En la Figura 25 se puede ver para cada uno de los valores del parámetro B , el coeficiente $\xi_{k;N}$ frente al correspondiente λ_k utilizando la expresión teórica para obtener su aproximación. Para valores pequeños de k , se observan oscilaciones en forma de arco que progresivamente se van amortiguando a medida que aumenta el tamaño de la monitorización discreta para las trayectorias. También se observa que a partir del tamaño base ($B = 10$), el resultado obtenido es el mismo, dado que estas representaciones son todas equivalentes.

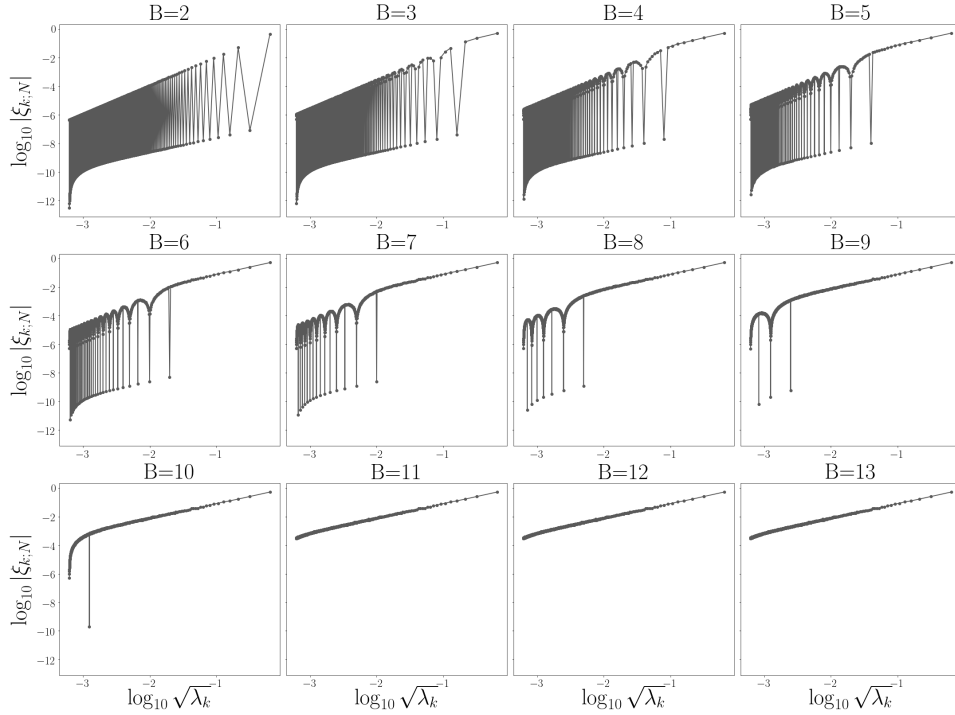


Figura 25: Expresión analítica de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$.

En la Figura 26 se pueden apreciar solapadas las distintas gráficas de la Figura 25. Se observa que existe cierto patrón en estas oscilaciones que ocurren para tamaños pequeños de la discretización. Se observa empíricamente que para tamaños de la discretización igual o superiores a la representación base, existe una tendencia

$$|\xi_{k;N}| \sim \sqrt{\lambda_k}. \quad (65)$$

También se observan ciertos picos en los resultados que no se observaban en el caso del MB, en particular en la mitad de cada oscilación. En la Figura 28 pueden visualizarse, para $N = 5, 9, 17$ respectivamente las autofunciones correspondientes a estas singularidades. Se muestran tanto las correspondientes al final de cada oscilación como las correspondientes al pico que se produce en la mitad de cada oscilación. Obsérvese que la particularidad de estos elementos de la base es que $e_k(t_n) = 0, \forall n = 1, 2, \dots, N$, es decir, se anulan en cada nodo de la monitorización discreta.

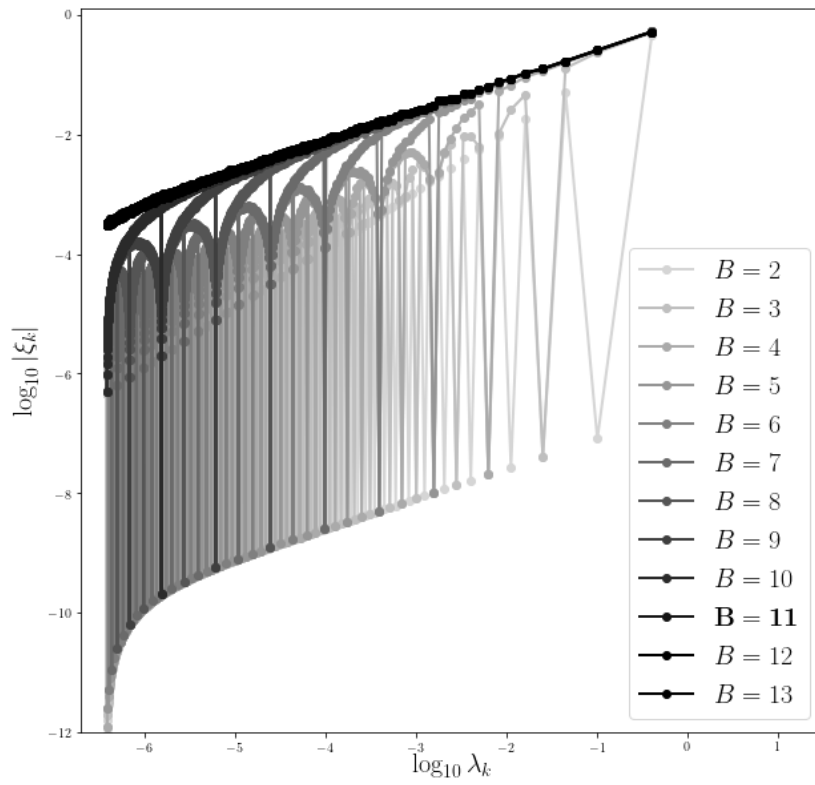


Figura 26: Expresión analítica de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k .

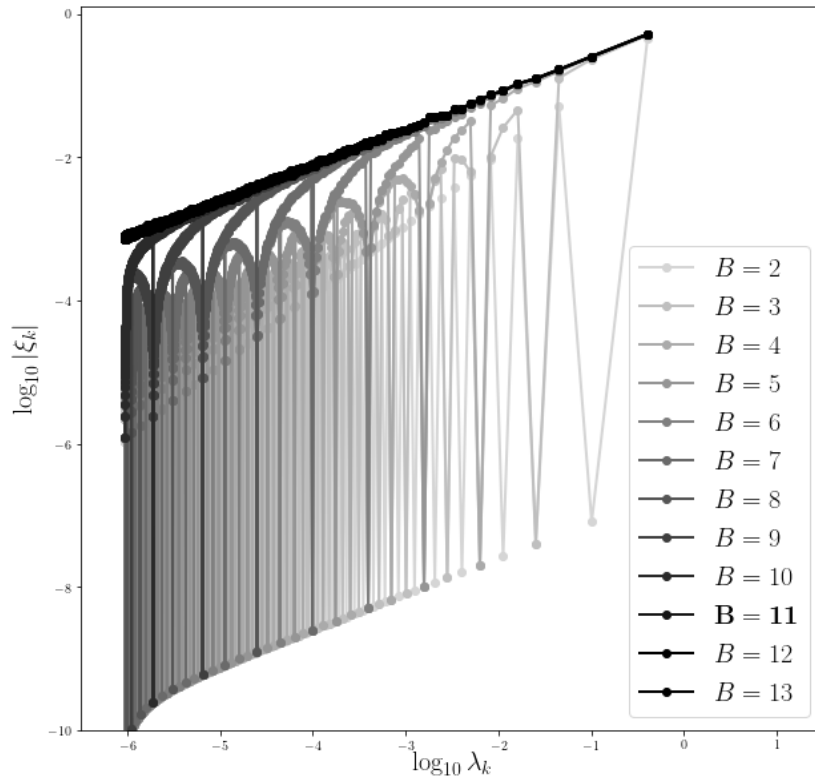


Figura 27: Detalle para la aproximación multivariante de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k .

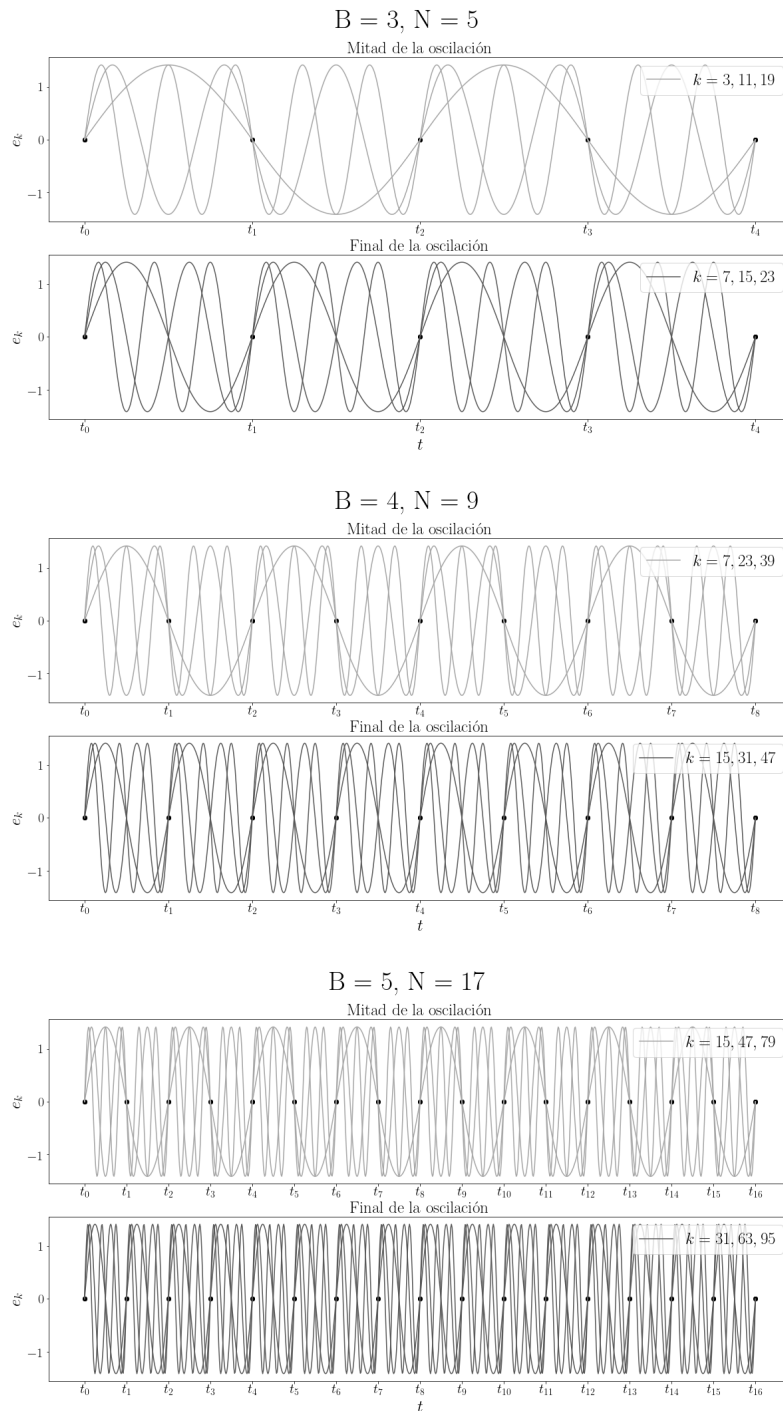


Figura 28: Elementos de la base de autofunciones correspondientes a los picos mostrados en la gráficas.

En la Figura 29 se ilustra la evolución de los coeficientes en el RKHS de las representaciones de las trayectorias de la muestra a medida que aumenta el tamaño de la monitorización discreta de la representación.

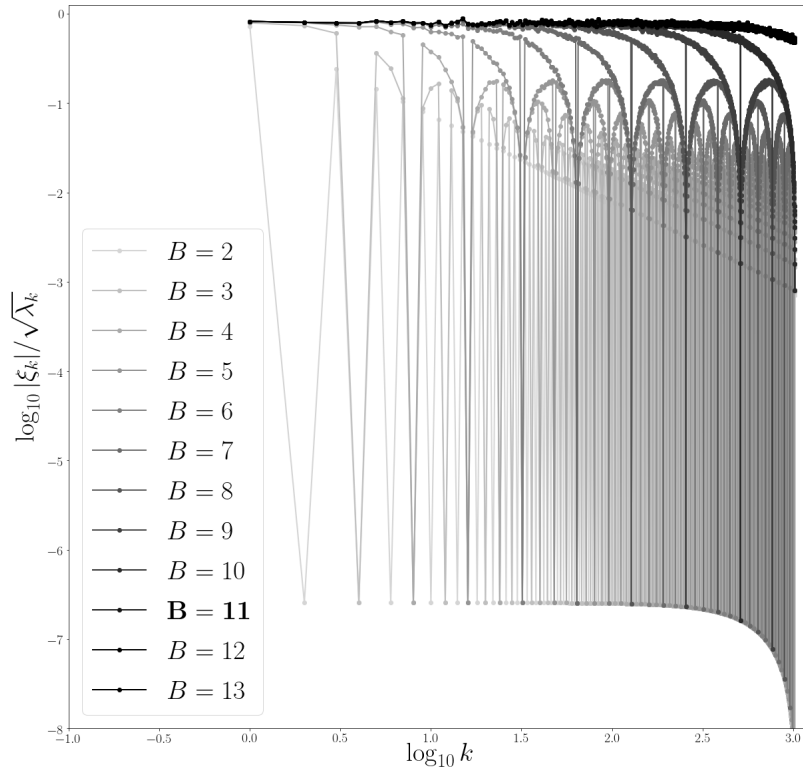
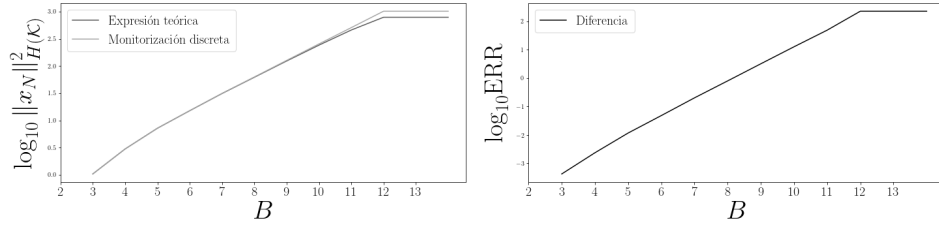


Figura 29: Comparativa de la media de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias. En este caso se observa la desigualdad $\hat{\xi}_{k,N}^2 \leq \lambda_k$.

En la figura 30 se puede observar la media de las normas en el RKHS de las trayectorias de la muestra. Se observa igual que en el caso del MB que el crecimiento de la norma de las trayectorias es exponencial con el tamaño de la representación, así como el error que se comete al utilizar la aproximación por discretización del dominio.

En la Figura 31 puede observarse la superficie que definen las medias de los valores absolutos de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias de la muestra situando los parámetros K y N en los ejes. Se puede apreciar que la superficie es bastante similar a la obtenida en el caso anterior del MB, con la salvedad de las singularidades ya mencionadas e ilustradas.



(a) Media de la norma en el RKHS. (b) Error de aproximación.

Figura 30: 30a Media de la norma en el RKHS de las versiones de las trayectorias en función del tamaño del mallado temporal. 30b Valor absoluto de la diferencia entre el resultado teórico y la monitorización discreta. Se puede observar un crecimiento exponencial tanto en el valor de la norma como en el error que comete la aproximación mediante monitorización discreta.

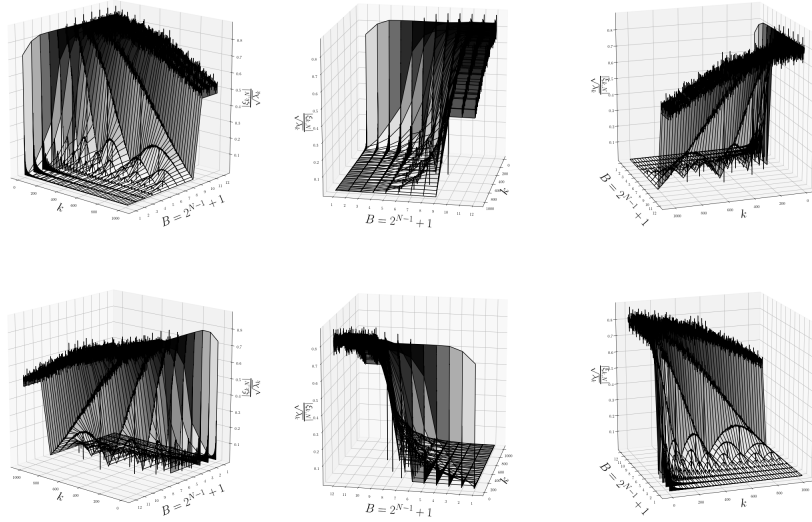


Figura 31: Coeficientes en el RKHS de las trayectorias de la muestra.

Para el PB se observan unos resultados muy similares a los obtenidos en el MB, debido a que los procesos tienen un espectro con una estructura muy similar. Cabe destacar como sin embargo para tamaños pequeños de monitorizaciones discretas, la estructura de los coeficientes en el RKHS es bastante más irregular que en caso anterior. Este efecto está causado por la combinación de la estructura de las autofunciones y la estructura de los mallados del experimento. En la Figura 28 se puede observar como estas oscilaciones pueden explicarse por el valor que toman un subconjunto de elementos de esta base de autofunciones en los nodos de interpolación. Para los coeficientes que resultan mínimos locales en las oscilaciones, los elementos

correspondientes de la base toman el valor 0 en cada uno de los tiempos monitorizados de la malla.

4.4. Núcleo Exponencial

Un proceso de núcleo exponencial es aquel para la cual se tiene la siguiente función de autocovarianzas

$$\gamma(s, t) = \frac{\sigma^2}{2\theta} e^{-\theta|t-s|}. \quad (66)$$

Es un proceso estacionario, límite de un proceso Ornstein-Uhlenbeck en $t \in \mathbb{R}$ para tiempos grandes, cuando asintóticamente desaparece la componente no estacionaria. El núcleo o función de covarianzas de un proceso Ornstein-Uhlenbeck es

$$\gamma(s, t) = \frac{\sigma^2}{2\theta} \left(e^{-\theta|t-s|} - e^{-\theta(t+s)} \right), \quad (67)$$

y se puede observar que para $t + s$ grande el núcleo Ornstein-Uhlenbeck es el núcleo de un exponencial, que nosotros limitamos al dominio $[0, 1]$. En la Figura 32 se puede observar una visualización de una función de covarianzas de este proceso.

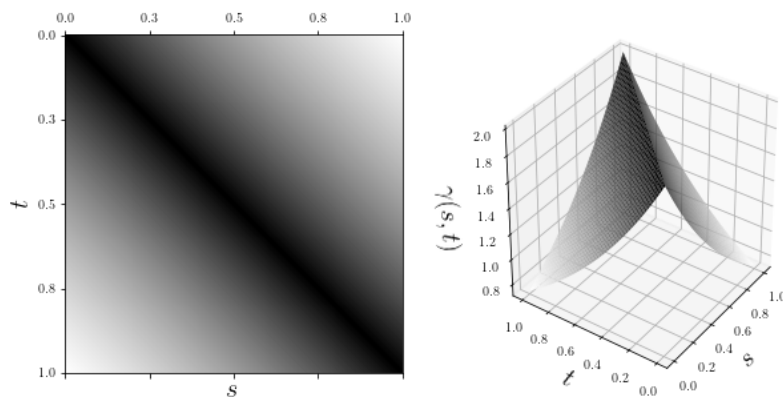


Figura 32: Visualización de la función de autocovarianzas de un proceso exponencial con parámetros $\sigma = 2$ y $\theta = 2$

Por el Teorema de Bochner [10], sabemos que si un PG es estacionario sus autofunciones son la base de Fourier

$$e_k(t) = e^{-2\pi i k s}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (68)$$

es decir la representación espectral se obtiene mediante la transformada de Fourier. Como en particular los operadores de covarianzas son Hermíticos,

estas autofunciones son funciones reales y por lo tanto la parte real de la expresión anterior,

$$e_k(t) = \cos(2\pi ks), \quad k = 1, 2, \dots \quad (69)$$

Los autovalores bajo las hipótesis de Hermiticidad se obtienen como la transformada de Fourier del núcleo del proceso

$$\lambda_k = \int_0^1 e^{-2\pi i ks} \gamma(s, 0), \quad k = 1, 2, \dots \quad (70)$$

En la Figura 33 pueden visualizarse algunas autofunciones de la base y el decaimiento de los autovalores calculados. Se puede observar que la pendiente de la gráfica, igual que en el caso de los dos procesos anteriores indica que existe una tendencia $\lambda_k \sim k^{-2}$. En este caso particular, la estimación numérica mediante el uso de la expresión teórica de los autovalores presenta grandes errores numéricos, que se manifiestan como fuertes irregularidades ilustradas en la Figura 34. Debido a esto consideraremos únicamente la estimación mediante monitorización discreta del dominio para estos autovalores, ya estas diferencias son críticas en los resultados. También se observan diferencias entre la estimación de las funciones de la base mediante la monitorización discreta del dominio y la expresión teórica.

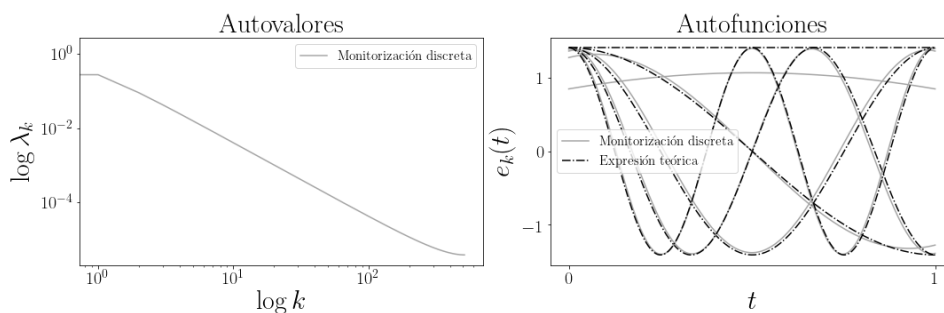


Figura 33: Decaimiento de los autovalores y primeros elementos de la base de autofunciones de un proceso de núcleo exponencial de constantes $\sigma = 2$ y $\theta = 2$.

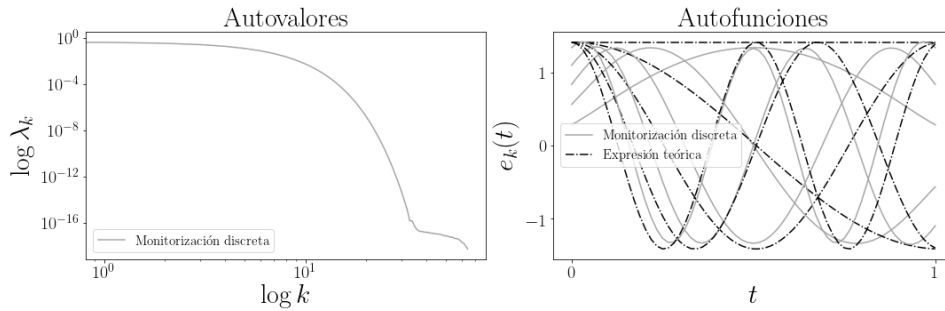


Figura 34: Errores en la estimación de los autovalores mediante la expresión teórica.

En la Figura 35 se puede observar una muestra simulada de trayectorias para este proceso. Recordemos que estas trayectorias en su representación base son una representación discreta de tamaño $N_0 = 1025 = 2^{10} + 1$, que se utiliza para construir la representación base de estas trayectorias.

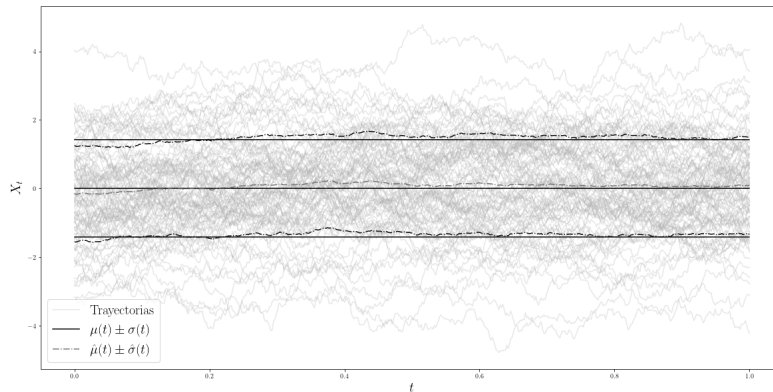


Figura 35: Ejemplos de trayectorias simuladas para un proceso de núcleo exponencial centrado con $\sigma = 2$ y $\theta = 2$.

Igual que en casos anteriores, el crecimiento de la norma en $L^2[0, 1]$ es monótono con el número de nodos en la representación. Este crecimiento se ilustra en la Figura 36.

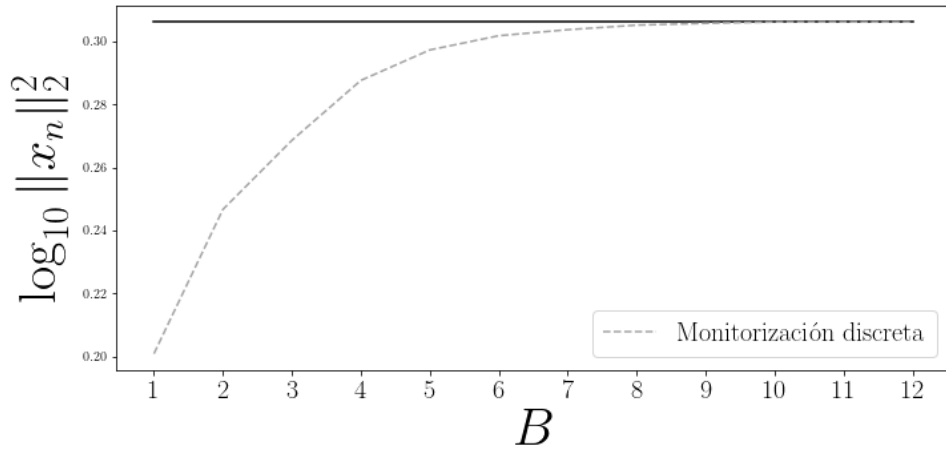


Figura 36: Media de la norma $L^2[0, 1]$ de las versiones de las trayectorias simuladas de un proceso de núcleo exponencial en función del número de nodos en la representación.

En la Figura 37 se puede ver para cada valor del parámetro B el coeficiente $\xi_{k;N}$ frente al valor correspondiente λ_k . Igual que en casos anteriores, existen ciertas oscilaciones en estos valores. Además se observan picos tanto en la mitad de estas oscilaciones como al final de ellas igual que en el caso del PB, pero en este caso son máximos locales. En la Figura 39 pueden visualizarse las autofunciones correspondientes a estos valores irregulares, para distintos tamaños de la monitorización discreta.

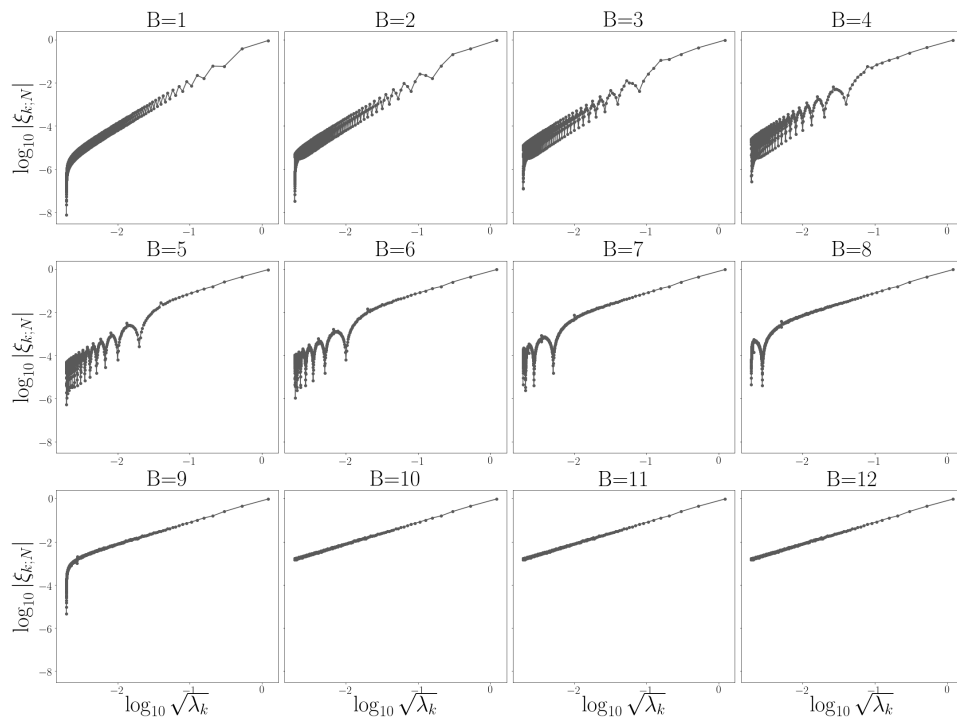


Figura 37: Aproximación multivariante de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k para las trayectorias de la muestra simulada.

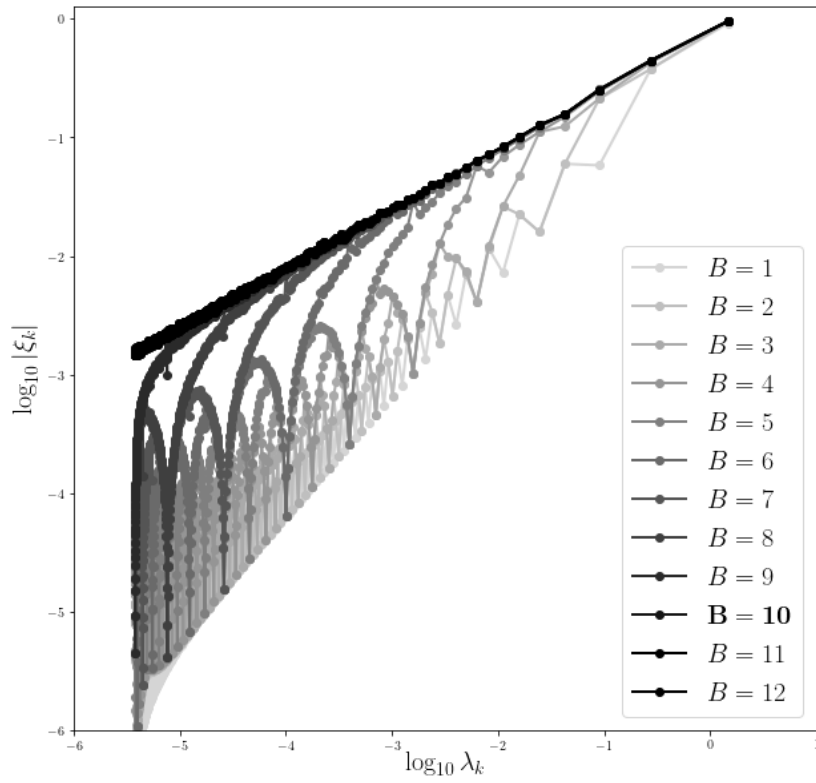


Figura 38: Expresión teórica de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k .

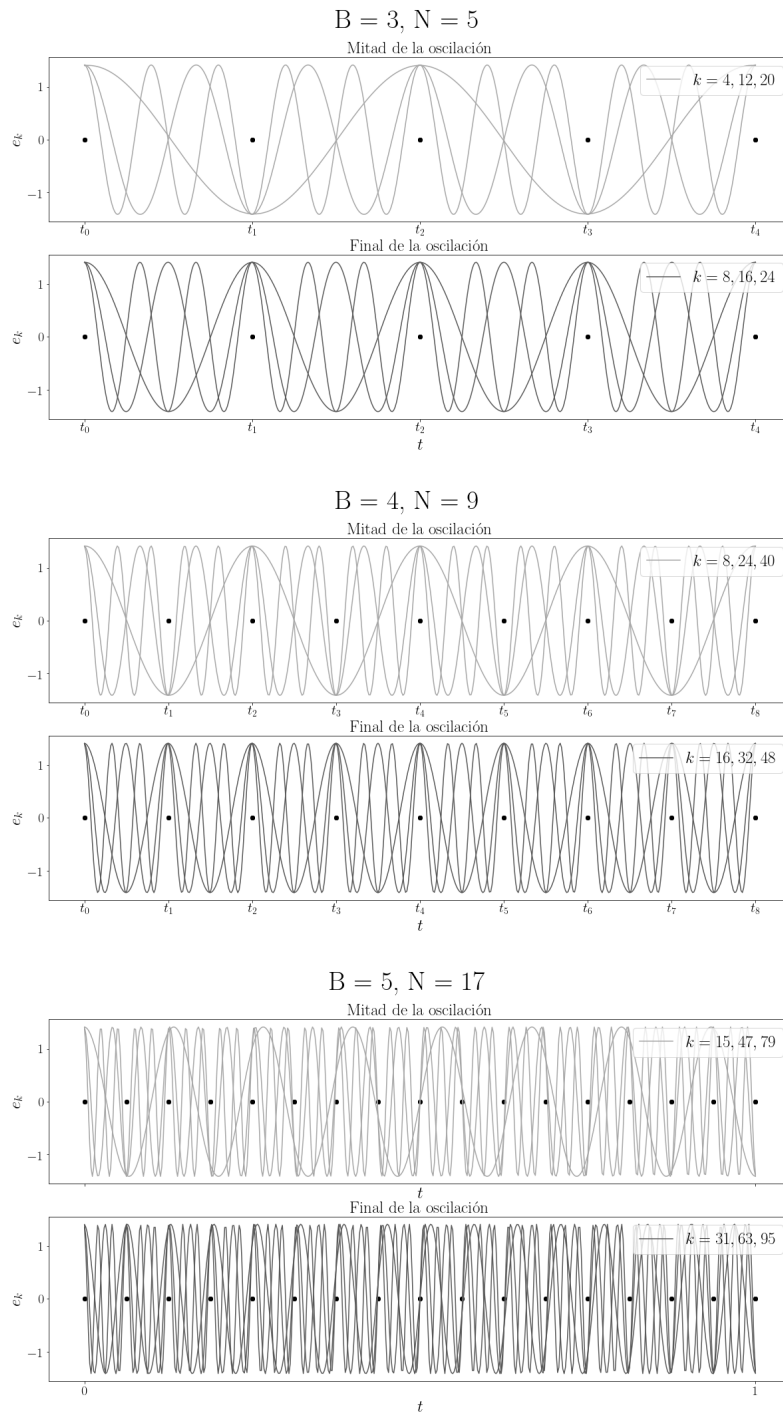


Figura 39: Elementos de la base de autofunciones correspondientes a los picos mostrados en la gráficas.

En la Figura 40 se muestran los coeficientes en el RKHS de las representaciones de la trayectorias de la muestra con el número de nodos de la representación.

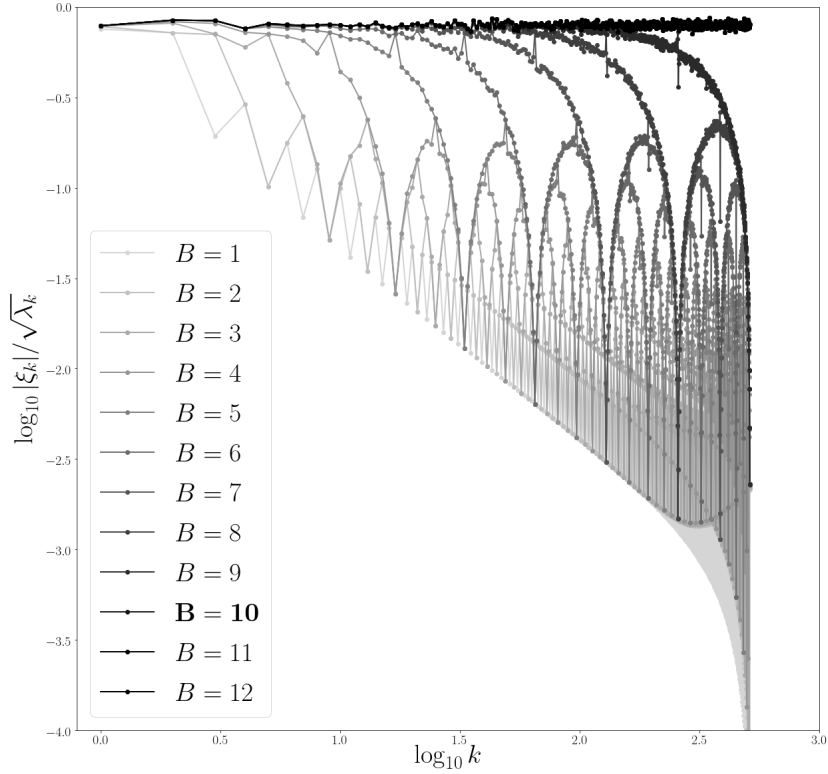


Figura 40: Media de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias. De nuevo se observa la desigualdad $\hat{\xi}_{k,N}^2 \leq \lambda_k$.

En la figura 41 de nuevo se puede observar como crece la aproximación de norma en el RKHS mediante las trayectorias de la muestra simulada. Empíricamente se observa un crecimiento exponencial, que se prolongaría de ir añadiendo nodos a las representaciones.

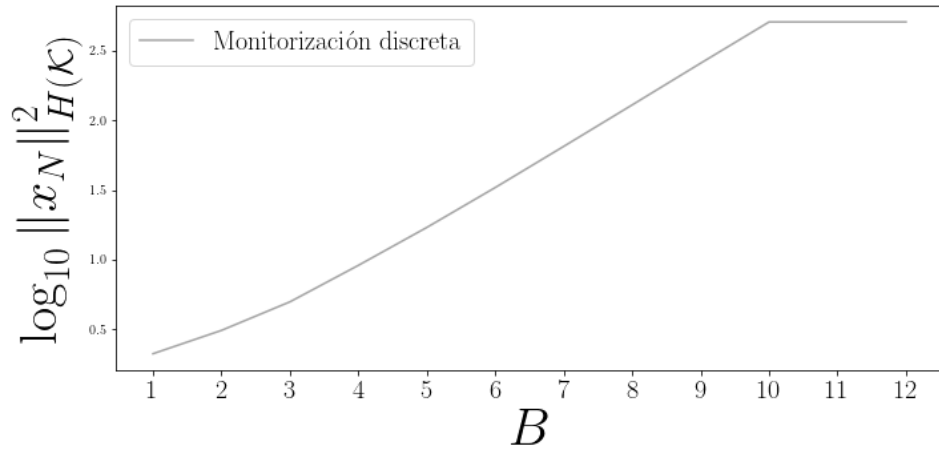


Figura 41: Media de la norma en el RKHS de las versiones de las trayectorias con B .

En la Figura 42 puede observarse la superficie que definen las medias de los valores absolutos de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias de la muestra situando los parámetros K y N en los ejes. De nuevo la superficie es bastante parecida a las obtenidas en casos previos. En particular se observa que para los índices con autovalores más pequeños y un número de nodos al menos el tamaño de la representación los valores siguen una estructura distinta.

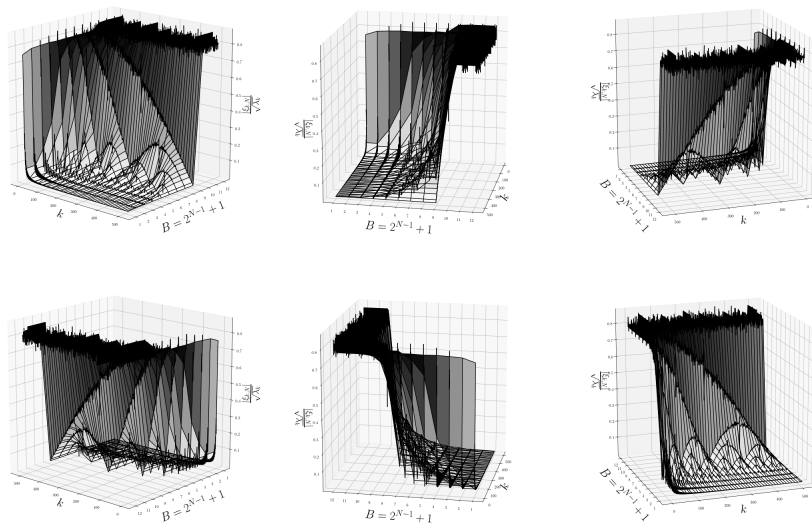


Figura 42: Coeficientes en el RKHS de las trayectorias de la muestra.

Para un PG con núcleo exponencial se observan resultados similares a los obtenidos con los procesos MB y MB. La estructura de los coeficientes de las representaciones por interpolantes es similar, la evolución a medida que se aumentan el número de nodos en la monitorización es bastante parecida a los casos anteriores. Cabe destacar como en este caso las autofunciones causantes de las oscilaciones siguen un patrón similar al caso del PB. La principal diferencia es la existencia de máximos locales en lugar de los mínimos locales. Donde en el caso anterior se daba un mínimo local, para este proceso se da un máximo local. Para el PB los elementos de la base correspondiente a los picos tomaban el valor 0 en cada nodo de la monitorización discreta, se comprueba que en este caso los elementos de la base toman valor 1.

4.5. Función de Bases Radiales

Un proceso con núcleo de Función de Bases Radiales (RBF) tiene la siguiente función de autocovarianzas

$$\gamma(s, t) = \frac{\sigma^2}{2l} e^{-\frac{|t-s|^2}{2l}}. \quad (71)$$

Es un proceso estacionario, en la Figura 43 puede visualizarse un ejemplo de función de autocovarianzas.

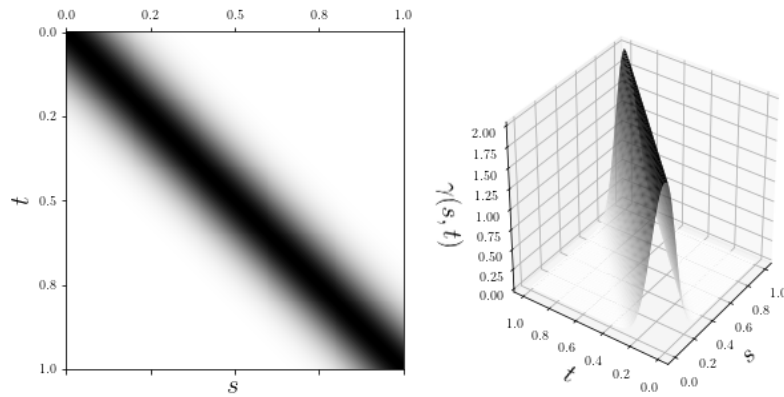


Figura 43: Visualización de la función de autocovarianzas de un proceso RBF con parámetros $\sigma = 2$ y $l = 1$.

Este proceso es radicalmente distinto a los anteriores. La regularidad de las trayectorias de un PG con núcleo RBF son $C^\infty[0, 1]$ luego tienen infinitas derivadas. Esta supone una gran diferencia con respecto a los procesos anteriores, en las que las trayectorias no tienen tanta regularidad. Al ser el

proceso estacionario la base de autofunciones es la base de Fourier de nuevo. En este caso, el decaimiento de los autovalores λ_k es mucho más rápido que en los procesos anteriores. En particular para este proceso, la obtención de autovalores para un tamaño de la representación base $N_0 = 1025 = 2^{10} + 1$ presenta errores catastróficos para los autovalores más pequeños ilustrados en la Figura 45. Debido a este efecto, el tamaño de la representación base en este caso se reduce a $N_0 = 1025 = 2^5 + 1 = 33$. Para tamaños mayores el error en las estimaciones de los autovalores son críticos. El espectro estimado mediante la monitorización discreta, ilustrado en la Figura 44 presenta diferencias en las autofunciones calculadas, frente a la base teórica.

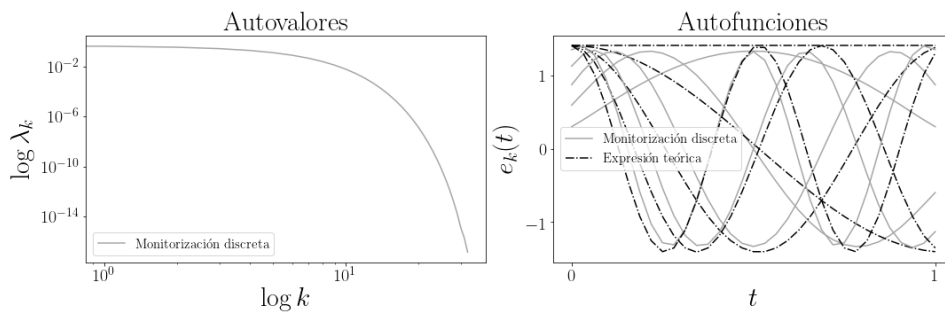


Figura 44: Decaimiento de los autovalores y primeros elementos de la base de autofunciones de un proceso de núcleo RBF.

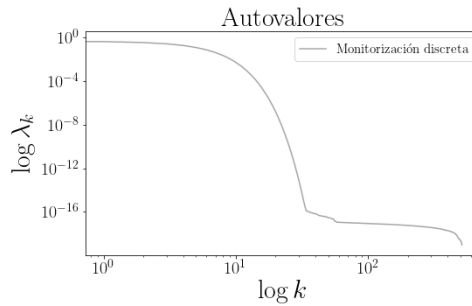


Figura 45: Estimación de los autovalores de un proceso con núcleo RBF para tamaño de representación base $N_0 = 1025 = 2^{10} + 1$. Se observa como la estimación es incorrecta excepto para aquellos con índice más bajo, por debajo de $k = 100$.

En la Figura 46 puede observarse una muestra simulada para este proceso. Se puede observar como las trayectorias son mucho más suaves que en casos anteriores.

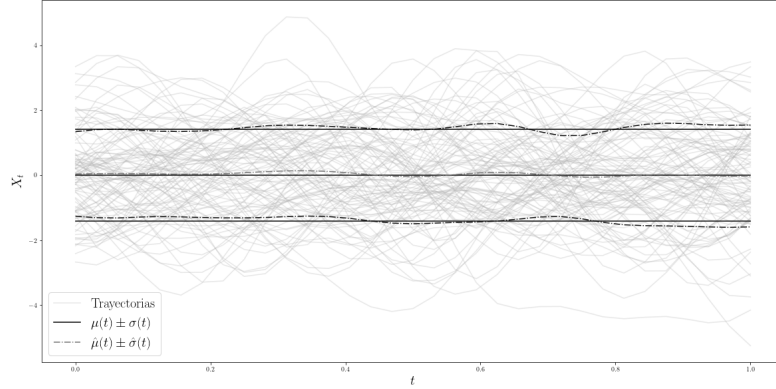


Figura 46: Ejemplos de trayectorias simuladas para un proceso de núcleo RBF centrado con $\sigma = 2$ y $\theta = 1$.

Igual que en los casos anteriores, el crecimiento de la norma en $L^2[0, 1]$ es monótono con el número de nodos en la representación, ilustrado en la Figura 47, si bien la manera en que crece es distinta a la de los procesos anteriores de trayectorias irregulares. Para este proceso, dado que las trayectorias son tan regulares, se da la situación que las representaciones mediante interpolantes son menos regulares que las propias trayectorias originales. Al ser las trayectorias $C^\infty[0, 1]$, cualquier representación de este tipo será menos suave.

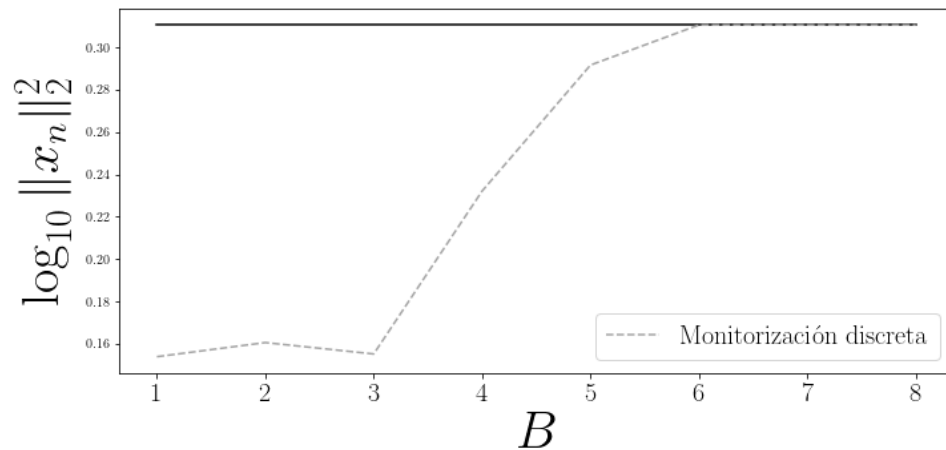


Figura 47: Media de la norma $L^2[0, 1]$ de las versiones de las trayectorias simuladas de un proceso de núcleo RBF en función del número de nodos en la representación.

En la Figura 48 se puede ver para cada valor del parámetro B el coeficiente $\xi_{k;N}$ frente al valor correspondiente λ_k .

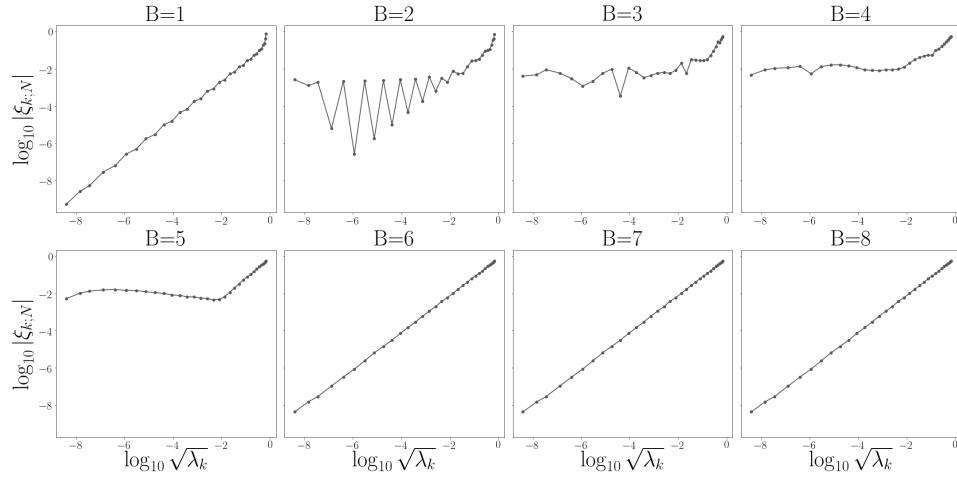


Figura 48: Aproximación multivariante de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k para las trayectorias de la muestra simulada.

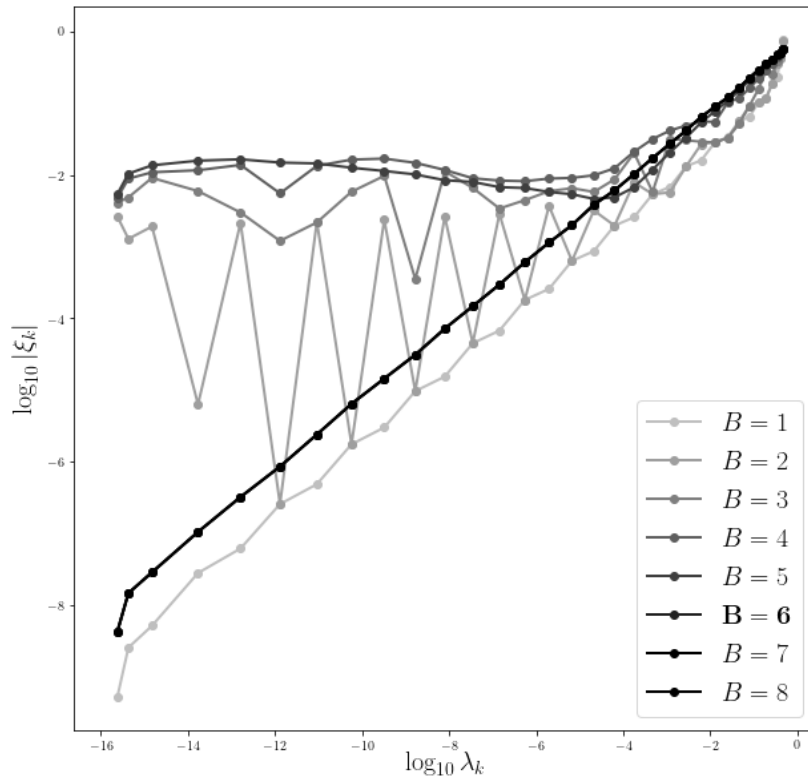


Figura 49: Expresión analítica de las medias de valores absolutos de coeficientes de la representación de Karhunen-Loève $\xi_{k;N}$ para distintos valores de B , frente al valor del autovalor correspondiente λ_k .

En la Figura 50 se muestran los coeficientes en el RKHS de las representaciones de la tras trayectorias de la muestra frente al número de nodos de la representación.

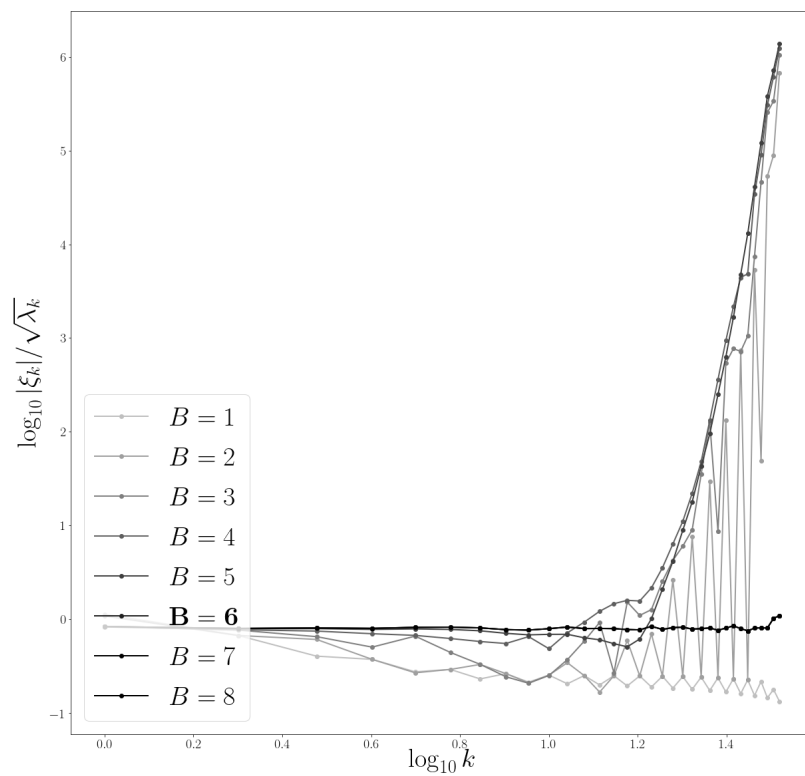


Figura 50: Comparativa de la media de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias. De nuevo se observa la desigualdad $\hat{\xi}_{k,N}^2 \leq \lambda_k$.

En la figura 51 de nuevo se puede observar como crece la aproximación de norma en el RKHS mediante las trayectorias de la muestra simulada. Se puede observar como para este proceso, la norma de las representaciones decrecen a partir de un tamaño. Esto se debe a que para este proceso con trayectorias suaves, las interpolaciones son más irregulares que las propias trayectorias originales.

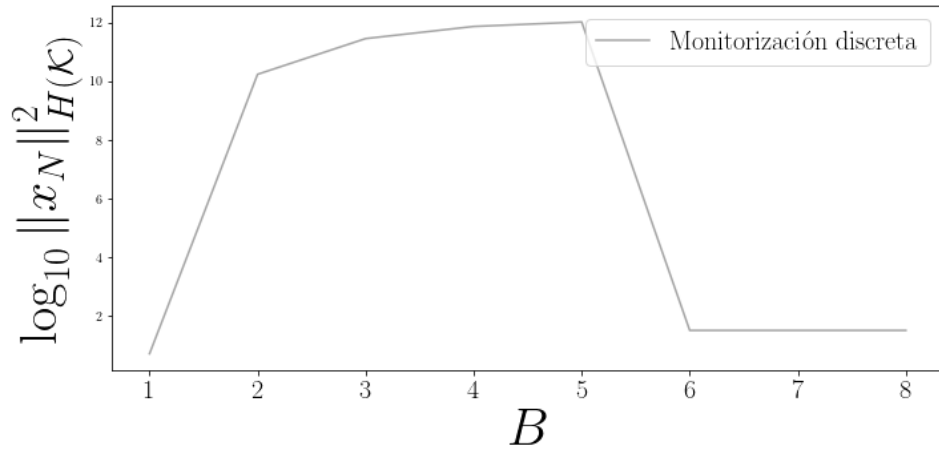


Figura 51: Media de la norma en el RKHS de las versiones de las trayectorias con B .

En la Figura 52 puede observarse la superficie que definen las medias de los valores absolutos de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias de la muestra situando los parámetros K y N en los ejes. Se puede apreciar que la superficie es radicalmente distinta a las anteriores. En este caso, en vez de obtener valores crecientes con el número de nodos de las representaciones, se puede apreciar como para las monitorizaciones discretas los valores son mayores. Esto se debe a que estas representaciones son más irregulares que las propias trayectorias.

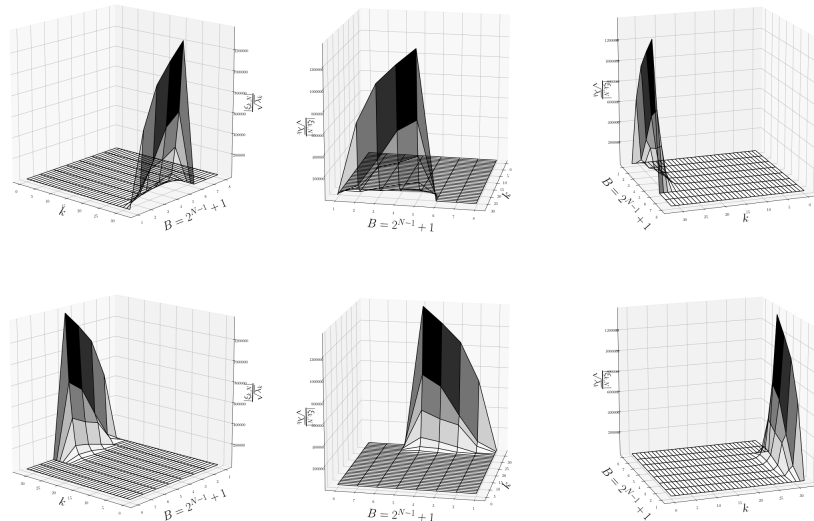


Figura 52: Coeficientes en el RKHS de las trayectorias de la muestra.

Las trayectorias de un PG con núcleo RBF son suaves, y por lo tanto una representación por B-splines siempre tendrá menos regularidad que la trayectoria original. En los experimentos, el rápido decaimiento de los autovalores de este tipo de procesos limita fuertemente la dimensionalidad en la que se puede trabajar. En la Figura 45 se puede comprobar como el error numérico al estimar el centésimo autovalor ya es significativo.

4.6. Matérn

Un proceso de matern es aquel para la cual se tiene la siguiente función de autocovarianzas

$$\gamma(s, t) = \sigma^2 \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\sqrt{2\nu} \frac{|s-t|}{\rho} \right)^\nu K_\nu \left(\sqrt{2\nu} \frac{|s-t|}{\rho} \right), \quad (72)$$

donde ν, ρ y σ son parámetros positivos de la distribución, Γ es la función gamma de Euler y K_ν es la función de Bessel modificada de primer tipo de orden ν . Se puede considerar en realidad la familia paramétrica de procesos de Matérn, dado que la naturaleza del proceso depende fuertemente del parámetro ν . Se tratan de un procesos estacionarios, y sirven como generalización para los núcleos exponencial y RBF. Para el caso particular en el que $\nu = p + \frac{1}{2}$ para algún $p \in \mathbb{N}$ este núcleo toma la siguiente expresión en forma de producto de un polinomio de orden p y una función exponencial [14]

$$\gamma(s, t) = \sigma^2 e^{\left(-\frac{\sqrt{2p+|s-t|}}{\rho}\right)} \frac{p!}{2p!} \sum_{i=0}^p \frac{(p+i)!}{i!(p-i)!} \left(\frac{2\sqrt{2p+|s-t|}}{\rho} \right)^{p-i} \quad (73)$$

Se puede comprobar que tomando $\nu = \frac{1}{2}$ se obtiene

$$\gamma(s, t) = \sigma^2 e^{-\frac{|s-t|}{\rho}}, \quad (74)$$

que es la expresión de un núcleo exponencial, mientras que tomando $\nu \rightarrow \infty$ se tiene

$$\gamma(s, t) = \sigma^2 e^{-\frac{|s-t|^2}{2\rho^2}}, \quad (75)$$

que es la expresión de un núcleo del tipo RBF. El parámetro ν determina la regularidad de las trayectorias del proceso, de hecho las trayectorias son $\lceil \nu \rceil - 1$ veces derivables en el sentido de la norma $L^2[0, 1]$. En la Figura 53 pueden visualizarse distintas funciones de covarianza para distintos valores del parámetro ν .

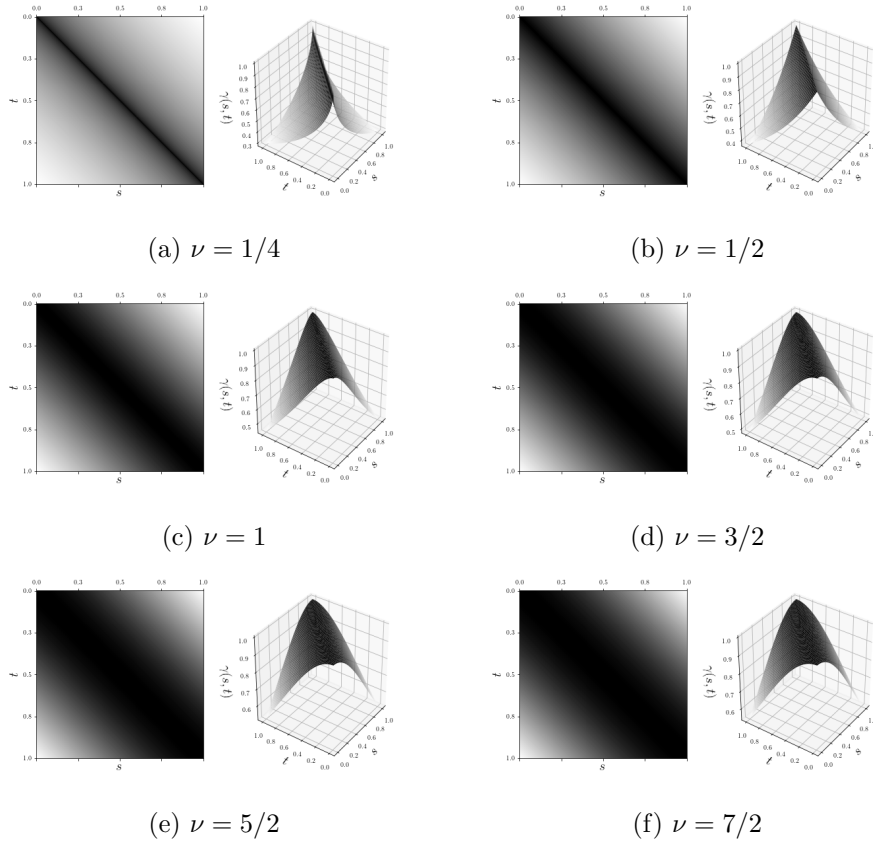


Figura 53: Visualización de funciones de autocovarianza de procesos de Matérn para distintos valores del parámetro de rugosidad ν

De nuevo al ser un proceso estacionario, la base de autofunciones es la parte real de la base de Fourier del espacio de funciones $L^2[0, 1]$. En la Figura 54 pueden visualizarse algunas autofunciones de la base y el decaimiento de los autovalores calculados. Se puede observar cómo el valor del parámetro ν afecta de manera significativa la manera en que decaen los autovalores del operador de covarianzas. Para valores pequeños de ν , tenemos un decaimiento de los autovalores similar a los de los casos del MB, PB o de núcleo exponencial, mientras que para valores mayores de ν se observa un comportamiento similar al del núcleo RBF. También puede observarse como la estimación de la base de autofunciones del operador de covarianzas refleja el efecto de este parámetro. Comparando gráficamente con el valor teórico para estas funciones de la base se puede observar que para valores grandes de ν , en los que el proceso se aproxima a un proceso con núcleo RBF, la estimación de estas autofunciones deforma principalmente en los bordes del dominio. Para los autovalores más pequeños, visualmente se aprecia que existe un error. Este error ocurre para valores $\lambda_k \simeq 10^{-16}$, es decir para

valores comparables a la precisión de las operaciones en coma flotante.

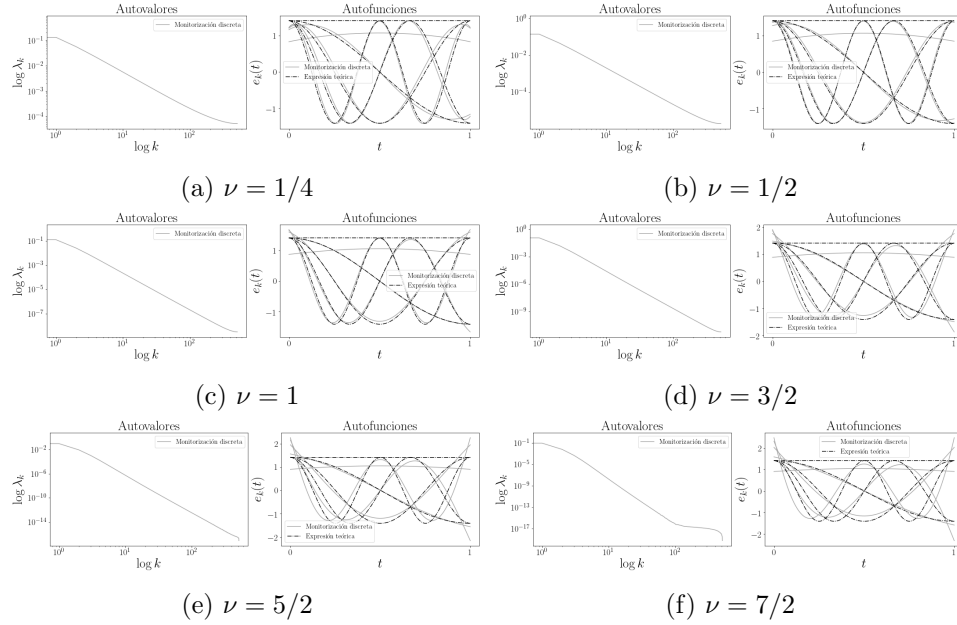


Figura 54: Autovalores y primeros elementos de la base de autofunciones de procesos de tipo Matérn con distintos parámetros ν .

En la Figura 55 pueden observarse diversas muestras simulada de trayectorias de procesos de tipo Matérn, para distintos valores del parámetro ν . Se puede observar como para $\nu = 1/2$, en el que se trata del núcleo exponencial, efectivamente las trayectorias son irregulares, y a medida que aumenta el valor de este parámetro las trayectorias de la muestra se van suavizando.

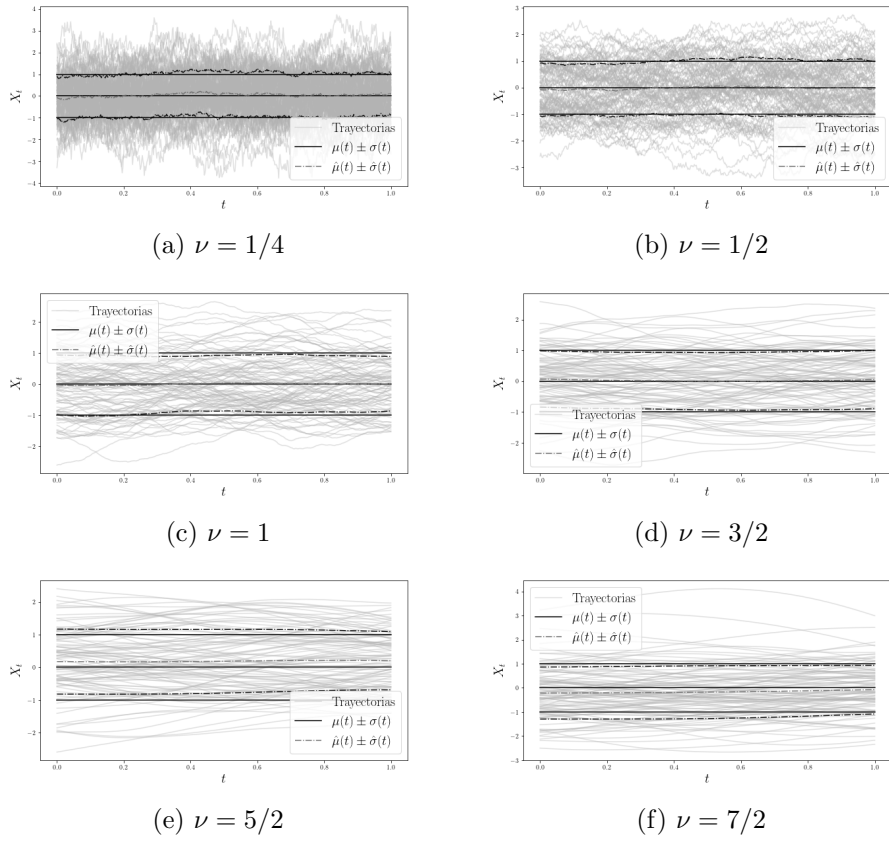


Figura 55: Ejemplos de trayectorias simuladas para un PG de tipo Matérn con distintos parámetros ν

Igual que en el caso anterior, el crecimiento de la norma en $L^2[0, 1]$ es monótono con el número de nodos en la representación, ilustrado en la Figura 56. Nótese que visualmente todas las gráficas resultan bastante similares a pesar del parámetro ν .

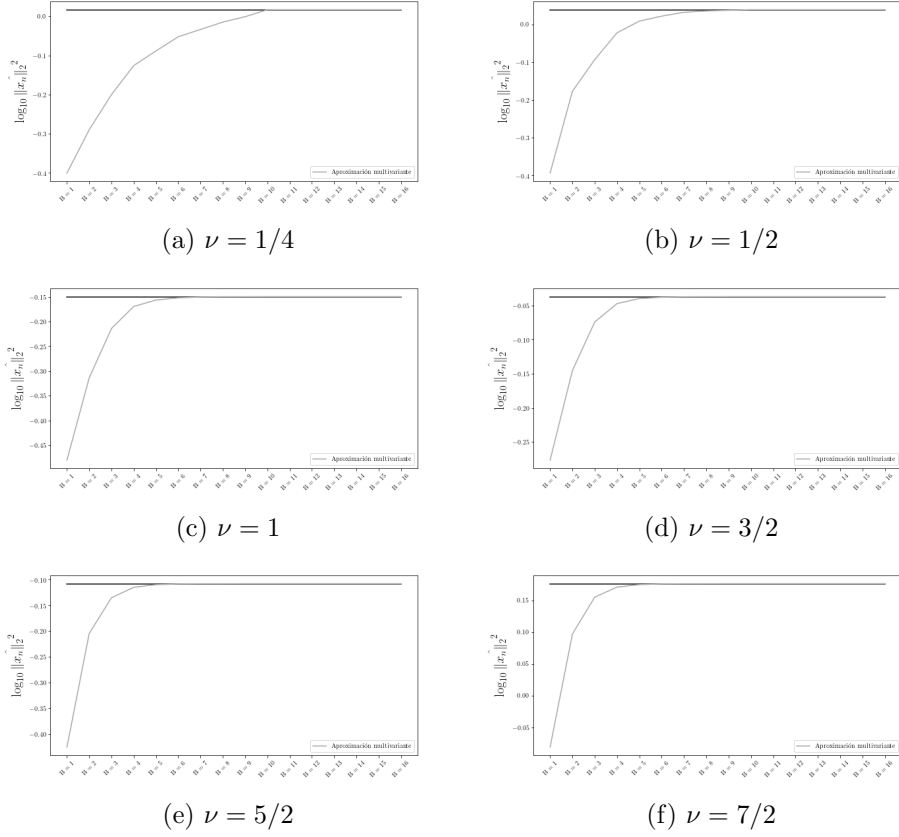
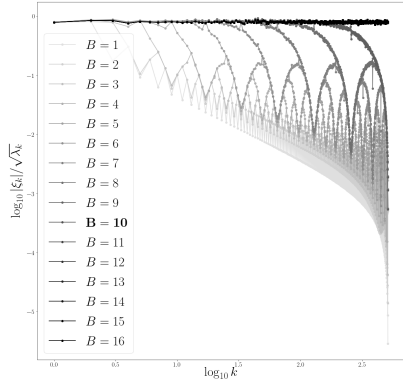
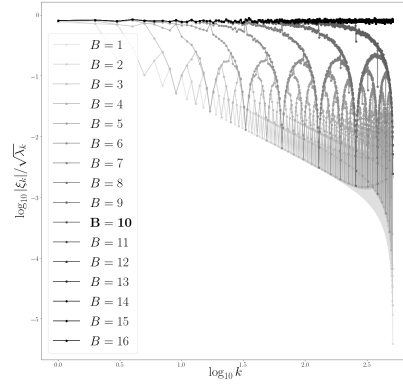


Figura 56: Media de la norma $L^2[0, 1]$ de las versiones de las trayectorias simuladas para distintos valores de ν .

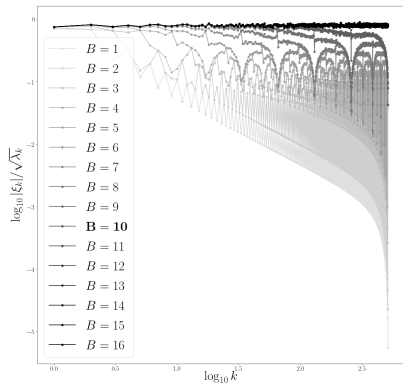
En la figura 57 se visualizan las medias de los valores absolutos de los coeficientes en el RKHS de las trayectorias de la muestra simulada. En este caso sí se observan importantes diferencias en los resultados dependiendo del parámetro ν . El caso $\nu = 1/2$ se verifica que coincide con el resultado para el núcleo exponencial, ilustrado en la Figura 40. Para valores $\nu \leq 1$, el comportamiento es similar: las trayectorias de la muestra son mucho más irregulares que las representaciones interpolantes. Para $\nu > 1$, sabemos que las trayectorias tienen una derivada al menos, luego la representación por interpolantes es más irregular (estos interpolantes tienen derivada definida en casi todo punto constante, excepto en los nodos monitorizados) y por lo tanto los coeficientes de estas representaciones son en media mayor que los de las trayectorias originales. Para un tamaño suficientemente grande de nodos se puede ver como este efecto se atenúa.



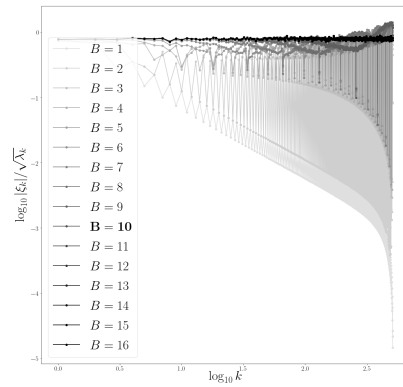
(a) $\nu = 1/4$



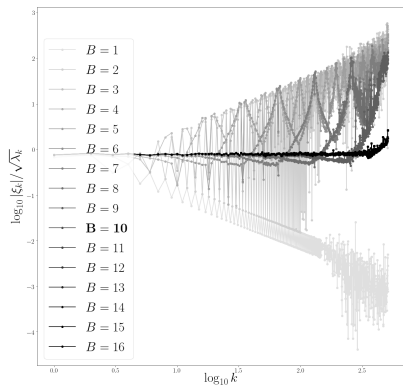
(b) $\nu = 1/2$



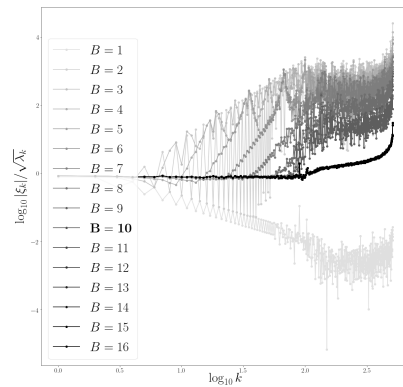
(c) $\nu = 1$



(d) $\nu = 3/2$



(e) $\nu = 5/2$



(f) $\nu = 7/2$

Figura 57: Media de los coeficientes en el RKHS para las trayectorias simuladas, según distintos valores de ν . 65

En la figura 58 de nuevo se puede observar como crece la aproximación de norma en el RKHS mediante las trayectorias de la muestra simulada.

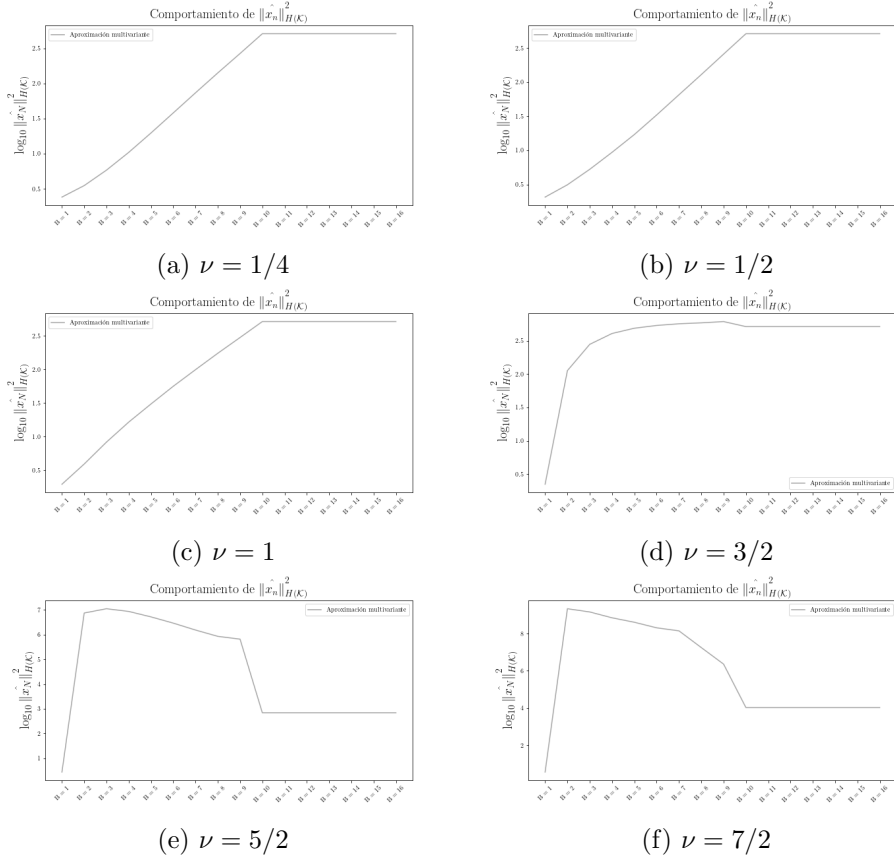
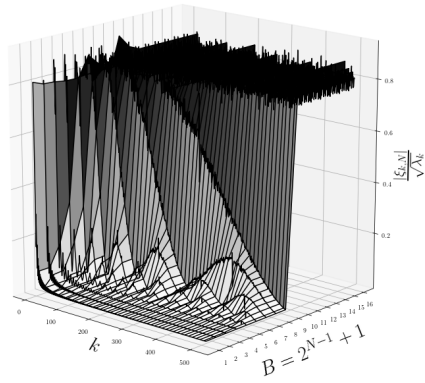
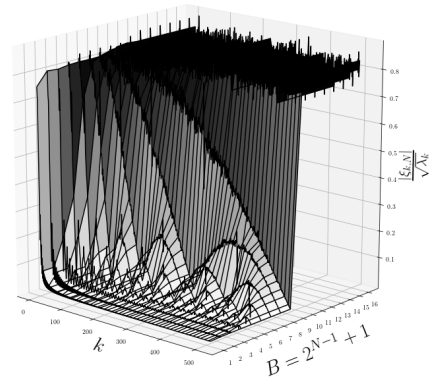


Figura 58: Media de la norma en el RKHS de las versiones de las trayectorias simuladas con distintos valores de ν .

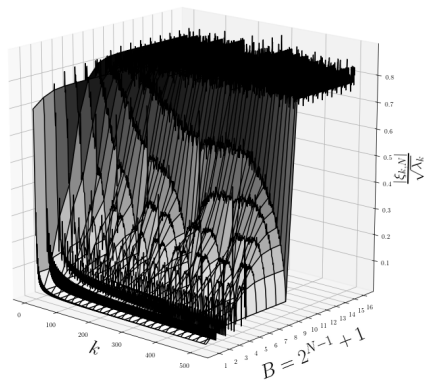
En la Figura 59 se muestran las distintas superficies que definen los coeficientes en el RKHS en función del número de nodos en la monitorización discreta para diversos valores de ν . Comparando visualmente con las figuras del núcleo exponencial y el núcleo RBF se puede observar como el parámetro ν sirve para interpolar entre el proceso con núcleo exponencial ($\nu = 1/2$) y lo que asintóticamente es un comportamiento más parecido a un proceso con núcleo RBF cuando ν tiene un valor mayor.



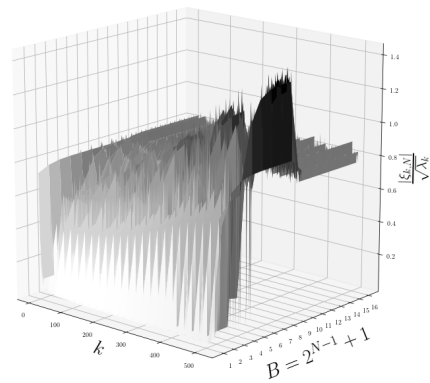
(a) $\nu = 1/4$



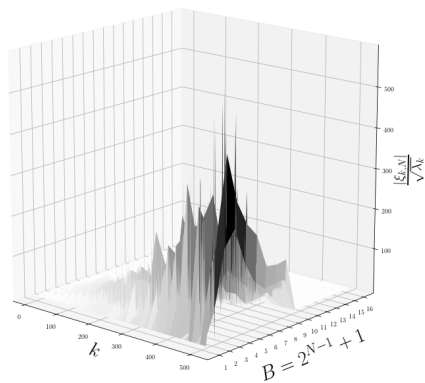
(b) $\nu = 1/2$



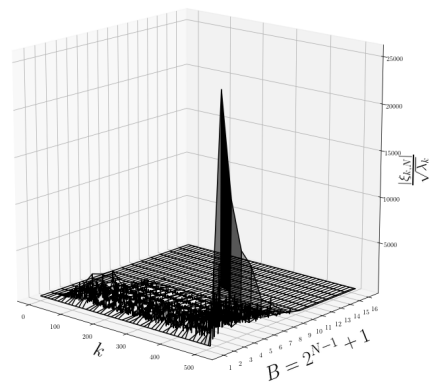
(c) $\nu = 1$



(d) $\nu = 3/2$



(e) $\nu = 5/2$



(f) $\nu = 7/2$

Figura 59: Media de la norma en el RKHS de las versiones de las trayectorias simuladas con distintos valores de ν .67

La familia de PG de Matérn se puede entender como una familia paramétrica de PG que dependen de un parámetro ν principalmente. Este parámetro ν determina la regularidad del proceso, para valores pequeños el proceso será irregular, como es el caso del exponencial con $\nu = 1/2$, mientras que para ν el proceso es suave, tomando $\nu \rightarrow \infty$ el núcleo converge al núcleo RBF. Se observa en los experimentos que la estructura de los coeficientes de las representaciones regularizadas depende fuertemente de este parámetro ν . Para valores pequeños de ν los resultados se asemejan a los obtenidos con los procesos irregulares MB, PB y exponencial, mientras que para valores grandes de ν los resultados se asemejan más a los del núcleo RBF. Para valores altos de ν en los que las trayectorias son suficientemente suaves, un mado demasiado grueso (que no monitoriza suficientes puntos en el dominio) causa que la representación por interpolantes sea más irregular que las propias trayectorias originales, luego al regularizar se obtiene una versión menos suave que la original.

5. Conclusión

En este trabajo se estudia la evolución de la representación espectral de trayectorias de PG definidos en el intervalo temporal $[0, 1]$. En particular nos centramos en la aproximación de trayectorias en el espacio de funciones $L^2[0, 1]$ de estos procesos por interpolantes lineales a trozos. Si el operador de covarianzas de un PG tiene dimensión infinita las trayectorias del mismo no están en el RKHS natural del proceso. En ese caso se puede construir una sucesión de aproximaciones a estas trayectorias por funciones en el RKHS del proceso que converge a la trayectoria original y por lo tanto fuera del RKHS. Los interpoladores lineales, que minimizan en un espacio de Sobolev un problema variacional con restricciones, sirven como aproximación convergente a medida que se aumenta el número de nodos utilizados en su construcción.

Se utilizan distintos núcleos como función de covarianzas de procesos. Para cada uno de los núcleos se obtiene una aproximación del espectro, es decir, de la base ortonormal de autofunciones y de los correspondientes autovalores del operador de covarianza del proceso. En la base estimada, se obtiene la descomposición de las aproximaciones por interpolantes de trayectorias simuladas para un número creciente de nodos. Con esta descomposición, se observa la evolución de las amplitudes de los coeficientes de la descomposición en la base del RKHS del proceso para estas representaciones por interpolantes. También se observa empíricamente el crecimiento de la estimación de la norma en el RKHS de las representaciones a medida que aumentamos el tamaño de la monitorización de la trayectoria original. Empíricamente se observa que la evolución tanto de los coeficientes como de la norma en el RKHS depende fuertemente del núcleo del proceso. Para los coeficientes de estas aproximaciones por interpolantes y PG con trayectorias más irregulares que los interpolantes como por ejemplo los procesos MB, PB o de núcleo exponencial, se observa un comportamiento oscilante con diferencias entre los diferentes núcleos. Para estos procesos, las aproximaciones por interpolantes tienen un efecto suavizante para las trayectorias. En el caso de PG con trayectorias más suaves como es el caso del RBF, las trayectorias originales son mucho más regulares que las aproximaciones por interpolantes para tamaños del mallado temporal relativamente pequeño. Esto provoca que la evolución de los coeficientes en el RKHS del proceso para las aproximaciones por interpolantes sea profundamente distinta en este caso de trayectorias regulares. Esta diferencia en el resultado de la regularización dependiendo de si es aplicada a trayectorias más o menos regulares que el propio proceso se ve con claridad con la familia de procesos con núcleo de Matérn. Esta familia es parametrizable mediante un argumento que determina la rugosidad de las trayectorias, lo que permite observar este fenómeno con facilidad. El análisis exploratorio realizado empíricamente mediante simulaciones sirve como orientación para futuros desarrollos más profundos acerca de la representación espectral de estos PG.

Referencias

- [1] N. ARONSZAJN, *Theory of Reproducing Kernels*, Transactions of the American Mathematical Society, (1950).
- [2] R. B. ASH AND M. F. GARDNER, *Topics in stochastic processes*, Academic Press, 2014.
- [3] Y. K. BELAYEV, *Continuity and Hölder's Conditions for Sample Functions of Stationary Gaussian Processes*, in Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, Volume 2: Contributions to Probability Theory, University of California Press, 1961.
- [4] J. R. BERRENDERO, B. BUENO-LARRAZ, AND A. CUEVAS, *On mahalanobis distance in functional settings*, Journal of Machine Learning Research, (2020).
- [5] F. CUCKER AND S. SMALE, *On the mathematical foundations of learning*, Bulletin of the American Mathematical Society, (2001).
- [6] F. CUCKER AND D.-X. ZHOU, *Learning theory: an approximation theory viewpoint*, Cambridge University Press, 2007.
- [7] J. C. FERREIRA AND V. A. MENEGATTO, *Eigenvalues of Integral Operators Defined by Smooth Positive Definite Kernels*, Integral Equations and Operator Theory, (2009).
- [8] P. GALEANO, E. JOSEPH, AND R. E. LILLO, *The Mahalanobis Distance for Functional Data With Applications to Classification*, Technometrics, (2015).
- [9] T. KATŌ, *Perturbation theory for linear operators.*, Springer-Verlag, 2013.
- [10] L. H. LOOMIS, *An Introduction to Abstract Harmonic Hanalysis*, Van Nostrand, 1953.
- [11] J. MERCER, *Functions of Positive and Negative Type, and their Connection with the Theory of Integral Equations*, Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, (1909).
- [12] S. PESZAT AND J. ZABCZYK, *Stochastic partial differential equations with Lévy noise: an evolution equation approach*, Cambridge University Press, 2007.
- [13] J. O. RAMSAY AND B. W. SILVERMAN, *Functional Data Analysis*, Springer Series in Statistics, Springer New York, New York, NY, 2005.

- [14] C. E. RASMUSSEN AND C. K. I. WILLIAMS, *Gaussian Processes for Machine Learning*, The MIT Press, 2006.
- [15] I. STEINWART, *Convergence Types and Rates in Generic Karhunen-Loève Expansions with Applications to Sample Path Properties*, Potential analysis, (2019).
- [16] G. WAHBA, *Spline Models for Observational Data*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1990.

Anexos

A. Expresión de los coeficientes de interpolantes lineales a trozos en las bases de autofunciones del Movimiento Browniano y Puente Browniano

En esta sección se calcula la expresión teórica de los coeficientes de la descomposición en la base de autofunciones del MB para un interpolante x_N . El resultado es directamente extensible a la descomposición en la base de autofunciones de un PB, por la similitud en el espectro entre ambos procesos. Se provee una expresión para los coeficientes en esta base para un interpolante x_N construido en los nodos $\{(t_n, x(t_n))\}_{n=1}^N$ para interpolar la función $x \in L^2[0, 1]$. Por la definición del interpolante x_N como en la ecuación 24, es suficiente calcular estos coeficientes para los elementos de la base nodal $\{\varphi_n\}_{n=1}^N$. En este sentido para tener un cálculo preciso es necesario tratar por separado los elementos en los nodos extremos φ_1 y φ_N .

Queremos obtener el coeficiente $\xi_{k,N}$, es decir el k -ésimo coeficiente en la BO de autofunciones $\{e_k\}_{k=1}^\infty$ del operador de covarianzas de un PG de tipo MB para el interpolante x_N . Recordamos la expresión de este coeficiente

$$\xi_{k,N} = \langle e_k, x_N \rangle_2 = \int_0^1 e_k(t) x_N(t) dt.$$

Por la ecuación 24 de este interpolante y la linealidad de la integral podemos escribir

$$\begin{aligned} \int_0^1 e_k(t) x_N(t) dt &= \sum_{n=1}^N x(t_n) \int_0^1 e_k(t) \varphi_n(t) dt \\ &= \sum_{n=1}^N x(t_n) \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} e_k(t) \varphi_n(t) dt, \end{aligned}$$

para $n = 1, 2, \dots$. Dado que los elementos de la base correspondientes a los nodos en los extremos ($n = 1, N$) son casos especiales, veremos que nos interesa escribirla como

$$\begin{aligned} \int_0^1 e_k(t) x_N(t) dt &= x(t_1) \int_0^1 e_k(t) \varphi_1(t) dt + x(t_N) \int_0^1 e_k(t) \varphi_N(t) dt \quad (76) \\ &\quad + \sum_{n=2}^{N-1} x(t_n) \int_0^1 e_k(t) \varphi_n(t) dt. \end{aligned}$$

En los nodos interiores, para calcular la integral basta observar que podemos utilizar que las bases nodales tienen soporte únicamente en torno a un nodo

y podemos escribir

$$\begin{aligned}\int_0^1 e_k(t)\varphi_n(t)dt &= \int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} \varphi_n(t)e_k(t)dt \\ &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} \varphi_n(t)e_k(t)dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \varphi_n(t)e_k(t)dt.\end{aligned}\quad (77)$$

Utilizando la integración por partes se ve

$$\begin{aligned}\int_{t_{n-1}}^{t_n} \varphi_n(t)e_k(t)dt &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[\varphi_n \cos(\omega_k t) \Big|_{t_{n-1}}^{t_n} - \int_{t_{n-1}}^{t_n} \varphi_n'(t) \cos(\omega_k t) dt \right] = \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[\cos(\omega_k t_n) - \int_{t_{n-1}}^{t_n} \varphi_n'(t) \cos(\omega_k t) dt \right].\end{aligned}\quad (78)$$

y por la definición lineal a trozos de φ_n ,

$$\begin{aligned}\int_{t_{n-1}}^{t_n} \varphi_n(t)e_k(t)dt &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[\cos(\omega_k t_n) - \frac{1}{h} \int_{t_{n-1}}^{t_n} \cos(\omega_k t) dt \right] = \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[\cos(\omega_k t_n) - \frac{1}{h\omega_k} \sin(\omega_k t) \Big|_{t_{n-1}}^{t_n} \right] = \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[\cos(\omega_k t_n) - \frac{1}{h\omega_k} (\sin(\omega_k t_n) - \sin(\omega_k t_{n-1})) \right].\end{aligned}$$

De manera simétrica se obtiene que

$$\begin{aligned}\int_{t_n}^{t_{n+1}} \varphi_n(t)e_k(t)dt &= \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[-\cos(\omega_k t_n) + \frac{1}{h\omega_k} (\sin(\omega_k t_{n+1}) - \sin(\omega_k t_n)) \right],\end{aligned}$$

luego sumando las integrales se puede ver que

$$\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} e_k(t)\varphi_n(t)dt = \frac{\sqrt{2}}{h\omega_k^2} [2 \sin(\omega_k t_n) - \sin(\omega_k t_{n+1}) - \sin(\omega_k t_{n-1})]. \quad (79)$$

Como observación, nótese que si escribimos para el vector de nodos $\{x(t_n)\}_{n=1}^N$ la expresión

$$\Delta_n [x] = -\frac{2x(t_n) - x(t_{n-1}) - x(t_{n+1}))}{h^2}, \quad (80)$$

la fórmula anterior se expresa como

$$\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} e_k(t)\varphi_n(t)dt = -\frac{h}{\omega_k^2} \Delta_n [e_k], \quad (81)$$

y el operador Δ_n es el operador laplaciano discreto. Aplicando las identidades

$$\begin{aligned}\sin(a + b) &= \sin a \cos b + \cos a \sin b, \\ \sin(a - b) &= \sin a \cos b - \cos a \sin b,\end{aligned}$$

y escribiendo

$$\begin{aligned}\sin(\omega_k t_{n-1}) &= \sin(\omega_k t_n) \cos(\omega_k h) - \cos(\omega_k t_n) \sin(\omega_k h), \\ \sin(\omega_k t_{n+1}) &= \sin(\omega_k t_n) \cos(\omega_k h) + \cos(\omega_k t_n) \sin(\omega_k h),\end{aligned}$$

se tiene que

$$\sin(\omega_k t_{n-1}) + \sin(\omega_k t_{n+1}) = 2 \sin(\omega_k t_n) \cos(\omega_k h),$$

y entonces se puede observar que en los nodos del interior de la malla tenemos

$$\begin{aligned}\int_{t_{n-1}}^{t_{n+1}} e_k(t) \varphi_n(t) dt &= \frac{\sqrt{2}}{h\omega_k^2} [2 \sin(\omega_k t_n) - 2 \sin(\omega_k t_n) \cos(\omega_k h)] = \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{h\omega_k^2} \sin(\omega_k t_n) (1 - \cos(\omega_k h)),\end{aligned}\quad (82)$$

y para los nodos extremos de la malla se tiene

$$\begin{aligned}\int_0^1 e_k(t) \varphi_N(t) dt &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[\cos(\omega_k t_N) - \frac{1}{h\omega_k} (\sin(\omega_k t_N) - \sin(\omega_k t_{N-1})) \right], \\ \int_0^1 e_k(t) \varphi_1(t) dt &= -\frac{\sqrt{2}}{\omega_k} \left[-\cos(\omega_k t_1) + \frac{1}{h\omega_k} (\sin(\omega_k t_2) - \sin(\omega_k t_1)) \right],\end{aligned}$$

y sumando las expresiones se obtiene

$$\begin{aligned}x(t_1) \int_0^1 e_k(t) \varphi_1(t) dt + x(t_N) \int_0^1 e_k(t) \varphi_N(t) dt &= \\ &= \frac{\sqrt{2}}{h\omega_k^2} (h(x(t_1) \cos(\omega_k t_1) - x(t_N) \cos(\omega_k t_N)) \\ &+ x(t_N) (\sin(\omega_k t_N) - \sin(\omega_k t_{N-1})) \\ &- x(t_1) (\sin(\omega_k t_2) - \sin(\omega_k t_1))).\end{aligned}$$

Finalmente juntando todas las piezas se puede escribir la fórmula completa para los coeficientes

$$\begin{aligned}\xi_{k,N} &= \frac{2\sqrt{2}}{h\omega_k^2} (1 - \cos(\omega_k h)) \sum_{n=1}^{N-1} x(t_n) \sin(\omega_k t_n) + \\ &+ x(t_1) \int_0^1 e_k(t) \varphi_1(t) dt + x(t_N) \int_0^1 e_k(t) \varphi_N(t) dt.\end{aligned}\quad (83)$$