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

Positivité vs non négativité

Contrainte de positivité (stricte)

Une probabilité nulle d'avoir des pixels nuls

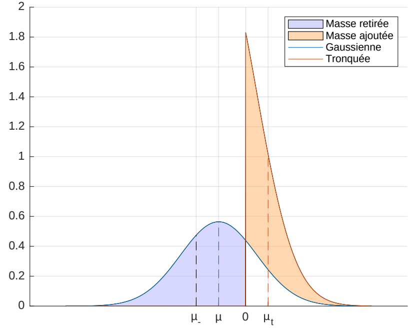
$$\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid \mathbf{x} > 0\}$$

Contrainte de non négativité

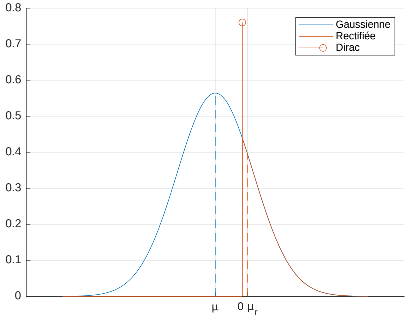
Une probabilité non nulle d'avoir des pixels nuls

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

Exemples gaussiens



(a) Normale tronquée – Positivité



(b) Normale rectifiée – Non négativité

Figure 2 – Exemples possibles de modifications

Notations

Modèle d'observation linéaire

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \boldsymbol{\eta} \tag{1}$$

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

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

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

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

Modèle hiérarchique

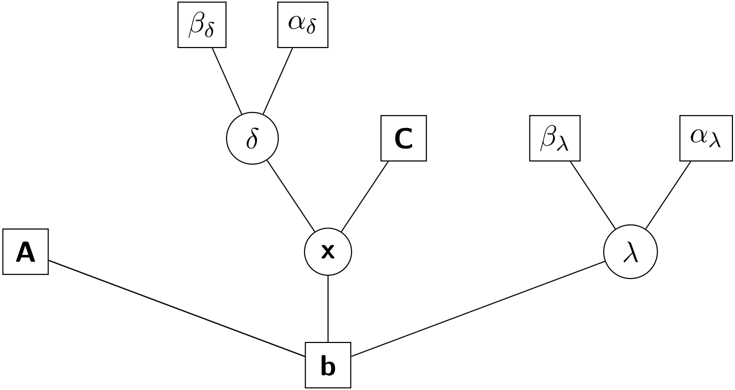


Figure 3 – Les paramètres entourés sont estimés, les encadrés sont connus

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

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

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 :

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

[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 marginales.

Marginale 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

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

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

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

Formulation équivalente de l'étape 1 du MCMC

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

$$= x_i P_{ii} x_i + x_i \sum_{\substack{k=1 \\ k \ne i}}^{N} P_{ik} x_k + \sum_{\substack{k=1 \\ k \ne i}}^{N} x_k P_{ki} x_i - 2\lambda x_i [A_{ki}]_{1 \le k \le N}^t \mathbf{b}$$

$$\sim P_{ii} {x_i}^2 + 2 \frac{P_{ii}}{P_{ii}} x_i (\mathbf{P}_{-i} \mathbf{x}_{-i} - \lambda [\mathbf{A}^t \mathbf{b}]_i)$$

$$\sim P_{ii} {x_i}^2 - 2 P_{ii} x_i \frac{\lambda [\mathbf{A}^t \mathbf{b}]_i - \mathbf{P}_{-i} \mathbf{x}_{-i}}{P_{ii}}$$

Exposant d'une gaussienne univariée

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

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 :

$$x_i^k \mid \mathbf{x}_{-i}, \lambda_k, \delta_k \sim \mathcal{N}\left(\frac{\lambda[\mathbf{A}^t\mathbf{b}]_i - \mathbf{P}_{-i}\mathbf{x}_{-i}}{P_{ii}}, P_{ii}\right) \tag{11}$$

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

Ajout de la contrainte de positivité

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

Ajout de la contrainte

Tirer tour-à-tour les x_i^k selon :

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

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

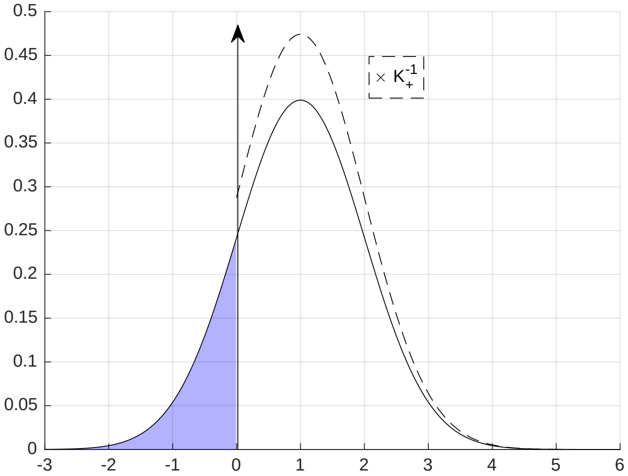


Figure 4 – Rejet de la masse bleue → rehaussement de la partie positive

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

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

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

L'étape 1 du MCMC comme un système linéaire

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

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

$\mathbf{w}_k$ 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

$$\mathbf{x}^k_{CON} = \arg\min_{x \geq 0} \left\{ \frac{1}{2}\mathbf{x}^t \mathbf{P}_k \mathbf{x} - \mathbf{x}^t (\lambda_k \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \right\} \tag{15}$$

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

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

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

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

Lien avec l'échantillonnage sans contrainte

$$\mathbf{x}^* = \arg\min_{\mathbf{x}\geq 0} \mathbf{x}^t\mathbf{P}_k\mathbf{x} - 2\mathbf{x}^t(\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k)$$

$$= \arg\min_{\mathbf{x}\geq 0} \frac{1}{2}\mathbf{x}^t\mathbf{P}_k\mathbf{x} - \mathbf{x}^t(\lambda_k\mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k) \tag{15}$$

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

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

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

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

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

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

Dégénérescence de la matrice de régularisation [2020]

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

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

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

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

Marginale de δ (Étape 3 MCMC)

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

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)

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

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

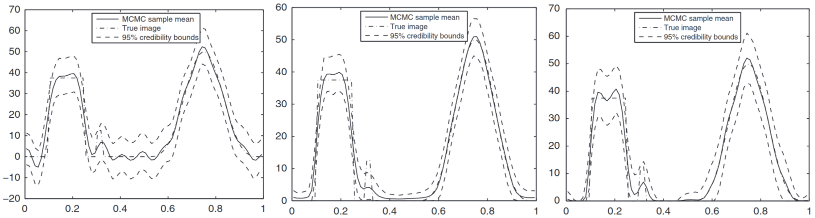
$$\mathbf{c} = \lambda_k \mathbf{A}^t\mathbf{b} + \mathbf{w}_k$$

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