Échantillonage en grande dimension sous contraintes

Groupe de Lecture Apprentissage et Statistique

Pierre Minier

IMS, Groupe Signal-Image

28 mars 2024

Article étudié

An MCMC Method for Uncertainty Quantification in Nonnegativity Constrained Inverse Problems

- Date : 2012
- Journal : Inverse Problems in Science and Engineering

(a) J. M. Bardsley, Montana

(b) C. Fox, Otago

Figure 1 – Les auteurs

Sommaire

1. Contrainte de positivité vs non-négativité
2. Échantillonnage sans contrainte
3. Échantillonnage sous contrainte de positivité
4. Échantillonnage sous contrainte de non négativité
5. Résultats de l'étude

Positivité vs non négativité

Contrainte de positivité (stricte)

Une probabilité nulle d'avoir des pixels nuls

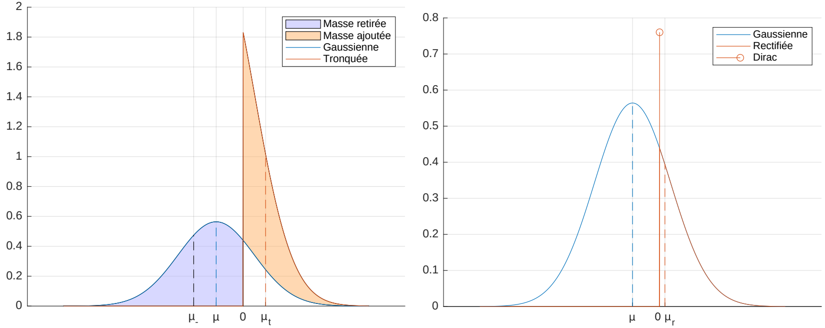
$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid \mathbf{x} > 0\}$$

Contrainte de non négativité

Une probabilité non nulle d'avoir des pixels nuls

$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid \mathbf{x} \geq 0\}$$

Exemples gaussiens



(a) Normale tronquée – Positivité (b) Normale rectifiée – Non négativité

Figure 2 – Exemples possibles de modifications

Notations

Modèle d'observation linéaire

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta} \quad (1)$$

- $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$: mesures / observations connues
- $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$: matrice de mélange connue
- $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$: vecteur à estimer
- $\boldsymbol{\eta} \in \mathbb{R}^m$: bruit de mesure aléatoire

Vraisemblance

Modèle blanc et gaussien du bruit

$$\boldsymbol{\eta} \sim \mathcal{N}\left(0, \lambda^{-1} I_m\right)$$

λ : précision pouvant être estimée

Vraisemblance (*likelihood*)

$$\mathbf{b} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{A}\mathbf{x}, \lambda^{-1}\mathbf{I}_m\right)$$

$$p(\mathbf{b} \mid \mathbf{x}, \lambda) \propto \lambda^{m/2} \exp\left(-\frac{\lambda}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2\right)$$

A priori (*prior*) 1/2

Sur $\mathbf{x}$: distribution gaussienne

$$p(\mathbf{x} \mid \delta) \propto \delta^{n/2} \exp\left(-\frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x}\right) \tag{3}$$

Matrice de régularisation $\mathbf{C}$

Soient $\mathbf{x}_{\partial_i}$ regroupant les n_i pixels voisin de x_i, et $\bar{x}_{\partial_i}$ leur moyenne.

$$x_i \mid \mathbf{x}_{\partial_i} \sim \mathcal{N}\left(\bar{x}_{\partial_i}, 1/n_i\right)$$

On obtient :

$$\mathbf{C}_{ij} = \begin{cases} n_i & i = j, \\ -1 & j \in \partial_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

A priori (*prior*) 2/2

Sur λ : distribution Gamma

$$p(\lambda) \propto \lambda^{\alpha_\lambda - 1} \exp(-\beta_\lambda \lambda) \tag{4}$$

Sur δ : distribution Gamma

$$p(\delta) \propto \delta^{\alpha_\delta - 1} \exp(-\beta_\delta \delta) \tag{5}$$

Pourquoi une Gamma ?

1. Conjuguée gaussienne $\rightarrow$ marginales simples
2. Non informative pour $\alpha = 1$ et $\beta = 10^{-4}$

Modèle hiérarchique

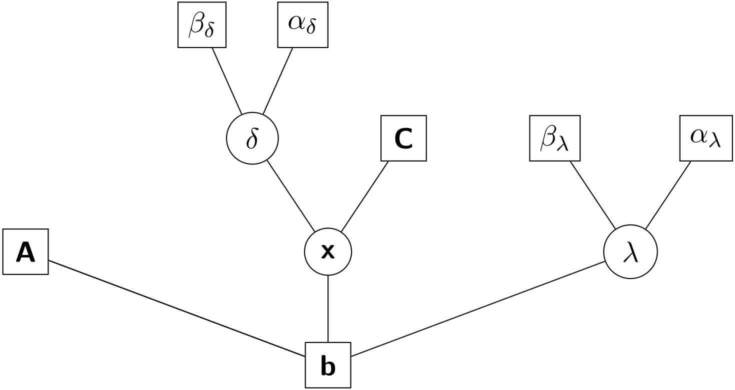


Figure 3 – Les paramètres entourés sont estimés, les encadrés sont connus

A posteriori

Théorème de Bayes

$$
\begin{aligned}
p(\mathbf{x}, \lambda, \delta \mid \mathbf{b}) &= \frac{p(\mathbf{b} \mid \mathbf{x}, \lambda, \delta)\ p(\mathbf{x}, \lambda, \delta)}{p(\mathbf{b})} \\
&= \frac{p(\mathbf{b} \mid \mathbf{x}, \lambda)\ p(\mathbf{x} \mid \delta)\ p(\lambda)\ p(\delta)}{p(\mathbf{b})} \\
&\propto p(\mathbf{b} \mid \mathbf{x}, \lambda)\ p(\mathbf{x} \mid \delta)\ p(\lambda)\ p(\delta) \qquad (2)
\end{aligned}
$$

Densité à posteriori

$$
\begin{aligned}
p(\mathbf{x}, \lambda, \delta \mid \mathbf{b}) \propto \lambda^{m/2+\alpha_\lambda-1}\ \delta^{n/2+\alpha_\delta-1} \\
\exp\left(-\frac{\lambda}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 - \frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x} - \beta_\lambda\lambda - \beta_\delta\delta\right) \qquad (6)
\end{aligned}
$$

Marginales

$$p(\mathbf{x}, \lambda, \delta \mid \mathbf{b}) \propto$$

$$\lambda^{m/2+\alpha_\lambda-1} \; \delta^{n/2+\alpha_\delta-1} \exp\left(-\frac{\lambda}{2}\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|_2^2 - \frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{Cx} - \beta_\lambda\lambda - \beta_\delta\delta\right)$$

Trois marginales

$$\mathbf{x} \mid \lambda, \delta, \mathbf{b} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}, \mathbf{P}^{-1}\right) \tag{7}$$

$$\lambda \mid \mathbf{x}, \delta, \mathbf{b} \sim \Gamma\left(\frac{m}{2} + \alpha_\lambda, \frac{1}{2}\|\mathbf{Ax}-\mathbf{b}\|_2^2 + \beta_\lambda\right) \tag{8}$$

$$\delta \mid \mathbf{x}, \lambda, \mathbf{b} \sim \Gamma\left(\frac{n}{2} + \alpha_\delta, \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{Cx} + \beta_\delta\right) \tag{9}$$

Marginale de $\mathbf{x}$

$$
\begin{aligned}
& p(\mathbf{x} \mid \lambda, \delta, \mathbf{b}) \\
& \propto \exp\left(-\frac{\lambda}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 - \frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x}\right) \\
& \propto \exp\left(-\frac{\lambda}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{A}^t\mathbf{A}\mathbf{x} + \frac{\lambda}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \frac{\lambda}{2}\mathbf{b}^t\mathbf{A}\mathbf{x} - \frac{\lambda}{2}\mathbf{b}^t\mathbf{b} - \frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x}\right) \\
& \propto \exp -\frac{1}{2}\left[\mathbf{x}^t(\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{A} + \delta\mathbf{C})\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^t(\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{A} + \delta\mathbf{C})(\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{A} + \delta\mathbf{C})^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}\right] \\
& \propto \exp -\frac{1}{2}\left[\mathbf{x}^t\mathbf{P}\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^t\mathbf{P}\mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}\right] \\
& \propto \exp -\frac{1}{2}\left[\left(\mathbf{x} - \mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}\right)^t \mathbf{P}\left(\mathbf{x} - \mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}\right)\right]
\end{aligned}
$$

D'où :

$$
\mathbf{x} \mid \lambda, \delta, \mathbf{b} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}, \mathbf{P}^{-1}\right) \tag{7}
$$

Méthode de Monte-Carlo par chaînes de Markov

k $= 0$;
Initialiser λ_0 et δ_0;
while $k < K$ **do**
  Étape 1 : Tirer $\mathbf{x}^k$ selon λ_k et δ_k;
  Étape 2 : Tirer λ_{k+1} selon $\mathbf{x}^k$;
  Étape 3 : Tirer δ_{k+1} selon $\mathbf{x}^k$;
  $k \leftarrow k+1$;
end

Algorithm 1: MCMC

Ajout de la contrainte de positivité

Gibbs : formulation équivalente de l'étape 1 du MCMC

$$p(x \mid \mathbf{x}^k_{-i}, \lambda_k, \delta_k)$$
$$\propto \exp -\frac{\mathbf{P}_{ii}}{2}\left(x - \frac{\lambda_k([\mathbf{A}^t\mathbf{b}]_i - [\mathbf{A}^t\mathbf{A}_{-i}\mathbf{x}^k_{-i}]_i) - \delta_k \mathbf{C}_{-i}\mathbf{x}_{-i}}{\mathbf{P}_{ii}}\right)^2 \quad (11)$$

Avec :

- $\mathbf{A}_{-i}$ et $\mathbf{C}_{-i}$ les matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{C}$ sans la colonne i
- $\mathbf{x}_{-i}$ le vecteur $\mathbf{x}$ sans la composante i

Contrainte de positivité

Tirer tour-à-tour les x^k_i selon :

$$p_+(x \mid \mathbf{x}^k_{-i}, \lambda_k, \delta_k) \propto p(x \mid \mathbf{x}^k_{-i}, \lambda_k, \delta_k)\mathbb{1}_+(x) \quad (12)$$

Échantillonner une loi tronquée univariée

Par rejet : en tirant parti de la proportionnalité

$\mathcal{L}$:= un échantillonneur de la loi d'origine;
x = -1;
while $x < 0$ **do**
  Tirer une proposition x selon $\mathcal{L}$;
end

Algorithm 2: Procédure par rejet

(Dés)avantages

- Se généralise pour n'importe quelle dimension
- Coûteux selon l'importance de la troncature
  Taux de rejet = aire de la partie tronquée de la densité

Échantillonner une loi tronquée univariée

Par rejet : en tirant parti de la proportionnalité

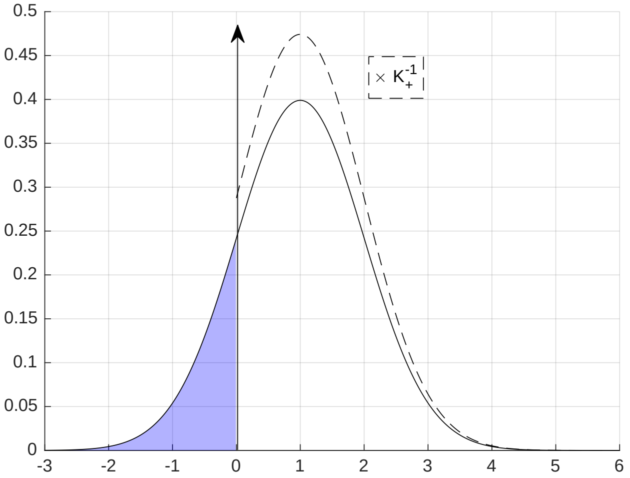


Figure 4 – Rejet de la masse bleue → réhaussement de la partie positive

Échantillonner une loi tronquée univariée

Inversion de la fonction de répartition

Explication

On cherche T tel que $X = T(U)$ avec $U \sim \mathcal{U}([0,1])$

$$\begin{aligned}
\phi(x) &= \Pr(X \leq x) \\
&= \Pr(T(U) \leq x) \\
&= \Pr(U \leq T^{-1}(x)) \\
&= T^{-1}(x) \\
T &= \phi^{-1}
\end{aligned}$$

Cas gaussien tronqué

$$\phi_+^{-1}(u) = \mu + \sqrt{\frac{2}{\gamma}} \mathrm{erfinv}\left\{(u-1)\mathrm{erf}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{2}}\mu\right) + u\right\} \tag{13}$$

Échantillonner une loi tronquée univariée

Démonstration

Notations

$$p_+(x) = K_+^{-1} p(x) \mathbb{1}_+(x)$$
$$\phi_+(t) = \Pr(X_+ \leq t)$$
$$\phi(t) = \Pr(X \leq t)$$

$$\begin{aligned} K_+ &= \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \mathbb{1}_+(x) \\ &= \int_0^{+\infty} p(x) \mathbb{1}_+(x) \\ &= 1 - \phi(0) \end{aligned}$$

Échantillonner une loi tronquée univariée

Démonstration

$$\begin{aligned}\phi_+(t) &= \int_{-\infty}^{t} p_+(x)dx \\ &= K_+^{-1}\left[\int_{-\infty}^{t} p(x)dx - \int_{-\infty}^{0} p(x)du\right] \\ &= K_+^{-1}[\phi(t) - \phi(0)]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\phi_+(t) &= u \\ t &= \phi^{-1}[K_+u + \phi(0)] \\ \phi_+^{-1}(u) &= \phi^{-1}[(1-u)\phi(0) + u]\end{aligned}$$

Récap. sur la contrainte de positivité

Points clefs

- Modification du MCMC avec une étape de Gibbs
- Ajout de la contrainte sur les marginales $x_i \mid \mathbf{x}_{-i}, \lambda, \delta$
- Échantillonage par inversion de la fonction de répartition

Mais toujours pas de proportion non nulle de pixels nuls...

L'étape 1 du MCMC comme un système linéaire

Étape 1 du MCMC

On pose $\mathbf{P}_k = \lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{A} + \delta_k \mathbf{C}$ (diagonalisable avec Fourier).
Étape 1 : $\mathbf{x}^k \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{P}_k^{-1}\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b}, \mathbf{P}_k^{-1}\right)$

Système à résoudre

Trouver $\mathbf{x}^k$ solution de :

$$\mathbf{P}_k\mathbf{x}^k = \lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k \tag{10}$$

où $\mathbf{w}_k \sim \mathcal{N}\left(0, P_k\right)$

L'étape 1 du MCMC comme un système linéaire

$$\mathbf{x}^k \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{P}_k^{-1}\lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{b}, \mathbf{P}_k^{-1}\right) \tag{7}$$

$$\mathbf{P}_k\mathbf{x}^k = \lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k \tag{10}$$

$\mathbf{w}_k$ est un vecteur gaussien : moyenne et covariance ?

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[\mathbf{P}_k\mathbf{x}^k] &= \mathbf{P}_k\mathbb{E}[\mathbf{x}^k] = \mathbf{P}_k\mathbf{P}_k^{-1}\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} = \lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} \\
&= \mathbb{E}[\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k] \\
\mathbb{V}[\mathbf{P}_k\mathbf{x}^k] &= \mathbf{P}_k^t\mathbf{P}_k\mathbb{V}[\mathbf{x}^k] = \mathbf{P}_k^t\mathbf{P}_k\mathbf{P}_k^{-1} = \mathbf{P}_k^t = \mathbf{P}_k \\
&= \mathbb{V}[\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k] = \mathbb{V}[\mathbf{w}_k]
\end{aligned}$$

$$\mathbf{w}_k \sim \mathcal{N}\left(0, \mathbf{P}_k\right)$$

Un problème d'optimisation

Formulation du problème d'optimisation

$$\mathbf{x}^k = \arg\min_x \left\{ \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{P}_k\mathbf{x} - \mathbf{x}^t(\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \right\} \tag{14}$$

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{P}_k\mathbf{x} - \mathbf{x}^t(\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \\ f'(x) &= \mathbf{P}_k\mathbf{x} - (\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \\ f''(x) &= \mathbf{P}_k \ : \text{semi-définie positive} \end{aligned}$$

$$f'(x) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{P}_k\mathbf{x} = \lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k \tag{10}$$

Ajout de la contrainte de non négativité

$$\mathbf{x}_{CON}^k = \underset{x \geq 0}{\arg\min} \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{x}^t \mathbf{P}_k \mathbf{x} - \mathbf{x}^t (\lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \right\} \quad (15)$$

Pourquoi cela fonctionne ?

En optimisation, on peut toucher la bordure : avoir une contrainte active ($x_i^k = 0$), contrairement aux lois de probabilités continues.

Lien avec l'échantillonnage sans contrainte

Minimisation d'une norme

$$\mathbf{x}_{CON}^{k} = \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{UC}^{k}\|_{\mathbf{P}_k}^{2} \tag{16}$$

$$\|\square\|_{\mathbf{P}_k}^{2} = \square^{t}\mathbf{P}_k\square \tag{17}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}^{*} &= \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{UC}^{k}\|_{\mathbf{P}_k}^{2} \\
&= \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{UC}^{k})^{t}\mathbf{P}_k(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{UC}^{k}) \\
&= \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ [\mathbf{x}^{t} - (\lambda_k\mathbf{A}^{t}\mathbf{b} + \mathbf{w}_k)^{t}\mathbf{P}_k^{-t}]\mathbf{P}_k[\mathbf{x} - \mathbf{P}_k^{-1}(\lambda_k\mathbf{A}^{t}\mathbf{b} + \mathbf{w}_k)] \\
&= \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ \mathbf{x}^{t}\mathbf{P}_k\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^{t}(\lambda_k\mathbf{A}^{t}\mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \\
&\qquad\qquad + (\lambda_k\mathbf{A}^{t}\mathbf{b} + \mathbf{w}_k)^{t}\mathbf{P}_k^{-1}(\lambda_k\mathbf{A}^{t}\mathbf{b} + \mathbf{w}_k)
\end{aligned}$$

Lien avec l'échantillonnage sans contrainte

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* &= \arg\min_{\mathbf{x} \geq 0} \mathbf{x}^t \mathbf{P}_k \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^t(\lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \\ &= \arg\min_{\mathbf{x} \geq 0} \frac{1}{2}\mathbf{x}^t \mathbf{P}_k \mathbf{x} - \mathbf{x}^t(\lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \qquad (15) \\ \mathbf{x}_{CON}^k &= \arg\min_{\mathbf{x} \geq 0} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{UC}^k\|_{\mathbf{P}_k}^2 \qquad (16) \end{aligned}$$

Dégénérescence de la matrice de régularisation

A priori de $\mathbf{x}$ sans contrainte

$$p(\mathbf{x} \mid \delta) \propto \delta^{n/2} \exp\left(-\frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x}\right) \tag{3}$$

Contrainte de non négativité

$\mathbf{D}_\mathbf{x}$: matrice diagonale $[\mathbf{D}_\mathbf{x}]_{ii} = \mathbb{1}(\mathbf{x}_i > 0)$

$$\frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x} = \frac{\delta}{2}(\mathbf{D}_\mathbf{x}\mathbf{C}\mathbf{D}_\mathbf{x})\mathbf{x}$$

Dégénérescence de la matrice de régularisation

A priori de $\mathbf{x}$ avec contrainte

$$p(\mathbf{x} \mid \delta) \propto \delta^{n_p/2} \exp\left(-\frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x}\right)$$

n_p : nombre d'éléments positifs de $\mathbf{x}$.

Marginale de δ (Étape 3 MCMC)

$$\delta \mid \mathbf{x}, \lambda, \mathbf{b} \sim \Gamma\left(\frac{n_p}{2} + \alpha_\delta, \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x} + \beta_\delta\right)$$

Les auteurs déclarent avoir de meilleurs intervalles de confiance après cette correction.

Un algorithme d'optimisation : GPCG

Gradient Projection – Conjugate Gradient (GPCG)

$$\mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x}\geq 0} \left\{ q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{B}\mathbf{x} - \mathbf{x}^t\mathbf{c} \right\} \tag{18}$$

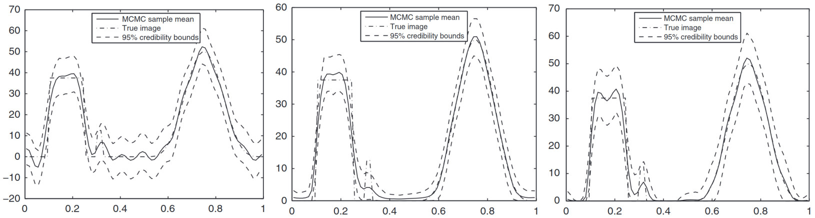
$$\mathbf{B} = \mathbf{P}_k = \lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{A} + \delta_k \mathbf{C} \text{ : semi-définie positive}$$

$$\mathbf{c} = \lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k$$

- Algorithme de Moré et Toreldo (1991)
- Variante de *Conjugate Gradient*
- Grande dimension : nombre important de contraintes actives ajoutées ou supprimées à chaque itération

Expériences réalisées

- 3 expériences : reconstruction d'images en 1D, 2D, et tomographie
- 20 chaînes MCMC avec des départs aléatoires
- Critère d'arrêt selon des distances inter/intra-chaînes



(a) Sans contrainte (b) Positivité (c) Non négativité

Figure 5 – Expérience 1D

Résultats

1D	Vrai	UC	PC	NNC
λ	5.35	[3.94, 8.35]	[1.48, 3.73]	[3.61, 7.28]
Temps (sec)	$\times$	36	52	49

2D	Vrai	UC	PC	NNC
λ	8.09	[7.59, 8.63]	$\times$	[7.59, 8.63]
Temps (sec)	$\times$	30	$\times$	2 845

Tomographie	Vrai	UC	PC	NNC
λ	13.24	[13.85, 15.47]	$\times$	[12.61, 13.53]
Temps (sec)	$\times$	2 637	$\times$	8 301

Conclusion

Points clefs

- Mise en place de contrainte de positivité / non négativité à partir d'un MCMC sans contrainte
- Estimation d'intervalle de confiance
- Positivité : avec un Gibbs
- Non négativité : par de l'optimisation
- Meilleurs résultats avec la non négativité (1D)

Référence

J. M. Bardsley and C. Fox. *An MCMC Method for Uncertainty Quantification in Nonnegativity Constrained Inverse Problems.* Inverse Problems in Science and Engineering, vol. 20, no. 4, pp. 477-498, 2012. DOI : 10.1080/17415977.2011.637208