Échantillonage en grande dimension sous contraintes

Groupe de Lecture Apprentissage et Statistique

Pierre Minier

IMS, Groupe Signal-Image

28 mars 2024

Un (deux ?) article étudié

An MCMC Method for Uncertainty Quantification in Nonnegativity Constrained Inverse Problems

- Date : 2012 (+ compléments avec celui de 2020)
- 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

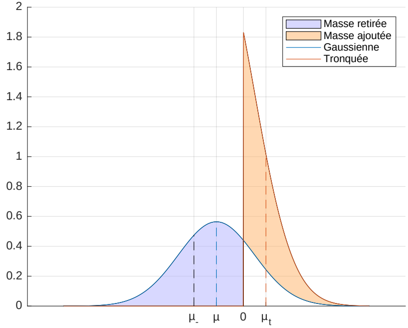
$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid \mathbf{x} > 0\}$$

Contrainte de non négativité

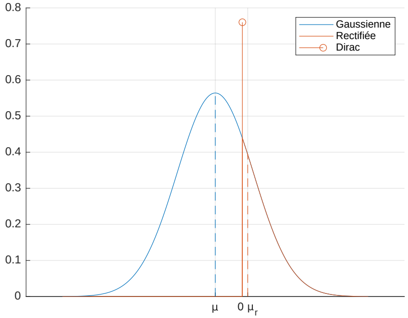
Une probabilité non nulle d'avoir des pixels nuls

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

Exemples gaussiens



(a) Normale tronquée – Positivité



(b) Normale rectifiée – Non négativité

Figure 2 – Exemples possibles de modifications

Notations

Modèle d'observation linéaire

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

- $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$: 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*)

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

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

[2012] : $\lambda^{n/2}$
[2020] : $\lambda^{m/2}$ (correct)

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

Modèle hiérarchique

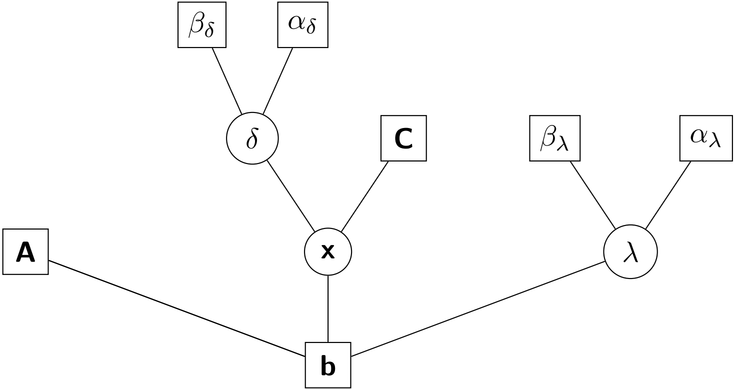


Figure 3 – Les paramètres entourés sont estimés, les encadrés sont connus

A posteriori

Théorème de Bayes

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

Densité à posteriori

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

Conditionnelle

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

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

Trois conditionnelles

$$\mathbf{x} \mid \lambda, \delta, \mathbf{b} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}, \mathbf{P}^{-1}\right) \tag{10}$$

$$\lambda \mid \mathbf{x}, \delta, \mathbf{b} \sim \Gamma\left(\frac{m}{2}+\alpha_\lambda, \frac{1}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{x}-\mathbf{b}\|_2^2+\beta_\lambda\right) \tag{11}$$

$$\delta \mid \mathbf{x}, \lambda, \mathbf{b} \sim \Gamma\left(\frac{n}{2}+\alpha_\delta, \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x}+\beta_\delta\right) \tag{12}$$

Conditionnelle 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 :

$$
\mathbf{x} \mid \lambda, \delta, \mathbf{b} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}, \mathbf{P}^{-1}\right) \tag{10}
$$

[2020] $\mathbf{P}$ est inversible en supposant $\ker(\mathbf{A}) \cap \ker(\mathbf{C}) = \{\mathbf{0}\}$.

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

Formulation équivalente de l'étape 1 du MCMC

Gibbs

Les x_i sont tirés tour-à-tour selon leurs conditionnelles.

Conditionnelle des x_i

Une composante d'un vecteur gaussien est gaussien (la réciproque est fausse). Il suffit donc d'obtenir la moyenne et la variance de

$$x \mid \mathbf{x}_{-i}, \lambda, \delta$$

Notations utilisées

- $\mathbf{P}_{-i}$ la matrice $\lambda \mathbf{A}^t\mathbf{A} + \delta\mathbf{C}$ sans la colonne i
- P_{ij} le coefficient (i, j) de la matrice $\lambda \mathbf{A}^t\mathbf{A} + \delta\mathbf{C}$
- $\mathbf{x}_{-i}$ le vecteur $\mathbf{x}$ sans la composante i

Formulation équivalente de l'étape 1 du MCMC

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

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= (\mathbf{x} - \mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b})^t\mathbf{P}(\mathbf{x} - \mathbf{P}^{-1}\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b}) \\ &= \mathbf{x}^t\mathbf{P}\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^t\lambda\mathbf{A}^t\mathbf{b} + c \\ &= [x_1 \cdots x_i \cdots x_N] \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^N P_{1j}x_j \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^N P_{ij}x_j \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^N P_{Nj}x_j \end{bmatrix} - 2\lambda \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^N A_{1j}x_j \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^N A_{ij}x_j \\ \cdots \\ \sum_{j=1}^N A_{Nj}x_j \end{bmatrix}^t \mathbf{b} + c \end{aligned}$$

$$f(x_i) \sim x_i \sum_{j=1}^{N} P_{ij}x_j + x_{-i}^t [P_{ki}x_i]_{\substack{1\leq k\leq N \\ k\neq i}} - 2\lambda [A_{ki}x_i]^t_{1\leq k\leq N}\mathbf{b}$$

Formulation équivalente de l'étape 1 du MCMC

$$
\begin{aligned}
f(x_i) &\sim x_i \sum_{j=1}^{N} P_{ij} x_j + x_{-i}^t [P_{ki} x_i]_{\substack{1 \leq k \leq N \\ k \neq i}} - 2\lambda [A_{ki} x_i]_{1 \leq k \leq N}^t \mathbf{b} \\
&= x_i P_{ii} x_i + x_i \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{N} P_{ik} x_k + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{N} x_k P_{ki} x_i - 2\lambda x_i [A_{ki}]_{1 \leq k \leq N}^t \mathbf{b} \\
&\sim P_{ii} {x_i}^2 + 2 \frac{P_{ii}}{P_{ii}} x_i (\mathbf{P}_{-i} \mathbf{x}_{-i} - \lambda [\mathbf{A}^t \mathbf{b}]_i) \\
&\sim P_{ii} {x_i}^2 - 2 P_{ii} x_i \frac{\lambda [\mathbf{A}^t \mathbf{b}]_i - \mathbf{P}_{-i} \mathbf{x}_{-i}}{P_{ii}}
\end{aligned}
$$

Exposant d'une gaussienne univariée

$$
g(x) = \gamma (x - \mu)^2 = \gamma (x^2 - 2x\mu + \mu^2) \sim \gamma x^2 - 2\gamma x \mu
$$

Formulation équivalente de l'étape 1 du MCMC

Étape 1 du MCMC

Tirer $\mathbf{x}^k$ selon :

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

Étape 1 du MCMC avec une boucle de Gibbs

Tirer tour-à-tour les composantes x_i^k selon :

$$x_i^k \mid \mathbf{x}_{-i}, \lambda_k, \delta_k \sim \mathcal{N}\left(\frac{\lambda[\mathbf{A}^t\mathbf{b}]_i - \mathbf{P}_{-i}\mathbf{x}_{-i}}{P_{ii}}, P_{ii}\right)$$

Avec $\mathbf{P} = \lambda \mathbf{A}\mathbf{A}^t + \delta \mathbf{C}$.

Ajout de la contrainte de positivité

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

Ajout de la contrainte

Tirer tour-à-tour les x_i^k selon :

$$p_+(x \mid \mathbf{x}_{-i}^k, \lambda_k, \delta_k) \propto p(x \mid \mathbf{x}_{-i}^k, \lambda_k, \delta_k)\mathbb{1}_+(x) \tag{15}$$

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

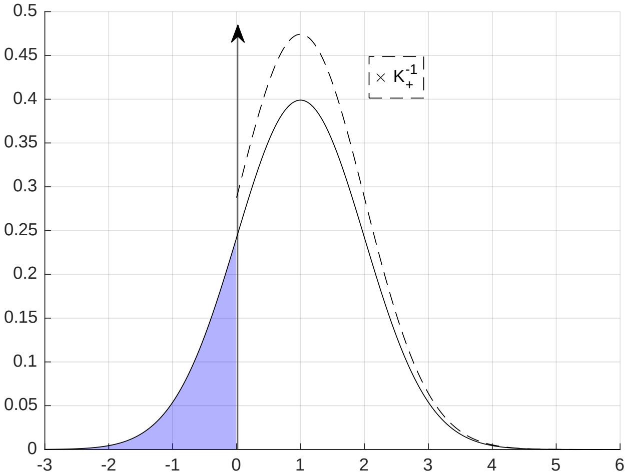


Figure 4 – Rejet de la masse bleue → rehaussement de la partie positive

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

$$\phi_+^{-1}(u) = \mu + \sqrt{\frac{2}{\gamma}}\text{erfinv}\left\{(u-1)\text{erf}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{2}}\mu\right) + u\right\} \tag{16}$$

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 conditionnelles $x_i \mid \mathbf{x}_{-i}, \lambda, \delta$
- 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 :

$$\mathbf{P}_k \mathbf{x}^k = \lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k \tag{13}$$

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

L'étape 1 du MCMC comme un système linéaire

$$\mathbf{x}^k \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{P}_k^{-1}\lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{b}, \mathbf{P}_k^{-1}\right) \tag{10}$$

$$\mathbf{P}_k\mathbf{x}^k = \lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k \tag{13}$$

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

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

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

Un problème d'optimisation : *Perturbation Optimisation*

Formulation du problème d'optimisation

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

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

$$f'(\mathbf{x}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{P}_k \mathbf{x} = \lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k \qquad (13)$$

Ajout de la contrainte de non négativité

$$\mathbf{x}_{CON}^{k} = \underset{\color{red}{x \geq 0}}{\arg\min} \left\{ \frac{1}{2}\mathbf{x}^t \mathbf{P}_k \mathbf{x} - \mathbf{x}^t(\lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \right\} \qquad (23)$$

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

$$\mathbf{x}_{CON}^k = \arg\min_{\mathbf{x}\geq 0} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{UC}^k\|_{\mathbf{P}_k}^2 \tag{22}$$

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

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

Lien avec l'échantillonnage sans contrainte

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}^* &= \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ \mathbf{x}^t \mathbf{P}_k \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^t(\lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \\
&= \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ \frac{1}{2}\mathbf{x}^t \mathbf{P}_k \mathbf{x} - \mathbf{x}^t(\lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \\
\mathbf{x}_{CON}^k &= \underset{\mathbf{x}\geq 0}{\arg\min}\ \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{UC}^k\|_{\mathbf{P}_k}^2
\end{aligned}
\tag{22}
$$

Dégénérescence de la matrice de régularisation [2012]

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

$\mathbf{D_x}$: matrice diagonale $[\mathbf{D_x}]_{ii} = \begin{cases} 1 \text{ si } x_i > 0 \\ 0 \text{ si } x_i = 0 \end{cases}$

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

$$p(\mathbf{x} \mid \delta) \propto \delta^{n_p/2} \exp\left(-\frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{C}\mathbf{x}\right) \tag{18}$$

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

Dégénérescence de la matrice de régularisation [2020]

Définitions

$$\mathcal{A}(\mathbf{x}) = \{i \mid x_i = 0\} \qquad \mathcal{I}(\mathbf{x}) = \{i \mid x_i > 0\}$$

$$\mathbf{x}_\mathcal{A} = \mathbf{D}_\mathcal{A}\mathbf{x} \qquad \mathbf{x}_\mathcal{I} = \mathbf{D}_\mathcal{I}\mathbf{x}$$

$$\mathbf{x}_\mathcal{A} = \mathbf{0} \qquad \mathbf{x}_\mathcal{I} > \mathbf{0}$$

$\mathbf{D}_\mathcal{I}$ est la matrice identité I_N sans les lignes d'indices i de $\mathcal{A}(\mathbf{x})$.
Idem pour $\mathbf{D}_\mathcal{A}$ avec les indices de $\mathcal{I}(\mathbf{x})$...

L'ensemble $\mathcal{I}$ était implicite en 2012

$$p(\mathbf{x}, \mathcal{I} \mid \mathbf{b}, \lambda, \delta) = p(\mathbf{x} \mid \mathbf{b}, \lambda, \delta, \mathcal{I}) p(\mathcal{I} \mid \mathbf{b}, \lambda, \delta) \tag{17}$$

Dégénérescence de la matrice de régularisation [2020]

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x} \mid \mathbf{b}, \lambda, \delta, \mathcal{I}) &\propto \mathbb{1}_{\Omega}(\mathbf{x}) p(\mathbf{b} \mid \mathbf{x}, \lambda, \mathcal{I}) p(\mathbf{x} \mid \delta, \mathcal{I}) \\ &\propto \mathbb{1}_{\Omega}(\mathbf{x}) \exp\left(-\frac{\lambda}{2}\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 - \frac{\delta}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{Cx}\right) \delta_0(\mathbf{D}_{\mathcal{A}}\mathbf{x}) \\ &\propto \mathbb{1}_{\Omega_{\mathcal{I}}}(\mathbf{x}_{\mathcal{I}}) \exp\left(-\frac{\lambda}{2}\|\mathbf{A}_{\mathcal{I}}\mathbf{x}_{\mathcal{I}} - \mathbf{b}\|_2^2 - \frac{\delta}{2}\mathbf{x}_{\mathcal{I}}^t\mathbf{C}_{\mathcal{I}}\mathbf{x}_{\mathcal{I}}\right) \delta_0(\mathbf{D}_{\mathcal{A}}\mathbf{x}) \end{aligned}$$

On extrait $\mathbf{x} \mid \delta, \mathcal{I}$ et on calcule la constante de normalisation.

$$p(\mathbf{x} \mid \mathbf{b}, \lambda, \delta, \mathcal{I}) \propto \exp\left(-\frac{\lambda}{2}\mathbf{x}_{\mathcal{I}}^t\mathbf{C}_{\mathcal{I}}\mathbf{x}_{\mathcal{I}}\right) \delta_0(\mathbf{D}_{\mathcal{A}}\mathbf{x})$$

$$\int p(\mathbf{x} \mid \delta, \mathcal{I}) = \sqrt{\frac{(2\pi)^{n_p}}{\det(\delta\mathbf{C}_{\mathcal{I}})}} \propto \delta^{n_p/2}$$

Dégénérescence de la matrice de régularisation [2020]

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

$$p(\mathbf{x} \mid \delta, \mathcal{I}) \propto \delta^{n_p/2} \exp\left(-\frac{\delta}{2}\mathbf{x}_{\mathcal{I}}^t \mathbf{C}_{\mathcal{I}} \mathbf{x}_{\mathcal{I}}\right) \tag{18}$$

n_p est le nombre d'éléments (strictement positifs) de $\mathbf{x}_{\mathcal{I}}$.

Conditionnelle de δ (Étape 3 MCMC)

$$\delta \mid \mathbf{x}, \mathbf{b}, \mathcal{I} \sim \Gamma\left(\frac{n_p}{2} + \alpha_\delta, \frac{1}{2}\mathbf{x}_{\mathcal{I}}^t \mathbf{C}_{\mathcal{I}} \mathbf{x}_{\mathcal{I}} + \beta_\delta\right) \tag{21}$$

Les auteurs déclarent avoir de meilleurs intervalles de confiance après la correction en rouge (en 2012 et en 2020).
En 2012 : $\mathbf{D}_{\mathcal{I}} = I_N$, même performance (plus coûteux en calculs).

Un algorithme d'optimisation : GPCG

Gradient Projection – Conjugate Gradient (GPCG)

$$\mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x}\geq 0} \left\{ q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{B}\mathbf{x} - \mathbf{x}^t\mathbf{c} \right\} \tag{24}$$

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

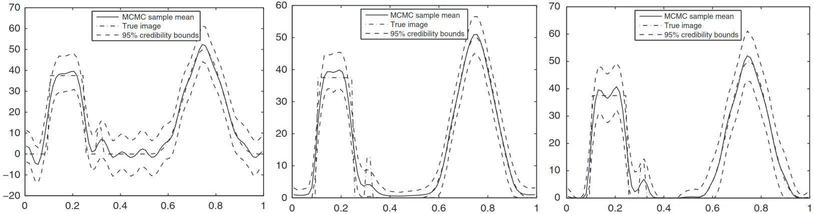
$$\mathbf{c} = \lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k$$

Introduction d'un opérateur maximum avec 0 sur chaque composante $\max(0, x_i)$ dans les itérations.

- 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]	$\times$	[7.66, 8.14]
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 : avec de l'optimisation
- Meilleurs résultats avec la non négativité

Références

Article de 2020

J. M. Bardsley and P.C. Hansen. *MCMC Algorithms for Computational UQ of Nonnegativity Constrained Linear Inverse Problems.* SIAM Journal on Scientific Computing, 42(2) :A1269-A1288, 2020. DOI : 10.1137/18M1234588

Article de 2012

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 : 17415977.2011.637208