

Échantillonnage rapide et contraint de gaussiennes multivariées.

Pierre MINIER

Laboratoire de l'Intégration du Matériau au Système
Université de Bordeaux – CNRS – Bordeaux INP

18 juillet 2025

Sommaire

Introduction

- Difficulté du problème
- Un aperçu de la littérature

Méthode proposée

- Cadre
- Algorithme

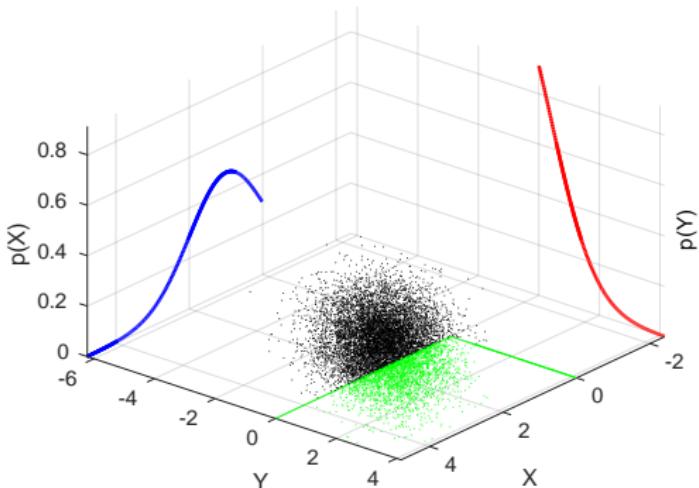
Résultats

- Gain en temps de calculs

Introduction

Difficulté du problème

$$\pi(\mathbf{x}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m})^t \mathbf{P} (\mathbf{x} - \mathbf{m}) \right] \mathbf{1}_+(\mathbf{K}\mathbf{x})$$



Vert : échantillons d'une gaussienne 2D positive.

Introduction

Aperçu de la littérature

Ellipse Slice Sampling

$$\boldsymbol{x}(\theta) = \boldsymbol{x}_0 \cos(\theta) + \boldsymbol{\nu} \sin(\theta) \quad \text{avec } \boldsymbol{\nu} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{P})$$

- Intersection ellipse / droite : solution analytique
- Tire un θ valide

Introduction

Aperçu de la littérature

Ellipse Slice Sampling

$$\boldsymbol{x}(\theta) = \boldsymbol{x}_0 \cos(\theta) + \boldsymbol{\nu} \sin(\theta) \quad \text{avec } \boldsymbol{\nu} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{P})$$

- Intersection ellipse / droite : solution analytique
- Tire un θ valide

HMC constraint

$$\pi(\boldsymbol{x}) \propto \exp(-0.5 \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{x}) \mathbb{1}_+(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b})$$

- Equation de mouvement non contraint : $\ddot{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{x} = 0$
- Solution analytique : $x_n(t) = a_n \cos(t) + b_n \sin(t)$
- Contraintes : murs de rebond

Introduction

Aperçu de la littérature

Ellipse Slice Sampling

$$\boldsymbol{x}(\theta) = \boldsymbol{x}_0 \cos(\theta) + \boldsymbol{\nu} \sin(\theta) \quad \text{avec } \boldsymbol{\nu} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{P})$$

- Intersection ellipse / droite : solution analytique
- Tire un θ valide

HMC constraint

$$\pi(\boldsymbol{x}) \propto \exp(-0.5 \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{x}) \mathbb{1}_+(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b})$$

- Equation de mouvement non contraint : $\ddot{\boldsymbol{x}} + \boldsymbol{x} = 0$
- Solution analytique : $x_n(t) = a_n \cos(t) + b_n \sin(t)$
- Contraintes : murs de rebond

Gibbs

- Conditionnement par coordonnée : $x_n \mid \boldsymbol{x}_{-n}$
- Échantillonnage gaussien 1D contraint

Méthode proposée

Cadre (1/2)

$$\pi(\mathbf{x}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m})^t \mathbf{P} (\mathbf{x} - \mathbf{m}) \right] \mathbb{1}_+(\mathbf{K}\mathbf{x})$$

\mathbf{P} et \mathbf{K} : matrices circulantes

Circulation d'un vecteur générateur $[p_0, p_1, p_2]$

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} p_0 & p_1 & p_2 \\ p_2 & p_0 & p_1 \\ p_1 & p_2 & p_0 \end{bmatrix}$$

Implications

- Périodicité de \mathbf{x} .
- Permet l'utilisation de FFT (diagonalisation rapide).

Méthode proposée

Cadre (2/2)

Notations

- $\mathbb{1}_n$: indicatrice de la position n
- $\tilde{\boldsymbol{x}}$: \boldsymbol{x} avec la nouvelle valeur \tilde{x}_n en position n
- le décalage $\delta_n = \tilde{x}_n - x_n$

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x} + \delta_n \mathbb{1}_n$$

Gibbs

On échantillonne le décalage δ_n sachant \boldsymbol{x} : $\pi(\delta_n \mid \boldsymbol{x})$

Méthode proposée : développement

Argument de l'exponentielle

Dépendance en δ_n

$$\begin{aligned}(\tilde{x} - \mathbf{m})^t \mathbf{P} (\tilde{x} - \mathbf{m}) &\# \tilde{x}^t \mathbf{P} \tilde{x} - 2 \tilde{x}^t \mathbf{P} \mathbf{m} \\&\# p_0 (\delta_n - \mathbb{1}_n^t \boldsymbol{\tau})^2\end{aligned}$$

Méthode proposée : développement

Argument de l'exponentielle

Dépendance en δ_n

$$(\tilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{m})^t \boldsymbol{P} (\tilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{m}) \# \tilde{\boldsymbol{x}}^t \boldsymbol{P} \tilde{\boldsymbol{x}} - 2 \tilde{\boldsymbol{x}}^t \boldsymbol{P} \boldsymbol{m}$$
$$\# p_0 (\delta_n - \mathbb{1}_n^t \boldsymbol{\tau})^2$$

Moyenne : $\mathbb{1}_n^t \boldsymbol{\tau}$



$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\boldsymbol{P}(\boldsymbol{m} - \boldsymbol{x})}{p_0}$$

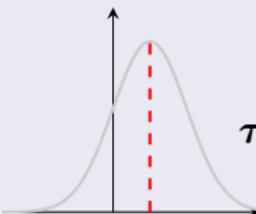
Méthode proposée : développement

Argument de l'exponentielle

Dépendance en δ_n

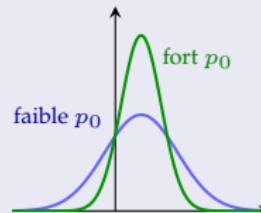
$$(\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{m})^t \mathbf{P}(\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{m}) \# \tilde{\mathbf{x}}^t \mathbf{P} \tilde{\mathbf{x}} - 2 \tilde{\mathbf{x}}^t \mathbf{P} \mathbf{m}$$
$$\# p_0 (\delta_n - \mathbb{1}_n^t \boldsymbol{\tau})^2$$

Moyenne : $\mathbb{1}_n^t \boldsymbol{\tau}$



$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\mathbf{P}(\mathbf{m} - \mathbf{x})}{p_0}$$

Précision : p_0



$$p_0 = \mathbf{P}(0, 0)$$

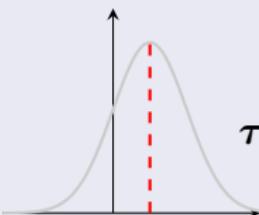
Méthode proposée : développement

Argument de l'exponentielle

Dépendance en δ_n

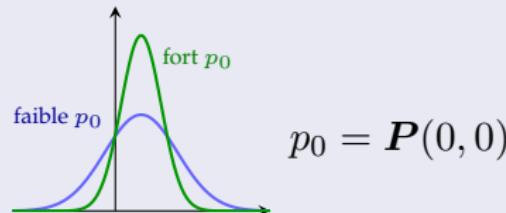
$$(\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{m})^t \mathbf{P}(\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{m}) \# \tilde{\mathbf{x}}^t \mathbf{P} \tilde{\mathbf{x}} - 2 \tilde{\mathbf{x}}^t \mathbf{P} \mathbf{m}$$
$$\# p_0 (\delta_n - \mathbb{1}_n^t \boldsymbol{\tau})^2$$

Moyenne : $\mathbb{1}_n^t \boldsymbol{\tau}$



$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\mathbf{P}(\mathbf{m} - \mathbf{x})}{p_0}$$

Précision : p_0



MAJ $\boldsymbol{\tau}$

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = \frac{\mathbf{P}(\mathbf{m} - \tilde{\mathbf{x}})}{p_0} = \frac{\mathbf{P}[\mathbf{m} - (\mathbf{x} + \delta_n \mathbb{1}_n)]}{p_0} = \boldsymbol{\tau} - \frac{\delta_n}{p_0} \mathbf{P} \mathbb{1}_n$$

Méthode proposée : développement

Simplification de la contrainte

La contrainte à vérifier est $\mathbb{1}_+(\tilde{\kappa}) = 1$ avec $\tilde{\kappa} = \mathbf{K}\tilde{\mathbf{x}}$. $\forall m :$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \tilde{\mathbf{x}} \geq 0$$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} (\mathbf{x} + \delta_n \mathbb{1}_n) \geq 0$$

$$\delta_n \mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n \geq -\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbf{x}$$

Méthode proposée : développement

Simplification de la contrainte

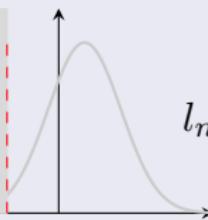
La contrainte à vérifier est $\mathbb{1}_+(\tilde{\kappa}) = 1$ avec $\tilde{\kappa} = \mathbf{K}\tilde{x}$. $\forall m :$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \tilde{x} \geq 0$$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} (\mathbf{x} + \delta_n \mathbb{1}_n) \geq 0$$

$$\delta_n \mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n \geq -\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbf{x}$$

Borne inférieure : l_n



$$l_n = \frac{-1}{\max \frac{\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n}{\mathbb{1}_m^t \boldsymbol{\kappa}}}$$

Méthode proposée : développement

Simplification de la contrainte

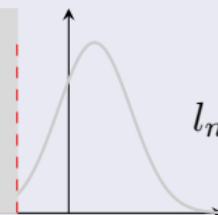
La contrainte à vérifier est $\mathbb{1}_+(\tilde{\kappa}) = 1$ avec $\tilde{\kappa} = \mathbf{K}\tilde{x}$. $\forall m :$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \tilde{x} \geq 0$$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} (\mathbf{x} + \delta_n \mathbb{1}_n) \geq 0$$

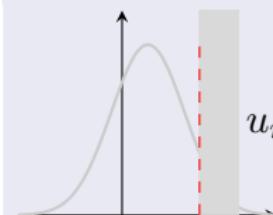
$$\delta_n \mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n \geq -\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbf{x}$$

Borne inférieure : l_n



$$l_n = \frac{-1}{\max \frac{\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n}{\mathbb{1}_m^t \kappa}}$$

Borne supérieure : u_n



$$u_n = \frac{-1}{\min \frac{\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n}{\mathbb{1}_m^t \kappa}}$$

Méthode proposée : développement

Simplification de la contrainte

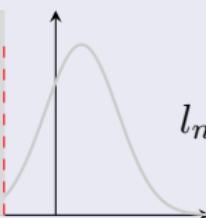
La contrainte à vérifier est $\mathbb{1}_+(\tilde{\kappa}) = 1$ avec $\tilde{\kappa} = \mathbf{K}\tilde{\mathbf{x}}$. $\forall m :$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \tilde{\mathbf{x}} \geq 0$$

$$\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} (\mathbf{x} + \delta_n \mathbb{1}_n) \geq 0$$

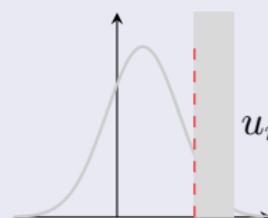
$$\delta_n \mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n \geq -\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbf{x}$$

Borne inférieure : l_n



$$l_n = \frac{-1}{\max \frac{\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n}{\mathbb{1}_m^t \kappa}}$$

Borne supérieure : u_n



$$u_n = \frac{-1}{\min \frac{\mathbb{1}_m^t \mathbf{K} \mathbb{1}_n}{\mathbb{1}_m^t \kappa}}$$

MAJ κ

$$\tilde{\kappa} = \mathbf{K}\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{K}(\mathbf{x} + \delta_n \mathbb{1}_n) = \kappa + \delta_n \mathbf{K} \mathbb{1}_n$$

Méthode proposée

Pseudo code du Gibbs

Pour chaque itération :

Pour chaque dimension n :

 Calculer l_n et u_n avec κ

 Tirer un δ_n selon $\mathcal{N}_{(l_n, u_n)}(\mathbf{1}_n^t \boldsymbol{\tau}, p_0)$

 Mettre à jour x_n

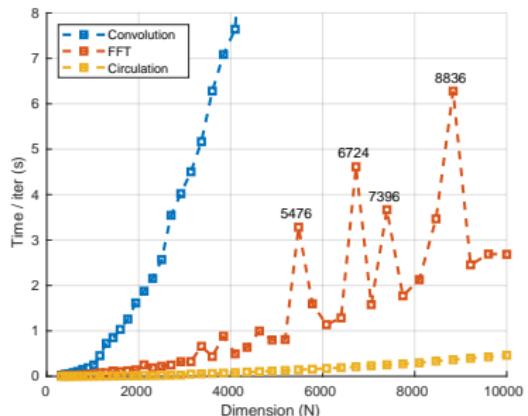
 Mettre à jour $\boldsymbol{\tau}$ et κ

 Décaler les réponses impulsionales

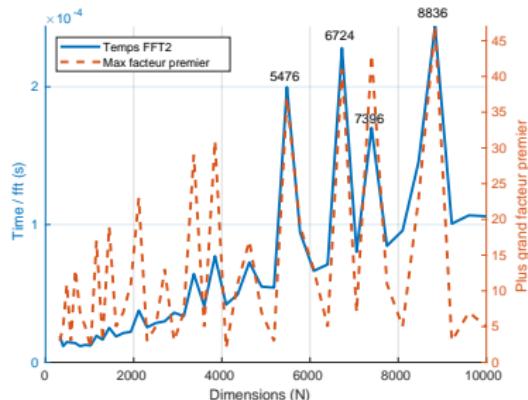
Fin

Fin

Résultats : gain de calculs



(a) Temps selon les méthodes



(b) Origines pics FFT

Accélération FFT -> circu : autour de $\times 7$

Points clefs

- Aperçu de la littérature
- Gibbs + circularité ⇒ réduit le coût par itération
- Gain ×7

Conclusion

Points clefs

- Aperçu de la littérature
- Gibbs + circularité \Rightarrow réduit le coût par itération
- Gain $\times 7$

Perspectives

- Dernières optimisations (mieux implémenter la circulation, choix de l'échantillonneur 1D)
- Application à la déconvolution d'image sous contrainte

Méthode proposée

Variantes avec des changements de variables

$$\pi(\boldsymbol{x}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{m})^t \boldsymbol{P} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{m}) \right] \mathbb{1}_+(\boldsymbol{K}\boldsymbol{x})$$

Méthode proposée

Variantes avec des changements de variables

$$\pi(\mathbf{x}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m})^t \mathbf{P} (\mathbf{x} - \mathbf{m}) \right] \mathbb{1}_+(\mathbf{Kx})$$

Exponentielle séparable : $\mathbf{v} = \mathbf{P}^{1/2} \mathbf{x}$

$$f(\mathbf{v}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \|\mathbf{v} - \mathbf{m}_v\|^2 \right] \mathbb{1}_+(\mathbf{K}_v \mathbf{v})$$

⇒ Pas de \mathbf{P}^{-1} à circuler.

Méthode proposée

Variantes avec des changements de variables

$$\pi(\mathbf{x}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{m})^t \mathbf{P} (\mathbf{x} - \mathbf{m}) \right] \mathbb{1}_+(\mathbf{Kx})$$

Exponentielle séparable : $\mathbf{v} = \mathbf{P}^{1/2} \mathbf{x}$

$$f(\mathbf{v}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \|\mathbf{v} - \mathbf{m}_v\|^2 \right] \mathbb{1}_+(\mathbf{K}_v \mathbf{v})$$

⇒ Pas de $\mathbf{P}\mathbf{1}$ à circuler.

Contrainte séparable : $\mathbf{u} = \mathbf{Kx}$

$$f(\mathbf{u}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{m}_u)^t \mathbf{P}_u (\mathbf{u} - \mathbf{m}_u) \right] \mathbb{1}_+(\mathbf{u})$$

⇒ Pas de (l_p, u_p) à calculer et $\mathbf{K}\mathbf{1}$ à circuler.

Application : déconvolution

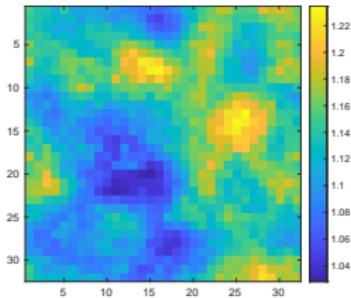
Jeu de données synthétique

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c. } \mathbf{u} \geq 0$$

Application : déconvolution

Jeu de données synthétique

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c. } \mathbf{u} \geq 0$$

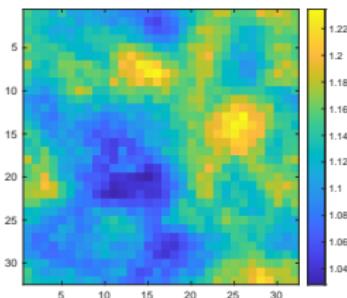


(a) Vrai \mathbf{x}^*

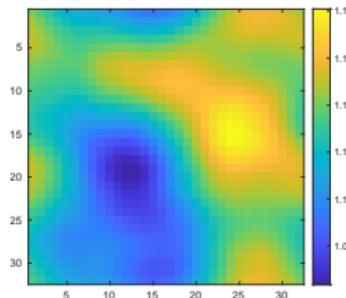
Application : déconvolution

Jeu de données synthétique

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c. } \mathbf{u} \geq 0$$



(a) Vrai \mathbf{x}^*

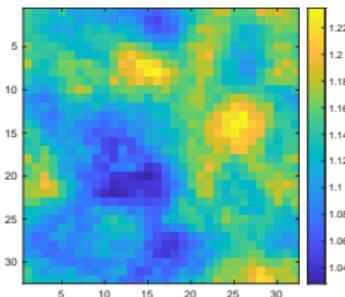


(b) Vrai $\mathbf{H}\mathbf{x}^*$

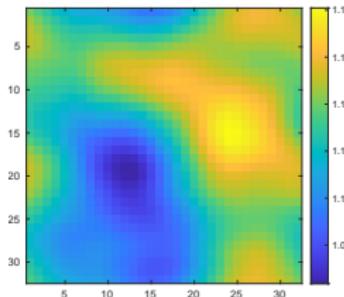
Application : déconvolution

Jeu de données synthétique

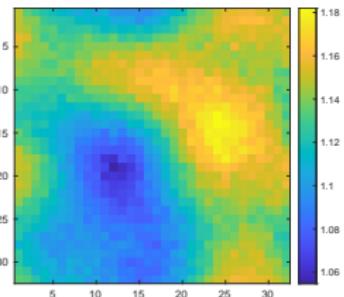
$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c.} \quad \mathbf{u} \geq 0$$



(a) Vrai \mathbf{x}^*



(b) Vrai $\mathbf{H}\mathbf{x}^*$

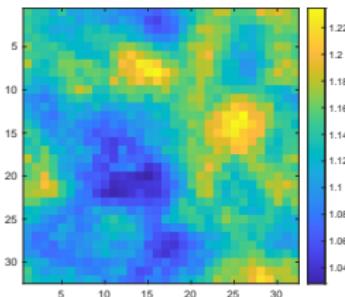


(c) $\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}^* + \epsilon$

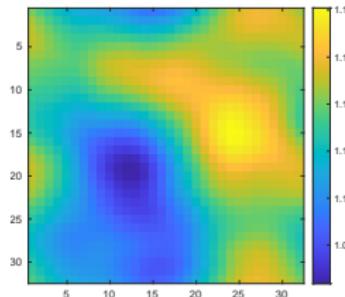
Application : déconvolution

Jeu de données synthétique

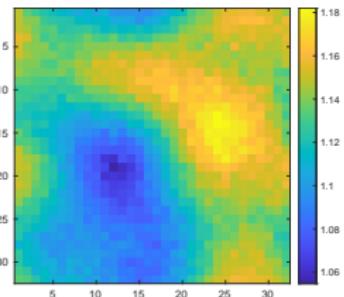
$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c.} \quad \mathbf{u} \geq 0$$



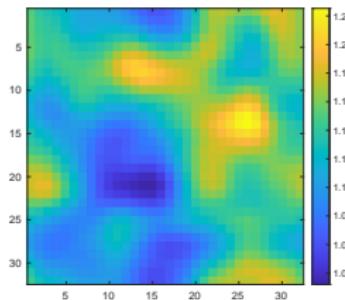
(a) Vrai \mathbf{x}^*



(b) Vrai $\mathbf{H}\mathbf{x}^*$



(c) $\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}^* + \epsilon$

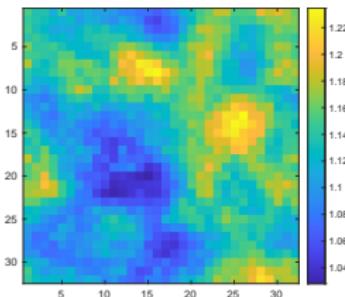


(d) $\hat{\mathbf{x}}$

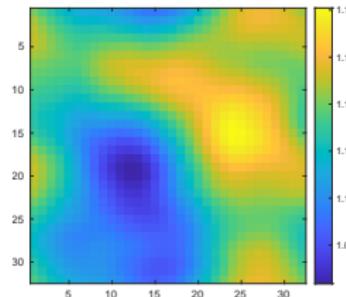
Application : déconvolution

Jeu de données synthétique

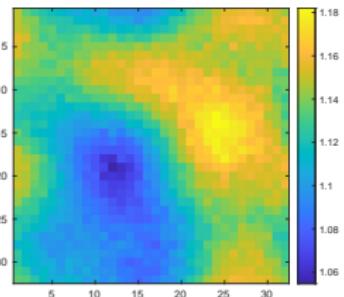
$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c.} \quad \mathbf{u} \geq 0$$



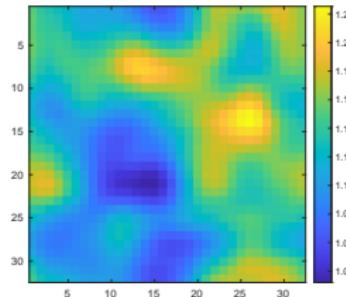
(a) Vrai \mathbf{x}^*



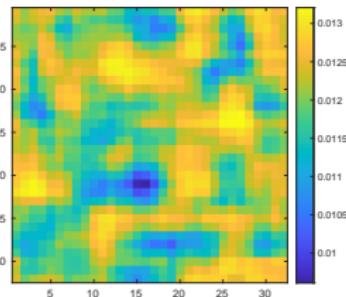
(b) Vrai $\mathbf{H}\mathbf{x}^*$



(c) $\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x}^* + \epsilon$



(d) $\hat{\mathbf{x}}$

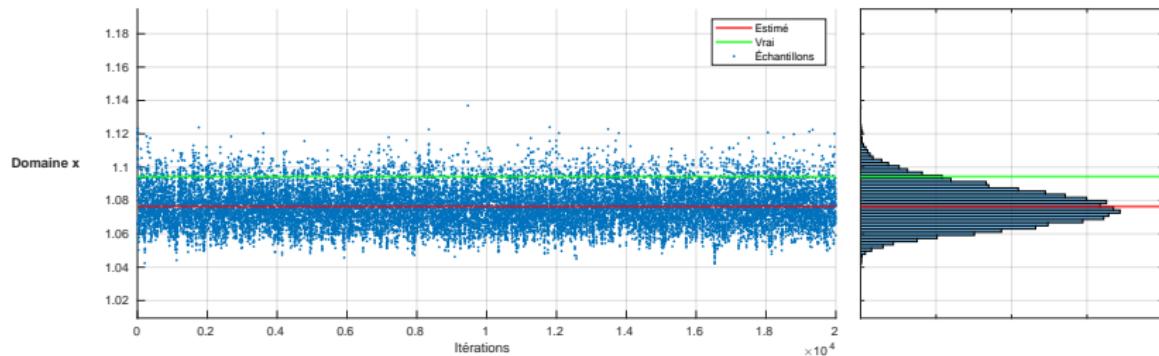


(e) Std $\hat{\mathbf{x}}$

Application : déconvolution

Chaînes et histogrammes

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c. } \mathbf{u} \geq 0$$



Application : déconvolution

Chaînes et histogrammes

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{u} \quad \text{s.c. } \mathbf{u} \geq 0$$

