



THÈSE

En vue de l'obtention du DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'Université Toulouse 3 - Paul Sabatier

Présentée et soutenue par
Mehdi Chahine AMROUCHE

Le 1 décembre 2021

**Échantillonnage stochastique efficace par modèle Bernoulli
mélange de Gaussiennes pour la résolution des problèmes
inverses parcimonieux.**

Ecole doctorale : **EDMITT - Ecole Doctorale Mathématiques, Informatique et
Télécommunications de Toulouse**

Spécialité : **Informatique et Télécommunications**

Unité de recherche :

IRAP - Institut de Recherche en Astrophysique et Planetologie

Thèse dirigée par
Hervé CARFANTAN et Jérôme Idier

Jury

M. Jean-François GIOVANNELLI, Rapporteur
M. Pierre CHAINAIS, Rapporteur
Mme Emilie CHOUZENOUX, Examinatrice
M. Jean-Yves TOURNERET, Examineur
M. Hervé CARFANTAN, Directeur de thèse
M. Jérôme IDIER, Co-directeur de thèse

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes directeurs de recherche Hervé et Jérôme. Merci de m'avoir introduit aux fabuleux mondes des problèmes inverse, de l'échantillonnage stochastique et des mélanges de gaussiennes. J'ai énormément apprécié travailler avec vous sur ces différentes thématiques durant ces trois années de thèse.

Un grand merci à mes amis (et anciens co-bureau #McLarens / #Neurasthéniques) Andréa, Mégane et Wilhem pour leur soutien moral quotidien, et surtout, pour leurs conseils précieux et avisés.

Par ailleurs, je tiens à remercier tous les collègues de notre laboratoire de recherche avec qui j'ai pu interagir au quotidien, et particulièrement mes collègues de l'équipe SISU. Ce furent trois agréables et mémorables années.

Enfin, mais pas des moindres, merci à mes chers parents. Il est inutile de préciser que sans vous, je ne serais pas là où je suis. Sans votre soutien, je n'aurais jamais pu accomplir ce travail. Cette thèse vous est dédiée... Merci.

Résumé

Cette thèse aborde la résolution des problèmes inverses parcimonieux quand les données observées peuvent être considérées comme une combinaison linéaire d'un faible nombre d'éléments dits « atomes » (*e.g.*, impulsions, réponse instrumentale décalée ou sinusoïdes). Ces problèmes sont rencontrés dans différents domaines d'application, allant du contrôle non destructif ultrasonore, à la spectroscopie et l'analyse spectrale. Dans le contexte bayésien, ces problèmes peuvent être abordés en considérant des modèles *a priori* sur les paramètres d'intérêts, prenant en compte la parcimonie de façon explicite via l'introduction de variables binaires (*e.g.*, modèle Bernoulli-Gaussien). L'estimation des paramètres se fait ensuite en calculant un estimateur de type espérance a posteriori à partir d'échantillons générés par des méthodes Monte-Carlo par chaînes de Markov (MCMC). L'avantage majeur des méthodes MCMC dans le contexte bayésien, par rapport aux approches d'optimisation déterministes, est la possibilité d'intégrer sans grande difficulté l'estimation des hyper-paramètres du modèle (*e.g.*, la variance du bruit d'observation) ainsi que de se placer dans un cadre semi-aveugle ou aveugle, c'est-à-dire des cas où les atomes sont partiellement ou totalement inconnus. Cependant, ces méthodes MCMC sont généralement très coûteuses en temps de calcul et nécessitent d'être manipulées avec soin afin de garantir leur convergence. Des approches d'échantillonnage efficace s'appuyant sur le *Partially Collapsed Gibbs Sampler* (PCGS) ont été développées dans le cas du modèle Bernoulli-Gaussien. Cependant, elles ne peuvent pas être utilisées dès que l'on souhaite considérer d'autres *a priori* parcimonieux, avec des lois à longues queues (*e.g.*, Bernoulli-Laplace) qui sont préférables à la Gaussienne car elles induisent une moindre régularisation ; ou avec des lois à support réduit (*e.g.*, Bernoulli-Exponentiel) afin de garantir une contrainte de non-négativité. On est alors restreint à l'utilisation des méthodes MCMC classiques coûteuses en temps de calcul. L'objectif de cette thèse est de réconcilier l'échantillonnage PCGS avec des modèles prenant en compte la parcimonie de façon explicite autres que le modèle Bernoulli-Gaussien. La principale contribution est l'introduction et l'étude d'un nouveau modèle *a priori* dit « Bernoulli Mélange de Gaussiennes » (BMG). Ce dernier repose sur les lois de mélange continu de Gaussiennes et permet l'amélioration des propriétés de convergence des méthodes MCMC grâce à une implémentation numérique efficace d'algorithmes PCGS. D'autre part, le modèle est présenté dans un cadre général, permettant de prendre en compte, de manière systématique, de nombreuses lois de probabilité. Pour ces travaux, nous avons exploité des lois de probabilité de la famille LSMG (*Location and Scale Mixture of Gaussians*), peu étudiée dans la littérature, que nous avons caractérisées plus précisément. Une deuxième contribution majeure consiste à étendre le champ d'application du modèle BMG aux lois de probabilité à support réduit. Ainsi, nous avons proposé une nouvelle approche d'approximation de lois de probabilité dénommée « *asymptotically Exact Location-Scale Approximations* » (ELSA) pour laquelle nous avons montré le bon comportement, à la fois en théorie et en pratique et avons montré empiriquement son efficacité par rapport aux approches de l'état de l'art. Enfin, l'efficacité du nouveau modèle BMG, de son échantillonneur PCGS et des approximations ELSA est étudiée et validée dans le cadre des problèmes inverses parcimonieux sur un exemple de déconvolution de train d'impulsions.

Mots clés : Problèmes inverses, Parcimonie, Échantillonnage stochastique, Mélanges continus de Gaussiennes, Inférence bayésienne

Abstract

This thesis deals with sparse inverse problems when the observed data can be considered as a linear combination of a small number of elements called « atoms » (*e.g.*, pulses, shifted instrumental response or sinusoids). These problems are encountered in various domains, ranging from ultrasonic non-destructive testing to spectroscopy and spectral analysis. In the Bayesian framework, these problems can be addressed by considering *a priori* models on the parameters of interest that take into account the sparsity explicitly via the introduction of binary variables (*e.g.*, Bernoulli-Gaussian model). The estimation of the parameters is done by computing the posterior mean estimator from samples generated by Markov chain Monte Carlo (MCMC) methods. The major advantage of MCMC methods in the Bayesian framework, compared to deterministic optimization approaches, is the possibility of integrating without much difficulty the estimation of the hyper-parameters of the model (*e.g.*, the variance of the observation noise) as well as considering semi-blind or blind settings, *i.e.*, cases where the atoms are partially or totally unknown. However, MCMC methods are generally computationally expensive and need to be handled carefully to ensure their convergence. An efficient sampling approaches based on the Partially Collapsed Gibbs Sampler (PCGS) have been developed for the Bernoulli-Gaussian model. However, it cannot be used with other sparse enforcing priors, such as priors with long-tailed distributions (*e.g.*, Bernoulli-Laplace) which are preferable to the Gaussian because they induce less regularization ; or with distributions supported in a bounded interval (*e.g.*, Bernoulli-Exponential) in order to guarantee a non-negativity constraint. As a result one is restricted to the computationally expensive classical MCMC methods. The objective of this thesis is to reconcile PCGS sampling with models that explicitly take into account sparsity other than the Bernoulli-Gaussian model. The main contribution is the introduction and study of a new prior model called « Bernoulli Mixture of Gaussians » (BMG). The latter, based on continuous Gaussian mixtures improves the convergence properties of MCMC methods thanks to an efficient numerical implementation of PCGS algorithms. On the other hand, the model is presented in a general framework, allowing to take into account, in a systematic way, a rich family of probability distributions. More precisely, the BMG relies on the LSMG (Location and Scale Mixture of Gaussians) family, which we have studied and characterized. The second major contribution consists in extending the field of application of the BMG model to probability distributions supported on a bounded interval. Thus, we have proposed a new approach to approximate probability distributions called « asymptotically Exact Location-Scale Approximations » (ELSA) for which we have shown good behavior, both in theory and in practice and empirically validate its efficiency compared to state-of-the-art approaches. Finally, the efficiency of the BMG model, its PCGS sampler and ELSA approximations is studied and validated in the context of sparse inverse problems on an example of spike train deconvolution.

Keywords : Inverse problems, Sparsity, Stochastic sampling, Continuous Gaussian mixtures, Bayesian inference

Table des matières

Remerciements	i
Résumé	iii
Abstract	v
Table des matières	vii
Notations et acronymes	xi
1 Introduction	1
1.1 Problèmes inverses parcimonieux	2
1.2 Méthodes de résolution des problèmes inverses parcimonieux	5
1.2.1 Méthodes d'optimisation déterministes	5
1.2.1.1 Méthodes de relaxation	6
1.2.1.2 Algorithmes gloutons	7
1.2.1.3 Reformulation en MIP	8
1.2.1.4 Conclusion sur les approches optimisation	9
1.2.2 Approches bayésiennes et échantillonnage stochastique	9
1.2.2.1 Lien entre l'approche bayésienne et les méthodes d'optimisation déterministes	11
1.2.2.2 <i>A priori</i> de parcimonie explicite	11
1.2.2.3 Conclusion sur l'approche bayésienne	16
1.2.3 Conclusion sur les méthodes de résolution de problèmes inverses parcimonieux	16
1.3 Méthodes générales d'échantillonnage stochastique efficace	17
1.3.1 Méthodes MCMC inspirées de l'optimisation	18
1.3.2 MCMC et augmentation de données	20
1.3.3 Échantillonneurs partiellement marginalisés	23
1.3.4 Conclusion sur l'échantillonnage stochastique efficace	25
1.4 Objectifs de la thèse et pistes suivies	25
1.4.1 Contributions	27
1.4.2 Plan du manuscrit.	28
2 Lois de mélange continu de gaussiennes	31
2.1 Introduction	32
2.1.1 Classes de mélange de gaussiennes	33
2.1.2 Mélange de gaussiennes et optimisation déterministe	37
2.1.3 Mélange de gaussiennes et échantillonnage stochastique	39
2.2 Étude de la classe LSMG	40

2.2.1	Construction des lois LSMG	40
2.2.2	Caractérisation des lois LSMG	42
2.3	Approximations asymptotiquement exactes	43
2.3.1	ELSA : approximation LSMG asymptotiquement exacte	43
2.3.2	Exemple d'approximation ELSA pour la loi gaussienne tronquée	46
2.3.3	Exemple d'approximation ELSA pour la loi exponentielle et cas limites de la famille GH	47
2.4	Expériences préliminaires	50
2.4.1	Exemple 1 : cas d'un <i>a priori</i> Exponentiel	51
2.4.2	Exemple 2 : cas d'un <i>a priori</i> de Laplace	54
2.5	Conclusion	60
3	A priori Bernoulli mélange de gaussiennes et échantillonnage PCGS	63
3.1	L' <i>a priori</i> Bernoulli mélange de gaussiennes	64
3.2	Lois <i>a posteriori</i> et marginalisation	66
3.2.1	Loi <i>a posteriori</i> conditionnelle des amplitudes \mathbf{x}	67
3.2.2	Loi <i>a posteriori</i> marginalisée par rapport à \mathbf{x}	67
3.2.3	Loi <i>a posteriori</i> des hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$	67
3.3	Échantillonneur PCGS pour le modèle Bernoulli mélange de gaussiennes	69
3.4	Implémentation efficace du PCGS	72
3.4.1	Simplification de la fonction ψ	73
3.4.2	Factorisation de Cholesky	74
3.4.3	Mise à jour des matrices \mathbf{G} et \mathbf{F}	74
3.4.4	Simplification de la fonction ϕ	77
3.4.5	Implémentation efficace avancées	78
3.5	Cas semi-aveugle ou aveugle	78
3.6	Bilan	79
4	Expériences et validations	81
4.1	Introduction	81
4.1.1	Diagnostic de convergence	82
4.1.2	Estimation des paramètres	83
4.2	Déconvolution impulsionnelle : <i>a priori</i> Bernoulli-Laplace	84
4.2.1	Données	85
4.2.2	Analyse des résultats	85
4.2.3	Mise à l'échelle	91
4.3	Déconvolution impulsionnelle semi-aveugle non négative	93
4.3.1	Données	94
4.3.2	Analyse des résultats	94
4.3.3	Analyse des résultats en fonction du paramètre d'approximation β	98
4.4	Bilan	100
5	LSMG et méthodes d'optimisation semi-quadratiques asymétriques	103
5.1	Introduction	103
5.2	Approches semi-quadratiques GR asymétriques (AGR)	105
5.3	Interprétation bayésienne du schéma AGR	107
5.4	Bilan et perspectives	110

6	Conclusion et perspectives	111
6.1	Bilan des contributions	111
6.2	Perspectives	112
6.3	Pistes de travail	113
6.3.1	Approximations ELSA avec paramètre de décalage	113
6.3.2	Approximations de lois supportées sur un intervalle	117
	Annexes	121
A	Annexe du chapitre 2	123
A.1	Démonstration du Théorème 3 (p. 36) sur la différentiabilité des densités SMG	123
A.2	Démonstration du Corollaire 1 (p. 36) sur la non différentiabilité des densités SMG	125
A.3	Lemmes auxiliaires	125
A.3.1	Lemme de symétrisation des densités de probabilité	125
A.3.2	Lemme de décomposition des densités de probabilité	126
A.4	Démonstration de la Proposition 1 (p. 41) sur la construction des lois LSMG	127
A.5	Démonstration de la Proposition 2 (p. 41) sur la décomposition des lois LSMG	128
A.6	Démonstration du Corollaire 3 (p. 42)	129
A.7	Démonstration du Corollaire 4 (p. 42)	129
A.8	Démonstration du Corollaire 5 (p. 42)	129
A.9	Démonstration du Théorème 4 (p. 43) sur la caractérisation des lois LSMG	130
A.10	Démonstration du Théorème 5 (p. 44) sur la convergence en probabilité de ELSA	131
A.11	Démonstration de la Proposition 3 (p. 44) sur les propriétés de ELSA	132
A.12	Démonstration de la Proposition 4 (p. 49)	134
B	Annexe du chapitre 3	135
B.1	Rappel de quelques théorèmes sur les matrices	135
B.1.1	Lemme d'inversion matricielle.	135
B.1.2	Lemme d'inversion matricielle par blocs.	135
B.1.3	Généralisation du lemme du déterminant matriciel.	135
B.1.4	Identité pour la mise à jour de Cholesky de rang 1	135
B.2	Calcul de la loi <i>a posteriori</i> conditionnelle des amplitudes (Section 3.2.1 p. 67)	136
B.3	Calcul de la loi <i>a posteriori</i> marginalisée par rapport aux amplitudes (Section 3.2.2 p. 67)	137
B.4	Implémentation efficace du PCGS	139
B.4.1	Simplification de la fonction ψ (3.17) p. 72)	139
B.4.2	Factorisation de Cholesky (Section 3.4.2 p. 74)	141
B.4.3	Mise à jour de la matrice \mathbf{F} dans le cas d'une <i>Naissance</i> (Section 3.4.3 p. 74)	141
B.4.4	Mise à jour de la matrice \mathbf{F} dans le cas d'une <i>Mort</i> - Cas 1 (Section 3.4.3 p. 74)	143
B.4.5	Mise à jour de la matrice \mathbf{F} dans le cas d'une <i>Mort</i> - Cas 2 (Section 3.4.3 p. 74)	143
B.4.6	Simplification de la fonction ϕ (Section 3.4.4 p. 77)	146
B.5	Pseudo-code détaillé de l'étape RJ-MCMC	148
C	Annexe du chapitre 5	151
C.1	Démonstration de la Proposition 5 (p. 108)	151
C.2	Démonstration de la Proposition 6 (p. 109)	152

D Lois de probabilité et fonctions non élémentaires	153
Notations et acronymes	153
Table des figures	155
Liste des tableaux	159
Bibliographie	170

Notations et acronymes

Afin d'accompagner le lecteur dans la compréhension du manuscrit, ce chapitre détaille les acronymes et les notations les plus utilisés.

Acronymes

AXDA	<i>Asymptotically Exact Data Augmentation</i>
B-\mathcal{D}	Bernoulli- \mathcal{D}
BE	Bernoulli-Exponentiel
BG	Bernoulli-Gaussien
BL	Bernoulli-Laplace
BMG	Bernoulli Mélange de Gaussiennes
EAP	Espérance <i>a posteriori</i>
ELSA	<i>asymptotically Exact Location-Scale Approximations</i>
LMG	<i>Location Mixture of Gaussians</i>
LSMG	<i>Location-Scale Mixture of Gaussians</i>
MAP	Maximum <i>a posteriori</i>
MCMC	Monte-Carlo par Chaînes de Markov
MH	Metropolis-Hastings
MPSRF	<i>Multivariate Potential Scale Reduction Factor</i>
PCGS	<i>Partially Collapsed Gibbs Sampler</i>
RSB	Rapport Signal sur Bruit
RWMH	<i>Random Walk Metropolis-Hastings</i>
SISU	Signal Image en Sciences de l'Univers
SMG	<i>Scale Mixture of Gaussians</i>
VA	Variable Aléatoire

Notations mathématiques

\mathbb{F}	Espace \mathbb{R}_+ , \mathbb{R} ou \mathbb{C}
\mathbb{S}	Sous-ensemble des nombres réels tel que $\mathbb{S} \subseteq \mathbb{R}$
\mathbb{D}_M	Sous-ensemble de dimension M avec $\mathbb{D}_M = \mathbb{D}_1 \times \dots \times \mathbb{D}_M$, et $\forall i, \mathbb{D}_i \subseteq \mathbb{R}$
$\llbracket 1; N \rrbracket$	Ensemble des entiers entre 1 et N
$\text{card}(\cdot)$	Nombre d'éléments dans l'ensemble
\cdot^T	Transposée

Notations : problèmes inverses parcimonieux

\mathbf{y}	Signal, données	$N \times 1$
ϵ	Bruit additif	$N \times 1$
$\mathbf{h}_k(\cdot)$	Atome d'indice k	$P \times 1$
\mathbf{H}	Dictionnaire discret $\mathbf{H} = [\mathbf{h}_1, \dots, \mathbf{h}_K]$	$N \times K$
$\bar{\mathbf{H}}$	Dictionnaire réduit (atomes d'amplitudes non nulles)	$N \times L$
x_k	Amplitude de atome d'indice k	
\mathbf{x}	Amplitudes $\mathbf{x}^T = [x_1, \dots, x_K]^T$	$K \times 1$
$\bar{\mathbf{x}}$	Amplitudes réduites (non nulles)	$L \times 1$
L	Ordre du modèle	
Ω	Support $\Omega = \text{Supp}(\mathbf{x}) = \{k \in \llbracket 1; K \rrbracket, x_k \neq 0\}$	
$\ \cdot\ , \ \cdot\ _2$	Norme euclidienne	
$\ \mathbf{x}\ _{\mathbf{A}}^2$	Norme pondérée : $\ \mathbf{x}\ _{\mathbf{A}}^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$ avec \mathbf{A} matrice semi-définie positive	
$\ \mathbf{x}\ _0$	Pseudo-norme ℓ_0 : $\ \mathbf{x}\ _0 = \#(\text{Supp}(\mathbf{x}))$	
$\ \mathbf{x}\ _{\infty}$	Norme infini : $\ \mathbf{x}\ _{\infty} = \max(x_1 , \dots, x_K)$	

Notations : estimation et algorithmes

t	Indices des échantillons des algorithmes MCMC
T	Nombre maximale des échantillons des algorithmes MCMC
$\mathbf{u}^{(t)}$	Vecteur \mathbf{u} à l'itération t
$\mathbf{u}_{a:b}$	Vecteur regroupant les éléments de \mathbf{u} d'indice $k \in \llbracket a; b \rrbracket$
$\hat{\mathbf{u}}$	Estimée de \mathbf{u}
$\hat{\mathbf{q}}$	Séquence binaire seuillée

Notations : probabilité et statistique

$\mathbb{E}[\cdot]$	Espérance d'une variable aléatoire
Corr	Coefficient de corrélation
\mathcal{D}	Loi de probabilité quelconque
\mathcal{D}_X	Loi de probabilité de la variable aléatoire X
TV	Variation totale
$\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Gamma})$	Loi gaussienne de moyenne $\boldsymbol{\mu}$ et covariance $\boldsymbol{\Gamma}$
$\mathbb{G}(\cdot; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Gamma})$	Pdf d'une gaussienne de moyenne $\boldsymbol{\mu}$ et covariance $\boldsymbol{\Gamma}$
$\stackrel{d}{=}$	Égalité en distribution

Afin d'accompagner le lecteur dans la compréhension du manuscrit, une liste des lois de probabilité et fonctions non élémentaires utilisées est donnée en Annexe D.

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	Problèmes inverses parcimonieux	2
1.2	Méthodes de résolution des problèmes inverses parcimonieux	5
1.2.1	Méthodes d'optimisation déterministes	5
1.2.1.1	Méthodes de relaxation	6
1.2.1.2	Algorithmes gloutons	7
1.2.1.3	Reformulation en MIP	8
1.2.1.4	Conclusion sur les approches optimisation	9
1.2.2	Approches bayésiennes et échantillonnage stochastique	9
1.2.2.1	Lien entre l'approche bayésienne et les méthodes d'optimisation déterministes	11
1.2.2.2	<i>A priori</i> de parcimonie explicite	11
1.2.2.3	Conclusion sur l'approche bayésienne	16
1.2.3	Conclusion sur les méthodes de résolution de problèmes inverses parcimonieux	16
1.3	Méthodes générales d'échantillonnage stochastique efficace	17
1.3.1	Méthodes MCMC inspirées de l'optimisation	18
1.3.2	MCMC et augmentation de données	20
1.3.3	Échantillonneurs partiellement marginalisés	23
1.3.4	Conclusion sur l'échantillonnage stochastique efficace	25
1.4	Objectifs de la thèse et pistes suivies	25
1.4.1	Contributions	27
1.4.2	Plan du manuscrit.	28

Ce manuscrit regroupe les travaux de la thèse intitulée : *Échantillonnage stochastique efficace par modèle Bernoulli mélange de Gaussiennes pour la résolution des problèmes inverses parcimonieux*. Cette thèse a été réalisée au sein de l'équipe *Signal Images en Sciences de l'Univers* (SISU) de l'*Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie* (IRAP), à Toulouse et en collaboration avec le *Laboratoire des Sciences du Numérique* (LS2N) à Nantes.

Les travaux de recherche effectués durant cette thèse concernent à la résolution des *problèmes inverses parcimonieux* dans le cadre de l'inférence bayésienne exploitant un *a priori* de *parcimonie* explicite et utilisant des méthodes d'échantillonnage stochastique en particulier les méthodes de *Monte Carlo par Chaînes de Markov* (MCMC). Plus précisément, nous nous sommes intéressés à l'étude d'un nouveau modèle *a priori* visant, en plus de proposer un cadre unificateur pour

la résolution de ce type de problème, à améliorer les propriétés de mélange et la convergence des méthodes MCMC utilisées dans ce contexte.

Nous commençons dans ce chapitre par introduire les différentes notions, définitions et notations qui permettent d'exposer le contexte général des problèmes inverses parcimonieux traités dans cette thèse, en nous appuyant sur quelques exemples d'applications concrètes. La suite de ce chapitre introductif sera composée de deux sections principales. Dans la première (section 1.2), nous donnons une analyse de l'état de l'art des méthodes de résolution des problèmes inverses parcimonieux aussi bien dans le cadre des approches d'optimisation déterministe que dans le cadre des méthodes MCMC, dans le but de motiver les choix et pistes de recherches que nous avons envisagées. Dans la deuxième (section 1.3), nous nous plaçons dans le cadre bayésien pour revenir sur les principales approches d'échantillonnage stochastique efficace, qui ont été développées dans le cadre de la résolution des problèmes inverses. Ici encore, le but est de motiver nos choix et faire une analyse des différentes méthodes existantes afin de mieux positionner nos contributions par rapport à ces dernières.

Finalement, nous concluons ce premier chapitre par une discussion sur les objectifs principaux de notre travail et justifions les pistes de recherche envisagées. Le plan général du manuscrit ainsi que les chapitres suivants qui regroupent nos travaux seront introduits en précisant nos principales contributions.

1.1 Problèmes inverses parcimonieux

Dans ce manuscrit, nous allons nous pencher sur les problèmes inverses parcimonieux pour lesquels les données observées peuvent être considérées comme une combinaison linéaire bruitée d'un faible nombre de fonctions (*e.g.*, signaux, spectres, réponses impulsionnelles...), que l'on appelle également *atomes*, choisis dans une grande famille appelée *dictionnaire*. D'un point de vue mathématique, le modèle d'observation des données, notées par \mathbf{y} , peut être formulé comme suit :

$$\mathbf{y} = \sum_{k=1}^K \mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k) x_k + \boldsymbol{\epsilon} = \sum_{k \in \Omega} \mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k) x_k + \boldsymbol{\epsilon} \quad (1.1)$$

avec :

- $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^N$, signal ou données observées,
- $x_k \in \mathbb{S} \subseteq \mathbb{R}$, amplitude associé à l'atome d'indice k , avec $\mathbf{x} = [x_k, \dots, x_K]^T \in \mathbb{S}^K$,
- Ω , support de \mathbf{x} tel que $\Omega = \{k \in \llbracket 1; K \rrbracket \mid x_k \neq 0\}$, avec $\text{card}(\Omega) = L$,
- $\mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k) \in \mathbb{R}^N$, atome d'indice k ,
- $\boldsymbol{\nu}_k \in \mathbb{D}_Q$, paramètres liés à l'atome \mathbf{h}_k ,
- $\boldsymbol{\epsilon} \in \mathbb{R}^N$, représente le bruit lié aux erreurs de mesures et/ou de modélisation.

Le problème est dit *parcimonieux* quand le nombre d'éléments non nuls des amplitudes x_k est faible, en d'autres termes $\text{card}(\Omega) = L \ll K$.

Ce modèle d'observation (1.1) peut être commodément réécrit sous une forme matricielle en définissant le dictionnaire $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})$ regroupant tous les atomes tel que $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu}) = [\mathbf{h}_1(\boldsymbol{\nu}_1), \dots, \mathbf{h}_K(\boldsymbol{\nu}_K)]$:

$$\mathbf{y} = \mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon} \quad (1.2)$$

L'objectif des problèmes inverses parcimonieux est d'estimer le vecteur parcimonieux \mathbf{x} à partir des données observées \mathbf{y} . Suivant les domaines d'applications, le degré de parcimonie L du signal \mathbf{x} peut être *a priori* connu ou non. Par ailleurs, dans certains cas, les atomes \mathbf{h}_k peuvent dépendre d'un ou plusieurs hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}$ qui sont soit connus au préalable soit inconnus et nécessitent donc d'être estimés également. Ces hyper-paramètres peuvent être soit des paramètres qui définissent la forme des atomes (*e.g.*, [MIB05]) soit des paramètres de localisation des atomes (*e.g.*, [Bou19]) dans le cadre des problèmes avec dictionnaires continus par exemple.

Dans la littérature, ce problème qui consiste à restituer le vecteur parcimonieux \mathbf{x} à partir des données est parfois dénommé «problème de sélection de sous-ensemble» (*subset selection problem*) car il consiste à retrouver le sous-ensemble des colonnes du dictionnaire $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})$ (qui est équivalent au support Ω du vecteur \mathbf{x}). Il est rencontré dans un grand nombre de domaines d'applications, parmi lesquelles : la sismologie par réflexion [CCL96], l'analyse spectrale [BC06], l'analyse de séries temporelles en astronomie [Bou19] ou encore la reconstruction d'images par microscopie à force de résonance magnétique [DHT09].

Exemple : Déconvolution de train d'impulsions. L'un des exemples classiques des problèmes inverses parcimonieux en traitement du signal est la déconvolution de train d'impulsions. Le contrôle non destructif (CND) des matériaux [CBIS13], la sismologie par réflexion (SR) pour l'étude de la structure géophysique de la Terre [CCL96] et la spectroscopie (SC) [MIB05] sont des exemples typiques d'applications de déconvolution de train d'impulsions. Le but est d'extraire certaines informations à partir du signal réfléchi $y(\tau)$ résultant de l'interaction entre le milieu étudié et une onde émise, ultrasonore dans le cas du CND et sismique dans le cas de la SR, ou de recherche d'un motif apparaissant plusieurs fois de façon décalée et amplifiée/atténuée dans un signal spectral $y(\tau)$ dans le cas de la SC (voir illustration Figure 1.1).

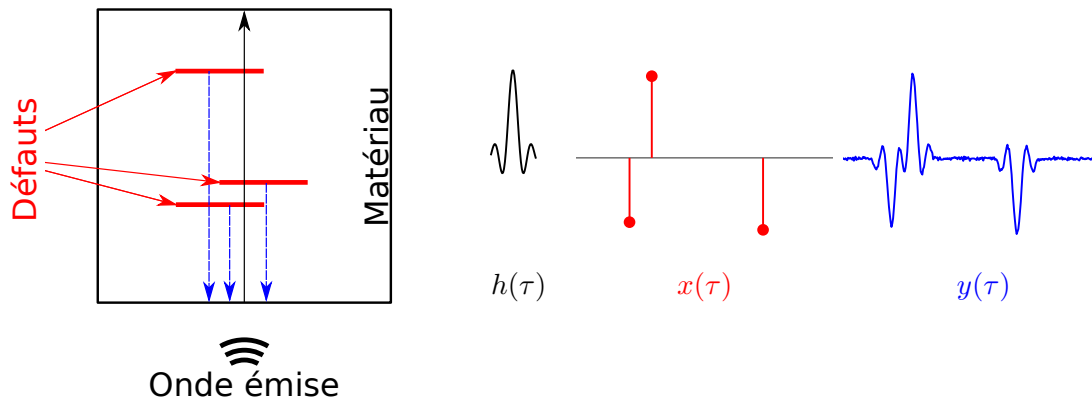


FIGURE 1.1 : Illustration de la déconvolution de train d'impulsions dans le contexte du contrôle non destructif (CND) des matériaux.

Le signal observé $y(\tau)$ peut être modélisé comme la convolution entre l'onde émise ou le motif $h(\tau)$ (réponse impulsionnelle) et un train d'impulsion $x(\tau)$ représentant la séquence de réflectivité du milieu. Cette séquence caractérise les défauts dans le matériau testé en CND ou encore les différentes couches de la surface terrestre en SR. Évidemment, ce genre d'événements (défauts dans le matériau ou nombre de couches terrestres) sont considérés peu nombreux d'où l'hypothèse de parcimonie sur $x(\tau)$. En considérant un terme additif modélisant le bruit d'observation et/ou

de modélisation $\epsilon(\tau)$, l'expression du signal observé s'écrit alors :

$$y(\tau) = (x * h)(\tau) + \epsilon(\tau) = \int_{\mathbb{R}_+} h(\tau - \alpha)x(\alpha) d\alpha + \epsilon(\tau)$$

où $*$ représente le produit de convolution et y, x, h et ϵ sont des fonctions du temps $\tau \in \mathbb{R}_+$. Le train d'impulsion est généralement restitué après échantillonnage régulier et discrétisation du modèle convolutif :

$$\mathbf{y} = \sum_k \mathbf{h}_k x_k + \boldsymbol{\epsilon}$$

Ce modèle convolutif discret est équivalent au modèle (1.2) où le dictionnaire $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})$ est une matrice *Toeplitz* dont les colonnes $\mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k)$ sont des versions discrétisées et retardées de l'onde émise h^1 .

Notons que dans certaines applications de déconvolution de train d'impulsion (*e.g.*, [MIB05]) la forme de la réponse impulsionnelle est connue mais dépendant d'un certain nombre de paramètres (*e.g.*, $h(\tau) \equiv h(\tau; \nu)$ où ν modélise la largeur des raies spectrales) inconnus qui nécessitent d'être estimés conjointement avec \mathbf{x} , nous parlerons alors de déconvolution *semi-aveugle* ou *myope*. Par ailleurs, dans certains cas (*e.g.*, [CCL96]) la forme de la réponse impulsionnelle $h(\tau)$ est elle-même inconnue et doit être estimée conjointement avec le train d'impulsions \mathbf{x} , dans ce cas l'expression de déconvolution *aveugle* est employée. Nous n'étudierons pas cette situation dans cette thèse.

Il est important de souligner que la résolution de ce type de problème de déconvolution est une tâche difficile, particulièrement quand les événements sont relativement proches les uns des autres, car ils induisent des échos superposés et difficilement discernables.

Contraintes additionnelles. Dans certaines applications, suivant la nature du problème, il est parfois nécessaire de prendre en compte des contraintes additionnelles.

Par exemple le problème de reconstruction d'images acquises par microscopie à force de résonance magnétique (MFRM) peut être traité dans le paradigme des problèmes inverses parcimonieux [DHT09] sous contrainte de non-négativité. En effet, la technique MFRM est utilisée pour observer des objets à une échelle nanométrique (*e.g.*, molécules), où la majeure partie de l'image est assez homogène. De ce fait, les images observées sont naturellement parcimonieuses.

Le modèle d'observation de ces images peut facilement être formulé sous la forme (1.2) en considérant que \mathbf{y} (respectivement \mathbf{x}) représente l'image observée (respectivement l'image parcimonieuse à estimer) vectorisée dans l'ordre lexicographique et que le dictionnaire² \mathbf{H} représente la matrice de convolution par la fonction d'étalement du point (*Point Spread Function, PSF*) qui décrit la réponse du système. Cependant, comme l'objectif est d'estimer une image parcimonieuse \mathbf{x} , qui est naturellement non négative, il est nécessaire de prendre une contrainte additionnelle de non-négativité sur \mathbf{x} . En d'autres termes $\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K = \mathbb{R}_+^K$, dans ce cas on parle de *problèmes inverses parcimonieux non-négatifs*.

Un autre exemple de problèmes inverses parcimonieux non-négatifs est rencontré en spectroscopie [GFA03, MIB05] car le signal observé \mathbf{y} est considéré comme le résultat d'une convolution entre la PSF de l'instrument (et potentiellement d'autres interactions physiques) et un spectre d'émission qui est physiquement non-négatif, d'où la contrainte de signe.

¹Dans ce contexte les atomes \mathbf{h}_k dépendent du même hyper-paramètre, c'est-à-dire, $\boldsymbol{\nu}_i = \boldsymbol{\nu}_j, \forall i, j \in \llbracket 1; K \rrbracket$.

²Dans ce cas le dictionnaire ne dépend d'aucun hyper-paramètre.

1.2 Méthodes de résolution des problèmes inverses parcimonieux

De nombreuses approches ont été proposées dans la littérature pour la résolution des problèmes inverses parcimonieux principalement quand le dictionnaire est fixé (ou de façon équivalente quand ν est connu). Ces approches peuvent être classées en deux catégories : les approches dites déterministes visant à résoudre un problème d'optimisation, et les approches d'estimation bayésienne basées sur des modélisations statistiques du problème. Comme précisé ci-dessus, nous allons nous intéresser dans ce manuscrit à la résolution des problèmes inverses parcimonieux dans le cadre de l'estimation bayésienne associée aux méthodes d'échantillonnage stochastique, et nous travaillerons à la fois sur l'amélioration des modèles et sur l'amélioration des propriétés de convergence des échantillonneurs. Néanmoins, dans cette introduction, nous donnons un aperçu des deux approches, dans le but de discuter des avantages et inconvénients de chacune des approches. Finalement, notons qu'au cours des dernières années, une grande quantité de travaux portent sur ces sujets et l'état de l'art que nous proposons est loin d'être exhaustif, nous renvoyons donc le lecteur aux références des études mentionnées pour une lecture plus approfondie.

1.2.1 Méthodes d'optimisation déterministes

Les approches dites déterministes visent à formuler les problèmes inverses parcimonieux sous la forme d'un problème d'optimisation impliquant un terme de fidélité aux données (souvent une norme euclidienne) et une contrainte de parcimonie représentée généralement par la pseudo-norme ℓ_0 du vecteur parcimonieux \mathbf{x} . Notons que dans la grande majorité des travaux effectués dans ce cadre concernent les situations où le dictionnaire est fixe, c'est-à-dire ne dépend pas de l'hyper-paramètre ν (ou de façon équivalente ν est connu) ce que l'on considère dans cette section.

Dans la littérature, le problème d'optimisation visant à résoudre les problèmes inverses parcimonieux, noté $\mathcal{P}(\ell_0)$ par la suite, peut prendre l'une des formulations suivantes :

$$\mathcal{P}(\ell_0) \begin{cases} \mathcal{P}_{2/0} : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 & \text{s.c. } \|\mathbf{x}\|_0 < L_0 \\ \mathcal{P}_{0/2} : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \|\mathbf{x}\|_0 & \text{s.c. } \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 < e_0 \\ \mathcal{P}_{2+0} : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 + \lambda_0 \|\mathbf{x}\|_0 \end{cases} \quad (1.3)$$

où $\|\cdot\|$ et la norme euclidienne, $\|\mathbf{x}\|_0$ est la pseudo-norme ℓ_0 tel que $\|\mathbf{x}\|_0 = \text{card}(\Omega)$ (*i.e.*, le nombre d'éléments non nuls de \mathbf{x}), et $\mathbb{S} \subseteq \mathbb{R}$ est le domaine de définition des amplitudes x_k . Chacune des formulations listées ci-dessus dépend d'un hyper-paramètre qui permet de régler le compromis entre la fidélité aux données et la contrainte de parcimonie : $L_0 \in \mathbb{N}_+^*$ est le niveau de parcimonie maximal, $e_0 \in \mathbb{R}_+$ est l'erreur d'approximation limite et $\lambda_0 \in \mathbb{R}_+$ est un paramètre de régularisation qui permet de régler le poids de la norme ℓ_0 vis-à-vis de la fidélité aux données.

Il est important de souligner que les trois formulations (1.3) du problème $\mathcal{P}(\ell_0)$ ne sont pas équivalentes, étant donné la non-convexité de ces problèmes. En d'autres termes, une solution de l'un des problèmes n'est pas forcément solution des autres problèmes. Cependant, il est bien connu que la résolution du problème $\mathcal{P}(\ell_0)$, quelle que soit sa formulation, n'est pas une tâche aisée. Plus particulièrement, la présence de la pseudo-norme ℓ_0 implique une exploration combinatoire de l'ensemble de toutes les configurations possibles de \mathbf{x} [Nat95]. De ce fait, ce problème est classé comme NP-difficile. En d'autres termes, c'est un problème pour lequel nous ne pouvons trouver une solution ni vérifier l'optimalité d'une solution proposée en temps polynomial.

Dans la suite de ce paragraphe, nous allons présenter certaines des pistes étudiées dans la littérature pour la résolution de ce problème. Afin de simplifier les explications, nous allons nous restreindre ici aux cas $\mathbb{S} = \mathbb{R}$, cependant plusieurs extensions des méthodes exposées ont été étudiées permettant de prendre en compte des contraintes additionnelles sur le domaine de définition des amplitudes (*e.g.*, des contraintes de non-négativité [BH16, NISD19]).

1.2.1.1 Méthodes de relaxation

Les méthodes de *relaxation convexe* visent à relaxer le problème $\mathcal{P}(\ell_0)$ en remplaçant la pseudo-norme ℓ_0 par une autre fonction de pénalité $\phi(\mathbf{x})$ qui favorise la parcimonie tout en ayant des propriétés souhaitables pour les outils d'optimisation convexe. La formulation du problème devient ainsi :

$$\mathcal{P}(\phi) \begin{cases} \mathcal{P}_{2/\phi} : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 & \text{s.c. } \phi(\mathbf{x}) < L_\phi \\ \mathcal{P}_{\phi/2} : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \phi(\mathbf{x}) & \text{s.c. } \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 < e_\phi \\ \mathcal{P}_{2+\phi} : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 + \lambda_\phi \phi(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (1.4)$$

avec $L_\phi, e_\phi, \lambda_\phi \in \mathbb{R}_+$.

Le choix le plus étudié dans la littérature est le cas de la pénalisation ℓ_1 , *i.e.*, $\phi(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|_1 = \sum_k |x_k|$, où la non-différentiabilité à l'origine de la fonction valeur absolue favorise la parcimonie de la solution [TW10]. Dans ce cas, le problème (1.4), qui est parfois dénommé *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator* (LASSO) [Tib96, FHT07], noté $\mathcal{P}(\ell_1)$ par la suite, est un problème d'optimisation continu, convexe et non différentiable. Notons que dans ce cas les trois formulations (1.4) sont équivalentes. La résolution du problème LASSO a fait l'objet de nombreux travaux de recherche. Le problème est généralement abordé sous la formulation pénalisée $\mathcal{P}_{2+\phi}$ qui relève de l'optimisation sans contrainte. On peut citer par exemple : les approches ADMM [BPC⁺11], l'algorithme FISTA [BT09], la méthode homotopique [OPT00, DT08] et l'algorithme LARS [EHJT04].

Garantie d'optimalité de la solution. Des conditions suffisantes d'équivalence entre les solutions des problèmes $\mathcal{P}(\ell_1)$ et $\mathcal{P}(\ell_0)$ ont été étudiées. Ces conditions sont basées sur la cohérence mutuelle du dictionnaire [Tro04, Fuc05, HSI13], la propriété d'isométrie restreinte (PIR) [CRT06, DW10] ou encore la condition ERC (*exact recovery condition*) [Tro04, Tro06]. Ces conditions peuvent être vues comme des conditions sur la similarité (ou corrélation) entre les atomes du dictionnaire. Grossièrement, dans le cas où les atomes du dictionnaire sont faiblement corrélés, la solution du problème $\mathcal{P}(\ell_1)$ s'identifie avec de la solution du problème initiale $\mathcal{P}(\ell_0)$. Ces conditions d'équivalence entre les deux problèmes sont d'une grande importance, notamment dans le cadre d'approximation compressée (*Compressed sensing*) où le dictionnaire peut être choisi en fonction de sa capacité à représenter de manière parcimonieuse les données observées, ce qui explique la popularité des approches par relaxation convexe dans ce contexte. Notons que ces conditions sont également valides pour les algorithmes gloutons [Tro04] que nous verrons dans la section 1.2.1.2.

À l'inverse, dans le cadre des problèmes inverses parcimonieux le dictionnaire est imposé par la nature du problème considéré et ne vérifie pas forcément les conditions d'équivalence (voir par exemple [BC15]), comme c'est le cas, par exemple, des problèmes de déconvolution de train d'impulsions présentés dans la section 1.1. Dans [BSCI11] il a été observé empiriquement, dans le cadre de la déconvolution impulsionnelle, que la solution du problème relaxé $\mathcal{P}(\ell_1)$ ne coïncide généralement pas avec la solution optimale. En effet, la norme ℓ_1 impose une forte régularisation sur les amplitudes x_k ce qui résulte en une sous-estimation des amplitudes par

rapport au problème $\mathcal{P}(\ell_0)$. De ce fait, une réévaluation de ces amplitudes est parfois nécessaire [FL01]. Celle-ci est effectuée en calculant l'estimateur des moindres carrés pour le support de la solution du problème $\mathcal{P}(\ell_1)$. Cependant, le support de la solution $\mathcal{P}(\ell_1)$ présente souvent de fausses détections ce qui entraîne une parcimonie moindre de la solution optimale, justement à cause de la pénalisation ℓ_1 des amplitudes.

Finalement, notons que d'autres fonctions de pénalisation $\phi(\mathbf{x})$ ont été étudiées, notamment, des fonctions non convexes [SBFA17]. Celles-ci permettent de réduire le biais de l'estimation des amplitudes par rapport à la pénalisation ℓ_1 au prix de la résolution de problèmes d'optimisation non convexes. On peut citer par exemple le cas de fonctions différentiables dans [CJPT13, SBFA15, FL01] et non différentiables dans [FF93, CWB08]. La résolution de ces problèmes non convexes se base généralement sur des techniques d'approximations convexes locales, mais la convergence vers le minimum global n'est pas toujours garantie.

Hyper-paramètres et dictionnaire infini. Afin de garantir l'exactitude de la solution du problème $\mathcal{P}(\ell_1)$, l'hyper-paramètre L_ϕ , e_ϕ ou λ_ϕ (suivant la formulation employée) doit être réglé de manière appropriée. Dans le cas de la formulation $\mathcal{P}_{2+\phi}$, l'hyper-paramètre λ_ϕ peut être fixé de façon heuristique en utilisant la méthode de la courbe en L (*L-curve*) qui donne une indication sur la valeur de λ_ϕ permettant d'atteindre le bon compromis entre les termes de régularisation et fidélité aux données. Une seconde approche consiste à calculer la solution pour tout $\lambda_\phi \leq \lambda_{\max}$, et prendre la valeur de λ_ϕ qui permet d'obtenir un résidu $\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}$ pouvant s'identifier à du bruit.

Dans le cas d'un dictionnaire dépendant d'hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}$ inconnus, dans le cas d'une déconvolution semi-aveugle par exemple, la relaxation ℓ_1 devient un problème d'optimisation complexe comme le problème est généralement non convexe en les hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}$. Pour pallier ce problème une approche de relaxation par la *norme atomique* [CRPW12] a été proposée. La norme atomique est définie pour un dictionnaire *infini* comme suit :

$$\|\mathbf{x}\|_{\mathcal{H}} = \inf_{\mathbf{z} \in \mathbb{S}^K} \left\{ \|\mathbf{z}\|_1, \mathbf{x} = \sum_k z_k \mathbf{h}(\boldsymbol{\nu}_k) \text{ avec } \mathbf{h}(\boldsymbol{\nu}_k) \in \mathcal{H} \right\} \quad (1.5)$$

où le dictionnaire infini est donné par :

$$\mathcal{H} = \left\{ \mathbf{h}(\boldsymbol{\nu}) \in \mathbb{R}^P, \boldsymbol{\nu} \in \mathbb{D}^Q \right\}$$

Cependant, cette formulation du dictionnaire ne permet pas de prendre en compte la parcimonie au sens ℓ_0 . En effet, la définition (1.5) impose la parcimonie de \mathbf{z} à travers la norme ℓ_1 . Ceci peut être interprété comme la relaxation convexe où $\|\mathbf{z}\|_1$ remplace la pseudo-norme $\|\mathbf{z}\|_0$. Cette approche souffrira donc des mêmes problèmes que la formulation $\mathcal{P}(\ell_1)$ dans le sens où les garanties de l'obtention de la solution parcimonieuse ℓ_0 ne sont pas valides dans le cadre des problèmes inverses parcimonieux vu dans la section 1.1.

1.2.1.2 Algorithmes gloutons

Une alternative aux méthodes de relaxation sont les algorithmes gloutons (*Greedy algorithms*) [Tro04] qui forment une classe d'algorithmes sous-optimaux pour la résolution du problème ℓ_0 . À partir d'une valeur initiale $\mathbf{x}^{(0)}$ d'une cardinalité $L^{(0)} = \|\mathbf{x}^{(0)}\|_0$, les algorithmes gloutons mettent à jour le vecteur $\mathbf{x}^{(t)}$ en ajoutant ou supprimant un seul atome à chaque itération jusqu'à atteindre un critère d'arrêt :

- $\mathcal{P}_{2/0}$: si $L^{(t)} = L_0$,

- $\mathcal{P}_{0/2}$: si $\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}^{(t)}\|^2 < \epsilon_0$,
- \mathcal{P}_{2+0} : si la solution ne peut être améliorée d'avantage.

Certains de ces algorithmes gloutons partent d'une valeur initiale de cardinalité nulle (*i.e.*, $L^{(0)} = 0$) et augmentent le support du vecteur \mathbf{x} à chaque itération en ajoutant un atome au support. Ces algorithmes sont dit *forward greedy algorithms* parmi lesquels on peut citer les plus classiques : *Matching Pursuit* (MP) [MZ93] et la version améliorée *Othogonal Matching Pursuit* (OMP) [PRK93]. Par ailleurs l'algorithme proposé par [CB00] est un *backward greedy algorithm*, où la valeur initiale $\mathbf{x}^{(0)}$ est de cardinalité $L^{(0)} = K$ puis le support est réduit itérativement en supprimant un atome du support à chaque itération, cependant, cette approche n'est valide que pour les dictionnaires de rang plein. L'inconvénient des algorithmes gloutons unidirectionnel (*forward* ou *backward*) est que les décisions prises ne sont jamais remise en cause et si une erreur est commise à l'itération t celle-ci ne peut être rectifiée, ce qui résulte donc en une propagation de l'erreur.

Pour contourner ce problème, des algorithmes gloutons qui changent le support dans les deux directions ont été proposés (*forward-backward greedy algorithms*). Ces algorithmes autorisent donc d'ajouter ou de supprimer un atome à chaque itération, ainsi une mauvaise détection précoce peut être supprimée ultérieurement. Parmi ces algorithmes *forward-backward* on peut citer, *Bayesian Othogonal Matching Pursuit* (BOMP) [HD10], *Single Best Replacement* (SBR) [SIBD11] ou encore *OMP with replacement* [JTD11]. Toutefois, ces algorithmes sont des méthodes sous-optimales et tout comme les approches de relaxation la restauration du support optimal n'est généralement pas garantie dans le cadre des problèmes inverses parcimonieux. En effet, les garanties d'équivalence des solutions obtenues par les algorithmes gloutons avec la solution $\mathcal{P}(\ell_0)$ se basent sur les mêmes critères (cohérence mutuelle, ERC et PIR) que les approches relaxation convexe que nous avons vues précédemment.

1.2.1.3 Reformulation en MIP

Contrairement aux méthodes de relaxation et algorithmes gloutons, la reformulation en *Mixed Integer Program* (MIP) permet de s'attaquer au problème $\mathcal{P}(\ell_0)$ et de le résoudre de façon exacte [BNCM16]. Cette reformulation s'appuie sur l'introduction de variables binaires $\mathbf{q} \in \{0, 1\}^K$ contrôlant la nullité des amplitudes \mathbf{x} , en d'autres termes, $q_k = 0 \iff x_k = 0$. En prenant en compte une hypothèse supplémentaire sur les amplitudes, appelée hypothèse *Big M* [Bie96]

$$\|\mathbf{x}\|_\infty \leq M$$

où M est une constante connue, alors l'équivalence $q_k = 0 \iff x_k = 0$ se ramène à une simple contrainte linéaire :

$$-Mq_k \leq x_k \leq Mq_k$$

De plus la norme ℓ_0 peut s'écrire comme une fonction linéaire de ces variables binaires $\|\mathbf{x}\|_0 = \sum_k q_k$.

Dans [BNCM16] une reformulation en MIP pour chacune des trois formulations du problème $\mathcal{P}(\ell_0)$ ont été proposées ainsi que pour différents termes de fidélité aux données. Par exemple, la reformulation du problème $\mathcal{P}_{2/0}$ s'écrit :

$$\mathcal{P}_{2/0}^{\text{MIP}} : \min_{\mathbf{q} \in \{0,1\}^K, \mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 \text{ s.c. } \begin{cases} \sum_k q_k \leq L_0, \\ \forall k, |x_k| \leq Mq_k \end{cases} \quad (1.6)$$

Cette reformulation tombe dans le cadre des *Mixed Integer Quadratic Programs* (MIQP) où la fonction objectif est quadratique et les contraintes linéaires. Cette reformulation ne réduit pas

la complexité calculatoire du problème, car elle requiert une exploration combinatoire à cause des variables binaires. Toutefois, elle permet de se placer dans un cadre d'optimisation discrète permettant de bénéficier des algorithmes développés dans ce contexte (*e.g.*, le solveur CPLEX) garantissant l'obtention de la solution optimale tout en évitant une exploration exhaustive.

Il est important de souligner que l'hypothèse *Big M* des reformulations MIP impose la prise en compte d'une contrainte (*i.e.*, $\|\mathbf{x}\|_\infty \leq M$) additionnelle par rapport au problème $\mathcal{P}(\ell_0)$ initial. De ce fait, le choix de la constante M est primordial afin de garantir l'équivalence entre les deux problèmes. Bien que dans le cadre des applications des problèmes inverses parcimonieux l'existence d'une borne supérieure sur les amplitudes soit garantie, et peut même être fixée de façon heuristique dans certaines applications, le réglage de ce paramètre M reste un problème délicat. En effet, les algorithmes d'optimisation discrète pour la résolution des MIP se basent sur des techniques dites de *Branch and Bound* [MBM⁺20] qui sont sensibles à la valeur de M . En particulier, plus la valeur de M est grande, plus le temps de calcul nécessaire à la résolution du problème est élevée. Notons que les récents travaux de [Bou19] proposent une approche permettant de prendre en compte les dictionnaires continus dans le contexte de la reformulation MIP via une approximation de dictionnaire.

1.2.1.4 Conclusion sur les approches optimisation

Nous venons de voir que les problèmes inverses parcimonieux peuvent être formulés comme des problèmes d'optimisation déterministes prenant en compte la parcimonie grâce à l'introduction de la pseudo-norme ℓ_0 . Les approches proposées dans la littérature pour la résolution de ces problèmes peuvent être scindées en deux catégories : les méthodes de relaxation et algorithmes gloutons d'un côté et la reformulation MIP de l'autre. Ci-dessous nous faisons le bilan des deux catégories :

- **Méthodes de relaxation et algorithmes gloutons.**

- garanties de reconstruction exacte généralement non vérifiées dans le cadre des problèmes inverses parcimonieux,
- ne permettent pas d'estimer de façon exacte les hyper-paramètres (*e.g.*, λ_ϕ),
- extension au cas semi-aveugle/aveugle (ou cas de dictionnaire continu) non triviale, de plus les garanties de reconstruction exacte ne sont pas vérifiées dans ce cadre,
- + coût de calcul faible,

- **Reformulation MIP.**

- + parcimonie exacte au sens ℓ_0 ,
- + prise en compte de dictionnaires continus moyennant une approximation de dictionnaire,
- ne permet pas de considérer le cas aveugle,
- ne permet pas d'estimer les hyper-paramètres (*e.g.*, M et L_0),
- coût de calcul élevé,

1.2.2 Approches bayésiennes et échantillonnage stochastique

L'approche bayésienne pour la résolution des problèmes inverses parcimonieux rentre dans le cadre classique de l'inférence statistique, où, moyennant un modèle statistique pour le bruit ϵ

et la prise en compte d'un modèle *a priori* adéquat $p(\mathbf{x})$ sur les amplitudes \mathbf{x} , la loi *a posteriori* de ces paramètres s'écrit, via la règle de Bayes :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{1}{p(\mathbf{y})}p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) \quad (1.7)$$

où $p(\mathbf{y})$ est l'évidence (ou constante de normalisation) et $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ est la fonction de vraisemblance dont la forme est dictée par le modèle statistique du bruit et le modèle d'observation. En particulier, pour un bruit additif de densité de probabilité $p_\epsilon(\boldsymbol{\epsilon})$, en prenant en compte le modèle (1.2) nous avons :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = p_\epsilon(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}|\mathbf{x}).$$

Dans la suite de ce manuscrit, nous supposons que le bruit est distribué suivant une loi gaussienne centrée de matrice de covariance $\boldsymbol{\Sigma}$, *i.e.*, $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \boldsymbol{\Sigma})$. La fonction de vraisemblance devient alors :

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = (2\pi)^{-N/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \quad (1.8)$$

où $\|\mathbf{u}\|_{\mathbf{A}}^2 = \mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{u}$, et $|\mathbf{A}|$ est le déterminant de la matrice \mathbf{A} .

Par ailleurs, l'*a priori* sur les paramètres à inférer doit être choisi judicieusement afin de garantir la parcimonie des amplitudes \mathbf{x} (pour un aperçu sur les *a priori* parcimonieux voir par exemple [MD12]). Une fois le choix du modèle *a priori* établi, l'estimation des paramètres d'intérêt se fait généralement en considérant³ l'estimateur du *Maximum a posteriori* (MAP) ou bien l'estimateur de l'*Espérance a posteriori* (EAP) :

$$\text{Maximum a posteriori : } \hat{\mathbf{x}}_{\text{MAP}} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$$

$$\text{Espérance a posteriori : } \hat{\mathbf{x}}_{\text{EAP}} = \mathbb{E}\{\mathbf{x}|\mathbf{y}\} = \int_{\mathbb{S}^K} \mathbf{x} p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) d\mathbf{x}$$

Sur le plan théorique, dans le cadre bayésien, un estimateur $\zeta(\mathbf{y})$ est défini comme le minimiseur du coût moyen (*posterior loss* ou *expected cost*) :

$$\arg \min_{\zeta} \mathbb{E}\{\mathcal{C}[\zeta(\mathbf{y}), \mathbf{x}]\} = \arg \min_{\zeta} \int_{\mathbb{S}^K} \mathcal{C}[\zeta(\mathbf{y}), \mathbf{x}] p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) d\mathbf{x}$$

où $\mathcal{C}[\zeta(\mathbf{y}), \mathbf{x}]$ est une fonction coût qui permet de mesurer la qualité d'un estimateur $\zeta(\mathbf{y})$ comparé à la vraie valeur \mathbf{x} . Quand cette fonction est choisie quadratique $\mathcal{C}[\zeta(\mathbf{y}), \mathbf{x}] = \|\zeta(\mathbf{y}) - \mathbf{x}\|^2$ l'estimateur $\zeta(\mathbf{y})$ est l'estimateur EAP qui correspond donc au minimiseur de l'erreur quadratique moyenne (MMSE). En revanche, l'estimateur du MAP correspond lui à une fonction coût tout ou rien :

$$\mathcal{C}[\zeta(\mathbf{y}), \mathbf{x}] = \delta_0(\zeta(\mathbf{y}) - \mathbf{x})$$

où δ_0 est mesure de Dirac.

Sur le plan pratique, le calcul de l'estimateur EAP implique un calcul d'intégrale multidimensionnelle qui n'est généralement pas simple à effectuer analytiquement, il est ainsi nécessaire d'avoir recours aux méthodes d'intégration numérique par simulation de Monte Carlo. De son côté, l'estimateur MAP peut s'inscrire dans le cadre des méthodes d'optimisation visant à maximiser (ou minimiser) la loi *a posteriori* (l'opposé du logarithme de la loi *a posteriori*) et l'on se ramène alors aux méthodes d'optimisation déterministes vues précédemment.

³Notons qu'il existe d'autres estimateurs bayésiens étudiés dans la littérature, comme l'estimateur «*détection-estimation*» que nous verrons plus tard, toutefois le MAP et l'EAP restent les plus utilisés.

1.2.2.1 Lien entre l’approche bayésienne et les méthodes d’optimisation déterministes

Nous venons de voir que l’estimateur du MAP peut se ramener à un problème d’optimisation visant à trouver la valeur des amplitudes \mathbf{x} qui maximise la loi *a posteriori*, ou de manière équivalente celle qui minimise l’opposé du logarithme de la loi *a posteriori* qui prend la formulation suivante :

$$\mathcal{P}(\text{MAP}) : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^K} \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\Sigma^{-1}}^2 + \lambda_\psi \psi(\mathbf{x}) \quad (1.9)$$

où $p(\mathbf{x}) \propto \exp(-\lambda_\psi \psi(\mathbf{x}))$ avec $\psi(\mathbf{x}) : \mathbb{S}^K \rightarrow \mathbb{F} \subseteq \mathbb{R}$ et $\lambda_\psi \in \mathbb{R}^+$. L’estimation du MAP se traduit alors comme la résolution d’un problème d’optimisation impliquant un terme de fidélité aux données (venant de la vraisemblance) avec une fonction de régularisation (qui dépend de l’*a priori*). Par conséquent, le problème $\mathcal{P}(\text{MAP})$ est totalement équivalent⁴ au problème $\mathcal{P}_{2+\phi}$ défini dans (1.4) (voir section 1.2.1.1) pour $\psi(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x})$, $\Sigma = \sigma^2 \mathbf{I}$ et $\lambda_\psi = \lambda_\phi / (2\sigma^2)$. À titre d’exemple, la solution du problème du LASSO vu en section 1.2.1.1 peut être interprétée comme l’estimateur du MAP pour un *a priori* i.i.d. de Laplace sur les amplitudes étant donné que cette *a priori* s’écrit [Tib96] :

$$p(\mathbf{x}) \propto \prod_k \exp(-\lambda_\psi |x_k|) \propto \exp(-\lambda_\psi \|\mathbf{x}\|_1)$$

Cependant, le cadre bayésien nous permet de justifier le choix du terme de fidélité aux données en fonction des hypothèses *a priori* sur le bruit. Il permet également d’avoir une interprétation probabiliste des hyper-paramètres qui gèrent le compromis entre la pénalisation et le terme de fidélité aux données (ici $\lambda_\psi = \lambda_\phi / (2\sigma^2)$). Notons que cette interprétation bayésienne du LASSO a également été exploitée dans le cadre de l’échantillonnage stochastique. À titre d’exemple, dans le cadre de la régression linéaire, l’échantillonneur de Gibbs pour le *Bayesian LASSO* a été proposé par [PC08] pour le calcul de l’estimateur EAP. Seulement, bien qu’en théorie un *a priori* de Laplace permette d’avoir des solutions plus parcimonieuses qu’un *a priori* Gaussien, l’estimateur de l’EAP ne donne pas de solution parcimonieuse au sens strict [Gri11].

D’autre part, bien que l’algorithme SBR [SIBD11] puisse être interprété comme un algorithme glouton *forward-backward*, celui-ci a été formulé dans un cadre bayésien en prenant en compte un *a priori* Bernoulli-Gaussien (BG). Ce dernier permet de prendre en compte la parcimonie des amplitudes au sens de la pseudo-norme ℓ_0 sur \mathbf{x} moyennant la manipulation de variables auxiliaires binaires q_k permettant de caractériser la parcimonie. Toutefois, la présence des variables binaires nous ramène vers un problème d’optimisation discrète combinatoire. Nous reviendrons plus en détails sur ce type d’*a priori* dans la section 1.2.2.2.

En conclusion, réduire l’estimateur du MAP à un simple problème d’optimisation peut s’avérer pratique, car il permet de tirer profit des différents outils mathématiques et algorithmiques développés dans ce cadre, particulièrement quand la fonction ψ est convexe. Cependant, il ne permet pas d’exploiter toutes les informations qu’offre le cadre bayésien. En effet, la loi *a posteriori* contient davantage d’informations à exploiter que le MAP (moyenne, variance, intervalle de confiance...), il paraît donc plus judicieux d’étudier cette loi *a posteriori* de manière plus approfondie en utilisant les méthodes de simulation de Monte Carlo.

1.2.2.2 *A priori* de parcimonie explicite

Dans le but de prendre en compte la parcimonie de façon explicite plusieurs modèles *a priori* ont été proposés dans la littérature. Ces modèles *a priori* reposent sur l’introduction de variables

⁴Notons que cette interprétation n’est pas unique, il existe d’autres interprétations bayésiennes toutes aussi acceptables (voir [Gri11] et les références qui y figurent).

auxiliaires binaires. Plus précisément, à chacun des atomes \mathbf{h}_k est associée une variable aléatoire binaire $q_k \in \{0, 1\}$. Cette dernière est égale à 1 si $k \in \Omega$ et elle est nulle sinon, ainsi le modèle d'observation (1.1) peut s'écrire comme suit :

$$\mathbf{y} = \sum_{k|q_k=1} \mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu})x_k + \boldsymbol{\epsilon} \quad (1.10)$$

En d'autres termes, ces variables binaires permettent de décrire la nullité des amplitudes \mathbf{x} , en garantissant l'équivalence suivante :

$$\Omega = \{k \in \llbracket 1; K \rrbracket \mid x_k \neq 0\} \iff \Omega = \{k \in \llbracket 1; K \rrbracket \mid q_k = 1\}$$

Les variables aléatoires q_k sont généralement considérées *indépendantes et identiquement distribuées* (i.i.d.) suivant une loi de Bernoulli de paramètre λ :

$$\forall k, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda) \implies \begin{cases} \Pr(q_k = 1) & = \lambda \\ \Pr(q_k = 0) & = 1 - \lambda \end{cases} \quad (1.11)$$

où l'hyper-paramètre $\lambda \in [0, 1]$ est la probabilité d'avoir $q_k = 1$.

Les amplitudes \mathbf{x} , quant à elles, sont définies conditionnellement aux variables de Bernoulli \mathbf{q} et sont également considérées *indépendantes et identiquement distribuées* (i.i.d.) comme suit :

$$\begin{cases} x_k|q_k = 1 & \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x) \\ x_k|q_k = 0 & \sim \delta_0(x_k) \end{cases} \quad (1.12)$$

où $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x)$ représente une loi de probabilité quelconque prenant valeurs dans \mathbb{S} et de paramètres $\boldsymbol{\theta}_x$. En d'autres termes, $x_k \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x)$ si $q_k = 1$ et $x_k = 0$ sinon. Dans la suite de ce manuscrit, pour faire référence aux *a priori* définis par (1.11) et (1.12) nous parlerons d'*a priori* Bernoulli- \mathcal{D} .

La définition conditionnelle (1.12) permet donc d'assurer l'implication suivante :

$$q_k = 0 \implies x_k = 0$$

ainsi, la parcimonie du vecteur des amplitudes \mathbf{x} est régie par la probabilité d'avoir $q_k = 1$, en d'autres termes par l'hyper-paramètre λ . Par ailleurs, la parcimonie des amplitudes \mathbf{x} peut s'écrire aisément en fonction des variables binaires \mathbf{q} puisque :

$$\|\mathbf{x}\|_0 = \sum_k^K q_k$$

En prenant en compte le modèle *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} , on peut écrire, par le biais de la règle de Bayes, la loi *a posteriori* jointe des amplitudes et des variables de Bernoulli (\mathbf{q}, \mathbf{x}) :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{x}, \mathbf{q})p(\mathbf{x}|\mathbf{q})P(\mathbf{q}|\lambda) \quad (1.13)$$

Par ailleurs, le cadre bayésien a l'avantage de permettre une prise en compte systématique des hyper-paramètres dans le processus d'estimation, permettant ainsi de considérer les problèmes dans un cadre complètement non supervisé. Plus précisément, en prenant en compte une loi *a priori* adéquate pour les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta} = \{\lambda, \boldsymbol{\theta}_x, \boldsymbol{\Sigma}\}$ la loi *a posteriori* jointe de $(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ s'écrit :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) \propto |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x}|\mathbf{q}, \boldsymbol{\theta}_x)P(\mathbf{q}|\lambda)p(\boldsymbol{\theta}) \quad (1.14)$$

où $p(\boldsymbol{\theta}) = p(\lambda)p(\boldsymbol{\Sigma})p(\boldsymbol{\theta}_x)$. Notons également que dans le cas d'un dictionnaire dépendant d'un certain nombre de paramètres $\boldsymbol{\nu}$ inconnus (*i.e.*, $\mathbf{H} \equiv \mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})$), il est tout à fait possible de leur attribuer un *a priori* et de les considérer comme des hyper-paramètres *i.e.*, $\boldsymbol{\theta} = \{\lambda, \boldsymbol{\theta}_x, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\nu}\}$.

Parmi les *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} on trouve dans la littérature principalement des travaux sur le modèle Bernoulli-Gaussien où $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x) \stackrel{d}{=} \mathcal{N}(0, \sigma_x^2)$, en d'autres termes les amplitudes x_k sont i.i.d. suivant une loi gaussienne centrée de variance σ_x^2 [KM82, CCL96, BC06, GIL11, BCBB16]. En effet, sur les plans mathématique et algorithmique, il est généralement plus commode de travailler avec la loi gaussienne. Cependant, la gaussienne impose une forte régularisation sur les amplitudes pouvant provoquer une sous-estimation de ces dernières. Pour atténuer la régularisation induite par la loi \mathcal{D} , d'autres *a priori* basés sur des lois à longues queues ont été proposés. Par exemple, le modèle Bernoulli-Laplace ($\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x) \stackrel{d}{=} \mathcal{L}(0, \sigma_x)$) a été étudié dans le cadre d'applications en reconstruction d'images par résonance magnétique [CCK18] et la localisation de sources EEG [CTB13, CBCT15]. On trouve également d'autres modèles *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} qui permettent de prendre en compte une contrainte additionnelle, comme la non-négativité. Par exemple, le modèle Bernoulli-Gaussien-Tronqué ($\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x) \stackrel{d}{=} \mathcal{N}^+(0, \sigma_x^2)$) dans le cadre de la déconvolution aveugle de train d'impulsions [MIB05], et le modèle Bernoulli-Exponentiel ($\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x) \stackrel{d}{=} \mathcal{E}(\sigma_x)$) pour la reconstruction parcimonieuse d'images [DHT09].

Modèle *a priori* Bernoulli-Gaussien. Introduit la première fois dans [KM82], l'*a priori* Bernoulli-Gaussien a été depuis étudié dans le cadre de diverses applications. L'estimation des paramètres du modèle Bernoulli-gaussienne a été d'abord proposée dans un cadre d'optimisation déterministe en calculant l'estimateur du *Maximum a posteriori* (MAP) :

$$\text{Cas supervisé : } (\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{x}})_{\text{MAP}} = \arg \max_{\mathbf{q}, \mathbf{x}} p(\mathbf{q}, \mathbf{x} | \mathbf{y})$$

$$\text{Cas non supervisé : } (\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{x}}, \hat{\boldsymbol{\theta}})_{\text{MAP}} = \arg \max_{\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}} p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y})$$

Dans le cas supervisé, [KM82] ont proposé l'algorithme SMLR (*Single Most Likely Replacement*) où la séquence $\mathbf{q}^{(\ell)}$ est itérativement mise à jour en ne modifiant qu'une seule composante à la fois. Plus précisément, l'algorithme choisit la modification qui maximise la loi *a posteriori* $p(\mathbf{q}, \mathbf{x} | \mathbf{y})$ ou la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux amplitudes $P(\mathbf{q} | \mathbf{y})$ [CGI96]. Notons que dans le cas supervisé avec un bruit i.i.d. (*i.e.*, $\boldsymbol{\Sigma} = \sigma^2 \mathbf{I}$) le calcul de l'estimateur MAP revient au problème d'optimisation suivant [SIBD11] :

$$\mathcal{P}(BG) : \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^K, \mathbf{q} \in \{0,1\}^K} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 + \frac{\sigma^2}{\sigma_x^2} \|\mathbf{x}\|^2 + \lambda_{\mathbf{q}} \|\mathbf{x}\|_0$$

où $\lambda_{\mathbf{q}} = 2\sigma^2 \ln(1/\lambda - 1)$. Dans [SIBD11] il a été montré que si $\sigma_x^2 \rightarrow \infty$ alors le problème $\mathcal{P}(BG)$ est équivalent à la formulation \mathcal{P}_{2+0} du problème $\mathcal{P}(\ell_0)$. Dans le cas non dégénéré $\sigma_x^2 < \infty$ le problème $\mathcal{P}(BG)$ est équivalent au problème $\mathcal{P}(\ell_0)$ avec une contrainte de régularisation quadratique additionnelle sur les amplitudes.

Pour le cas non supervisé, l'estimation des hyper-paramètres est généralement effectuée de manière alternée, où la loi *a posteriori* est d'abord maximisée par rapport à \mathbf{q} avec l'algorithme SMLR avec les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$ fixés, ensuite la loi *a posteriori* est maximisée par rapport aux hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$ [CGI96]. Toutefois, ces méthodes restent toujours sous-optimales à cause de l'utilisation du SMLR, car la solution obtenue n'est pas nécessairement le maximiseur global de la loi *a posteriori*.

D'autre part, l'estimation des paramètres dans le cadre de l'*a priori* Bernoulli-Gaussien a été proposée par l'échantillonnage stochastique. À titre d'exemple, dans [CCL96] un échantillonneur

de Gibbs est proposé pour une application de déconvolution aveugle en sismologie, où à partir de T échantillons des paramètres sont générés suivant la loi *a posteriori* :

$$\{\mathbf{q}^{(t)}, \mathbf{x}^{(t)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)}\}_{t=1, \dots, T} \sim p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}).$$

Les paramètres sont ensuite estimés en calculant l'estimateur de l'espérance *a posteriori* (EAP) :

$$\hat{\mathbf{x}}_{EAP} \approx \frac{1}{T} \sum_t \mathbf{x}^{(t)}$$

Toutefois, avec cette stratégie toutes les amplitudes sont considérées comme étant significatives, car la moyenne est faite indépendamment des variables de Bernoulli, ce qui génère nécessairement des fausses détections (donc des solutions moins parcimonieuses), et une sous-estimation des amplitudes. D'autres estimateurs plus pertinents ont été proposés, majoritairement basés sur une stratégie que nous appellerons «*détection-estimation*» [RBNC04, BC06, BCBB16] où les amplitudes les plus significatives sont d'abord détectées (en d'autres termes les atomes \mathbf{h}_k dont la contribution dans les données est la plus probable) à partir de $\{\mathbf{q}^{(t)}\}_{t=1, \dots, T}$:

$$[\hat{\mathbf{q}}_{\tilde{\lambda}}]_k = \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{1}{T} \sum_t q_k^{(t)} > \tilde{\lambda} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

ensuite, l'espérance *a posteriori* conditionnelle (EAPC) des amplitudes est calculée sachant la détection $\hat{\mathbf{q}}_{\tilde{\lambda}}$:

$$[\hat{\mathbf{x}}_{EAPC}]_k = \begin{cases} \frac{1}{\sum_t q_k^{(t)}} \sum_t x_k^{(t)} & \text{si } [\hat{\mathbf{q}}_{\tilde{\lambda}}]_k = 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

où $\tilde{\lambda} \in [0.5, 1[$ est un seuil fixé généralement de façon heuristique⁵.

Bien entendu, étant donné la complexité du problème, il est difficile d'établir des garanties théoriques quant à la reconstruction exacte des amplitudes par cet estimateur. Cependant, en plus de permettre une estimation non supervisée, le cadre bayésien associé aux méthodes d'échantillonnage permet d'extraire davantage d'informations que des estimations ponctuelles. En effet, une analyse statistique des T échantillons générés nous permet d'étudier de façon approfondie la loi *a posteriori*. À titre d'exemple, nous pouvons par exemple estimer des intervalles de confiance autour de l'estimée $\hat{\mathbf{x}}_{EAPC}$. Par ailleurs, l'histogramme des variables de Bernoulli q_k nous renseigne sur la probabilité *a posteriori* de présence des atomes \mathbf{h}_k . Cet histogramme permet en plus de discuter le choix du seuil $\tilde{\lambda}$. Dans le cadre de dictionnaires dépendant d'hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}$ inconnus (*e.g.*, déconvolution myope⁶ [MIB05], aveugle [CCL96] ou dans le cas des dictionnaires continus [BCBB16, Bou19]), le cadre bayésien associé aux méthodes d'échantillonnage stochastique permet également d'estimer ces paramètres. Dans [MIB05], les atomes $\mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k)$ du dictionnaire sont des versions décalées d'une fonction lorentzienne d'hyper-paramètre de largeur ν (*i.e.*, $\boldsymbol{\nu}_k \equiv \nu \in \mathbb{R}^+, \forall k$) inconnu. Le paramètre ν est estimé conjointement avec les autres hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$ en prenant en compte un *a priori* non informatif. Dans [CCL96], le dictionnaire \mathbf{H} est la matrice de convolution associée à l'atome $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^P$ (les colonnes de \mathbf{H} sont des versions décalées de \mathbf{h}) qui est supposé inconnu. Les auteurs proposent de considérer l'atome \mathbf{h} comme un hyper-paramètre et d'estimer ce dernier en lui attribuant un *a priori* Gaussien

⁵Bien que $\tilde{\lambda}$ soit fixé de façon heuristique, celui-ci à une interprétation probabiliste, comme $[\hat{\mathbf{q}}_{\tilde{\lambda}}]_k$ vaut 1 si $E[q_k] > \tilde{\lambda}$ et 0 sinon. En d'autres termes, seules les variables q_k dont l'espérance est supérieure à $\tilde{\lambda}$ sont pertinentes.

⁶Rappelons que dans [MIB05] une contrainte additionnelle de non-négativité est imposée sur les amplitudes. Toutefois, les principes d'échantillonnage et estimation des hyper-paramètres reste identique au cas du Bernoulli-Gaussien.

de dimension P . Pour traiter des problèmes d'analyse spectrale haute résolution, [BC06] proposent un modèle Bernoulli-Gaussien-Étendu (BGE) basé sur un dictionnaire $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})$ où chaque atome $\mathbf{h}_k(\nu_k)$ dépend d'un paramètre de localisation (fréquence) $\nu_k \in [f_k, f_{k+1}[$ avec $f_0 = 0$ et $f_K = f_{max}$. On parle dans ce cas de dictionnaire continu, car les atomes estimés possèdent des hyper-paramètres de localisation ν_k appartenant à tout l'intervalle $[f_0, f_{max}[$. Dans [Bou19], le même principe du modèle BGE a été utilisé pour la détection d'exoplanètes par la méthode des vitesses radiales.

D'autre part, pour la déconvolution impulsionnelle, il a été montré empiriquement dans [BSCI11] que l'*a priori* Bernoulli-Gaussien associé aux méthodes d'échantillonnage stochastique donne de meilleurs résultats en termes de détection du support Ω des amplitudes comparé aux algorithmes gloutons, en particulier OLS et SBR, ainsi que les méthodes de relaxation ℓ_1 . Toutefois, il a été noté que, similairement aux méthodes de relaxation, le BG peut nécessiter une réévaluation des amplitudes qui sont parfois sous-estimées à cause de l'*a priori* Gaussien qui impose une forte régularisation. Par ailleurs, des conclusions identiques ont été tirées dans [CTB13] pour le modèle Bernoulli-Laplace où il est montré empiriquement que l'approche stochastique donne des estimations qui sont plus en adéquation avec la vérité terrain que la méthode de relaxation ℓ_1 en particulier en utilisant l'algorithme *Proximal* (PPXA) [CP08], même dans le cas non supervisé.

Les méthodes d'échantillonnage stochastique permettent donc une exploration efficace de la loi *a posteriori* ainsi que d'obtenir davantage d'information qu'une simple estimation ponctuelle. Cependant, ces approches peuvent nécessiter un coût de calcul très important. En effet, comme la loi *a posteriori* n'admet pas généralement une forme usuelle permettant de générer directement des échantillons, il est nécessaire de se tourner vers les méthodes de simulation dites de *Monte Carlo par Chaînes de Markov* (MCMC) [PSC⁺16]. Ces méthodes regroupent des classes d'algorithmes d'échantillonnage stochastique tel que l'échantillonneur de Gibbs [GG84] et l'algorithme Metropolis-Hastings [MU49, Has70] et permettent de construire une chaîne de Markov dont la loi stationnaire est la loi *a posteriori* cible.

Échantillonneur de Gibbs pour l'*a priori* Bernoulli- \mathcal{D} . Dans le cadre particulier de l'*a priori* Bernoulli- \mathcal{D} la loi *a posteriori* se prête bien à l'échantillonneur de Gibbs (*e.g.*, [CCL96] pour l'*a priori* Bernoulli-Gaussien et [CBCT15] pour le Bernoulli-Laplace). Le principe de cet échantillonneur est de construire une chaîne de Markov en tirant des échantillons de chaque paramètre à partir de sa loi *a posteriori* conditionnellement aux autres paramètres. En effet, les lois *a posteriori* conditionnelles des paires (q_k, x_k) sont, elles aussi, de type Bernoulli- \mathcal{D} , il est donc possible de construire un échantillonneur de Gibbs par bloc⁷, où q_k est échantillonné à partir de la loi *a posteriori* marginalisée par rapport à x_k , puis d'échantillonner l'amplitude x_k à partir de sa loi *a posteriori* conditionnelle (voir Algorithme 1.1). Cette approche garantit que la chaîne de Markov générée admet comme loi stationnaire la loi *a posteriori* cible.

Toutefois, afin d'atteindre le régime stationnaire des chaînes de Markov et de garantir que les échantillons $\{\mathbf{q}^{(t)}, \mathbf{x}^{(t)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)}\}_{t=1, \dots, T}$ sont bien distribués suivant la loi *a posteriori* cible (nous parlerons alors de convergence de l'échantillonneur), il est parfois nécessaire de générer un grand nombre d'échantillons, impliquant donc un coût de calcul important. Plus particulièrement, il a été observé dans [BC05] que la chaîne de Markov s'équilibre rapidement autour d'un mode (optimum local), mais prend beaucoup de temps à passer d'un mode à l'autre. Nous reviendrons plus en détails sur les échantillonneurs de Gibbs pour les *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} et leurs propriétés de convergence dans la section suivante (voir section 1.3.3).

⁷On parle de Gibbs par bloc [RS97] car l'étape 1.(a) et 1.(b) sont équivalentes à un échantillonnage joint (par blocs) de $(q_k^{(t+1)}, x_k^{(t+1)})$.

Algorithme 1.1 Échantillonneur de Gibbs pour l'*a priori* Bernoulli- \mathcal{D} .

A chaque itération (t) , à partir des échantillons courants $(\mathbf{q}^{(t)}, \mathbf{x}^{(t)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)})$:

1. tirer la paire $(q_k^{(t+1)}, x_k^{(t+1)})$ pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$:
 - (a) $q_k^{(t+1)} \sim p(q_k | \mathbf{q}_{1:k-1}^{(t+1)}, \mathbf{q}_{k+1:K}^{(t)}, \mathbf{x}_{1:k-1}^{(t+1)}, \mathbf{x}_{k+1:K}^{(t)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)}, \mathbf{y})$,
 - (b) $x_k^{(t+1)} \sim p(x_k | \mathbf{q}_{1:k}^{(t+1)}, \mathbf{q}_{k+1:K}^{(t)}, \mathbf{x}_{1:k-1}^{(t+1)}, \mathbf{x}_{k+1:K}^{(t)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)}, \mathbf{y})$,
 2. ensuite tirer les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}$:
 - (a) $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} \sim p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{q}^{(t+1)}, \mathbf{x}^{(t+1)}, \mathbf{y})$.
-

1.2.2.3 Conclusion sur l'approche bayésienne

Nous avons vu que la résolution des problèmes inverses parcimonieux peut également s'inscrire dans le cadre de l'inférence bayésienne grâce à la prise en compte d'*a priori* favorisant la parcimonie. Quand l'estimateur du MAP est choisi, l'estimation revient alors à un problème d'optimisation mettant en jeu un terme de fidélité aux données et une fonction de régularisation. Dans le cas d'un *a priori* continu avec une densité log-concave (*e.g.*, *a priori* de Laplace) l'estimation du MAP est équivalente à une relaxation convexe. Toutefois, le cadre bayésien permet de justifier statistiquement le choix du terme de fidélité aux données par la vraisemblance et de donner un sens statistique à l'hyper-paramètre de régularisation. À l'inverse dans le cas d'un *a priori* de parcimonie explicite (c'est-à-dire de type Bernoulli- \mathcal{D}), l'estimation du MAP revient à un problème d'optimisation discret et non convexe, équivalent à la formulation $\mathcal{P}(\ell_0)$ à une fonction de régularisation près.

En revanche, le cadre bayésien, associé aux méthodes d'échantillonnage stochastique, permet de considérer plus qu'un estimateur ponctuel (comme le MAP). Ci-dessous nous faisons un bilan sur l'approche utilisant un *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} associée aux méthodes d'échantillonnage stochastique :

- ***A priori* Bernoulli- \mathcal{D} et échantillonnage stochastique.**

- pas de garanties de reconstruction exacte (toutefois les études empiriques montrent que ces approches donnent de meilleurs résultats que la relaxation convexe et les algorithmes gloutons),
- + estimation non supervisée
- + estimation des hyper-paramètres du dictionnaire (semi-aveugle, aveugle ou dictionnaire continu),
- + estimation ponctuelle, intervalle de confiance et d'autres quantités statistiques pertinentes,
- coût de calcul élevé.

1.2.3 Conclusion sur les méthodes de résolution de problèmes inverses parcimonieux

Nous venons de voir qu'il existe différentes méthodes pour résoudre les problèmes inverses parcimonieux, et chacune a ses avantages et inconvénients. Le choix d'une méthode par rapport à une autre ne peut être motivé dans le cadre général, mais uniquement en considérant des cadres d'applications spécifiques et un cahier des charges établi au préalable.

Dans le cadre des problèmes traités dans ce manuscrit, le choix le plus judicieux est certainement l'approche bayésienne avec *a priori* de parcimonie explicite. En effet, pour les problèmes

inverses parcimonieux qui nous intéressent les atomes des dictionnaires sont fortement corrélés. De ce fait, les conditions d'équivalence entre les solutions des approches de relaxation convexe et algorithmes gloutons et la solution du problème $\mathcal{P}(\ell_0)$ ne sont pas vérifiées. Dans ce cas, il est évident que les méthodes qui prennent en compte la parcimonie de façon explicite (MIP et approches bayésiennes Bernoulli- \mathcal{D}) sont plus adéquates.

Par ailleurs, contrairement à la reformulation MIP, les méthodes d'échantillonnage permettent l'estimation, de façon assez systématique, des hyper-paramètres du modèle, comme la variance du bruit, le degré de parcimonie des amplitudes, voire les hyper-paramètres du dictionnaire. De plus, les méthodes d'échantillonnage stochastique permettent d'obtenir plus qu'une estimation ponctuelle des paramètres, grâce à une étude statistique de la loi *a posteriori* à partir des échantillons générés.

Cependant, les méthodes d'échantillonnage stochastique en général et les méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov en particulier sont réputées gourmandes en coût de calcul et nécessitent d'être manipulées avec grand soin, sans quoi elles risquent de manifester des problèmes de convergence. Dans la section suivante, nous allons aborder différentes méthodes proposées dans littérature permettant un échantillonnage stochastique *efficace*.

1.3 Méthodes générales d'échantillonnage stochastique efficace

Les approches d'échantillonnage stochastique de type Monte Carlo par chaînes de Markov (MCMC) permettent de tirer des échantillons à partir d'une distribution de probabilité donnée en construisant une chaîne de Markov. Des exemples classiques des méthodes MCMC sont l'échantillonneur de Gibbs [GG84] et l'algorithme Metropolis-Hastings [MU49, Has70]. Bien que ces méthodes aient prouvé leur utilité, aussi bien dans le cadre bayésien que d'autres domaines du calcul scientifique (analyse numérique, physique informatique...), elles peuvent parfois présenter quelques problèmes de convergence, particulièrement dans le cas de lois en grandes dimensions et/ou multimodales. Plus précisément, ces méthodes risquent d'être piégées dans un mode local (ou bassin d'attraction) les empêchant d'explorer efficacement la loi de probabilité cible. Dans la Figure 1.2 est donnée une illustration de ce problème de « piégeage ». En effet, le passage d'un mode vers un autre nécessite de passer par des états intermédiaires de faibles probabilités. Donc la probabilité de sortir du bassin d'attraction du mode locale P_s est très faible⁸ et nécessite en moyenne $T_s = P_s^{-1}$ itérations.

De ce fait, la question de l'amélioration des propriétés de convergence des méthodes MCMC a été étudiée dans la littérature, et différentes méthodes ont été proposées pour construire des échantillonneurs efficaces. L'objectif est donc de construire un échantillonneur capable d'explorer la loi *a posteriori* de façon efficace dans un laps de temps raisonnable, permettant ainsi d'éviter de rester bloqué dans des maxima locaux. Dans cette section, nous allons présenter quelques-unes des pistes étudiées dans le cadre bayésien pour la résolution des problèmes inverses.

Pour faire la distinction avec les notations introduites dans la section précédente, et pour simplifier les explications, on considère ici le cas d'une loi cible *a posteriori*, dépendant d'une seule variable d'intérêt $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^K$:

$$p(\mathbf{u}|\mathbf{z}) = G(\mathbf{z}; \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{\Gamma})\pi(\mathbf{u})$$

où \mathbf{z} représente les données observées et $G(\cdot; \boldsymbol{\mu}, \mathbf{\Gamma})$ est la densité de probabilité de la loi gaussienne de moyenne $\boldsymbol{\mu}$ et matrice de covariance $\mathbf{\Gamma}$. Ici, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times K}$ est un simple opérateur linéaire, $\mathbf{\Gamma} \in \mathbb{R}^{K \times K}$ est une matrice de covariance quelconque et $\pi(\mathbf{u})$ représente la loi *a priori* sur

⁸Cette probabilité P_s peut être considérée comme inversement proportionnelle au travail (au sens physique) nécessaire pour se déplacer, sous la courbe de la densité, afin de sortir du bassin d'attraction.

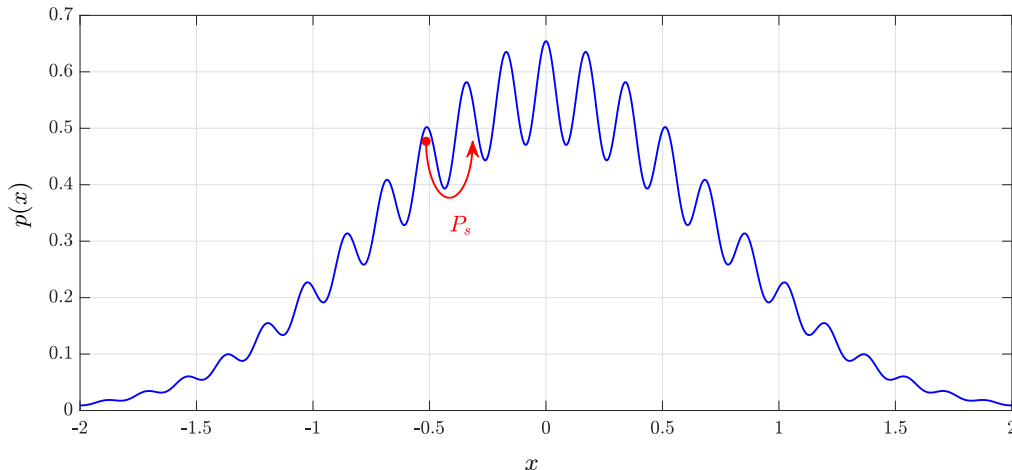


FIGURE 1.2 : Illustration du problème de piégeage des approches MCMC.

\mathbf{u} . Par ailleurs, afin d'alléger les notations et expressions mathématiques, nous écrivons $p(\mathbf{u})$ au lieu $p(\mathbf{u}|\mathbf{z})$ ⁹. Finalement, on introduit la fonction ψ tel que $\psi(\mathbf{u}) = \ln(p(\mathbf{u}))$. On peut distinguer trois types d'approches pour l'échantillonnage efficace : les méthodes MCMC inspirées de l'optimisation, les méthodes d'augmentation de données, et les échantillonneurs partiellement marginalisés, que nous présentons ci-dessous.

1.3.1 Méthodes MCMC inspirées de l'optimisation

Les méthodes MCMC inspirées de l'optimisation cherchent à guider la chaîne de Markov vers les régions les plus probables en intégrant des outils mathématiques et algorithmiques développés dans le contexte de l'optimisation. Nous présentons ici trois approches de ce type.

Langevin Monte Carlo (LMC). L'algorithme de Langevin non ajusté (*Unadjusted Langevin Algorithm*) (ULA) est l'un des échantillonneurs les plus connus utilisant le gradient de la log-densité pour guider la chaîne de Markov. Celui-ci est basé sur la diffusion de Langevin qui est un processus de Markov à temps continu $\{\mathbf{u}(\tau) : \tau \in \mathbb{R}_+\}$ et qui est défini comme la solution de l'équation différentielle stochastique suivante [RS02] :

$$d\mathbf{u}(\tau) = \frac{1}{2}\nabla\psi(\mathbf{u}(\tau)) d\tau + d\mathbf{w}(\tau), \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \tau \in \mathbb{R}_+ \quad (1.15)$$

où $\mathbf{w}(\tau)$ décrit un mouvement brownien dans \mathbb{R}^K . Sous condition que la densité $p(\mathbf{u})$ soit différentiable et non-nulle partout sur \mathbb{R}^K le processus $\{\mathbf{u}(\tau) : \tau \in \mathbb{R}_+\}$ converge en distribution vers $p(\mathbf{u})$ quand $\tau \rightarrow \infty$ [RT96]. Cependant, la simulation d'échantillons à partir de (1.15) est souvent impossible. En pratique, la discrétisation d'Euler-Mayurama de la diffusion de Langevin est alors utilisée pour aboutir à l'algorithme ULA :

$$\mathbf{u}^{(t)} = \mathbf{u}^{(t-1)} + \gamma\nabla\psi(\mathbf{u}^{(t-1)}) + \sqrt{2\gamma}\mathbf{b} \quad (1.16)$$

où \mathbf{b} est un bruit blanc gaussien et γ est un paramètre qui contrôle la discrétisation temporelle ainsi que la variance de \mathbf{b} . Évidemment, cette discrétisation introduit un biais et donc ULA produit des échantillons qui ne sont pas distribués exactement suivant $p(\mathbf{u})$. Dans l'algorithme

⁹La dépendance de la loi *a posteriori* aux données et autres paramètres auxiliaires sera explicitée quand nécessaire pour éviter les confusions.

Metropolis Adjusted Langevin Algorithm (MALA) ce biais est corrigé en ajoutant une étape Metropolis-Hastings (MH) d'acceptation/réjection qui garantit la convergence vers la loi cible $p(\mathbf{u})$. L'algorithme MALA revient donc à un algorithme Metropolis-Hastings à marche aléatoire (*Random-Walk*) avec une loi de proposition gaussienne :

$$\mathbf{u}^{(t)} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{u}^{(t-1)} + \gamma \nabla \psi\left(\mathbf{u}^{(t-1)}\right), 2\gamma \mathbf{I}\right)$$

Ceci peut être interprété comme une proposition à partir d'une approximation quadratique locale de la fonction $\psi(\mathbf{u})$ autour de $\mathbf{u}^{(t-1)}$ avec une matrice hessienne $\mathbf{H}_\psi = (2\gamma)^{-1}\mathbf{I}$. Par ailleurs, les performances de MALA peuvent être améliorées en introduisant une matrice d'incrément temporel \mathbf{P} définie positive qui permet de prendre en compte la courbure de la loi *a posteriori* de manière plus adéquate, on parle alors de MALA pré-conditionné. Les choix classiques pour la matrice \mathbf{P} sont la hessienne de $\psi(\mathbf{u})$ ou la matrice d'information de Fisher. Toutefois, pour des problèmes de grande dimension le calcul (inversion et/ou factorisation) de ces matrices est généralement gourmand en coût de calcul, par conséquent des approximations locales de ces matrices sont privilégiées en pratique.

Majorize-Minimize Metropolis-Hastings (3MH). S'appuyant sur l'algorithme MALA et les approches *Majorize-Minimize*, plus précisément les approches semi-quadratiques multiplicatives [GR92], une extension des méthodes Langevin Monte Carlo a été proposée dans [MCBBP20]. En particulier, sous certaines conditions (notamment la différentiabilité de $\psi(\mathbf{u})$), le logarithme de la loi *a posteriori* $\psi(\mathbf{u})$ peut être approximé localement par une fonction majorante quadratique $Q(\mathbf{u})$ dont la matrice hessienne $\mathbf{P}^{(t)} = \mathbf{P}(\mathbf{u}^{(t)})$ peut-être calculée directement à partir de $\psi(\mathbf{u}^{(t)})$.

$$\mathbf{u}^{(t)} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{u}^{(t-1)} + \gamma(\mathbf{P}^{(t-1)})^{-1} \nabla \psi\left(\mathbf{u}^{(t-1)}\right), 2\gamma(\mathbf{P}^{(t-1)})^{-1}\right)$$

Cette stratégie permet ainsi d'adapter localement la matrice $\mathbf{P}^{(t)}$ en fonction de l'itéré $\mathbf{u}^{(t)}$ afin d'améliorer le taux d'acceptation de l'étape MH et donc l'efficacité de l'échantillonneur. En effet, il a été montré dans un cadre applicatif de restauration d'image que l'algorithme 3MH est plus efficace que l'algorithme MALA et sa version pré-conditionnée par la matrice Hessienne (*i.e.*, Newton MCMC).

Proximal Monte Carlo (PMC). Pour relaxer la condition de différentiabilité des méthodes à base de gradient, comme les méthodes que nous venons de voir, des approches s'inspirant des méthodes d'optimisation convexe non différentiable ont été récemment proposées. Ainsi, une adaptation de l'algorithme MALA pour échantillonner des distributions non-lisses (*non-smooth*) a été proposée dans [Per16] donnant lieu à l'algorithme P-MALA où, comparé à (1.16) la discrétisation d'Euler-Mayurama fait intervenir l'opérateur proximal [CP11] du logarithme de la loi $p(\mathbf{u})$ au lieu du gradient :

$$\mathbf{u}^{(t)} = \left(1 - \frac{\gamma}{\lambda}\right) \mathbf{u}^{(t-1)} + \frac{\gamma}{\lambda} \text{prox}_\psi^\lambda(\mathbf{u}^{(t-1)}) + \sqrt{2\gamma} \mathbf{b} \quad (1.17)$$

Rappelons que l'évaluation de l'opérateur proximal revient à résoudre le problème d'optimisation convexe¹⁰ suivant :

$$\text{prox}_\psi^\lambda(\mathbf{u}) = \arg \max_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^K} \psi(\mathbf{v}) - \frac{1}{2\lambda} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2$$

¹⁰Quand $p(\mathbf{u})$ est une densité log-concave *i.e.*, ψ est concave.

De la même façon que l'opérateur proximal peut être interprété comme une descente de gradient sur l'enveloppe de Moreau, P-MALA peut être interprété comme un algorithme MALA classique effectué sur l'approximation de Moreau de la loi *a posteriori* $p(\mathbf{u})$ qui est donnée par :

$$p_\lambda(\mathbf{u}) = \sup_{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^K} p(\mathbf{v}) \exp\left(-\frac{1}{2\lambda} \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2\right) \quad (1.18)$$

Toutefois, dans le cadre bayésien, l'évaluation de cet opérateur pour le logarithme de la loi *a posteriori* $p(\mathbf{u})$ peut parfois s'avérer compliquée. Afin de surmonter cette difficulté, l'algorithme *Moreau-Yosida Unadjusted Langevin Algorithm* MYULA a été proposé dans [DMP18]. Celui-ci se base sur le fait qu'en inférence bayésienne, la loi *a posteriori* $p(\mathbf{u})$ se compose d'un terme de fidélité aux données qui est généralement lisse (*e.g.*, loi gaussienne) et un *a priori* potentiellement non-lisse. En d'autres termes, le logarithme de cette loi s'écrit $\psi(\mathbf{u}) = \psi_1(\mathbf{u}) + \psi_2(\mathbf{u})$ avec $\psi_1(\mathbf{u})$ une fonction lisse (*e.g.*, quadratique) et $\psi_2(\mathbf{u})$ une fonction potentiellement non-lisse. Ainsi, l'opérateur proximal est calculé uniquement sur la fonction non-lisse $\psi_2(\mathbf{u})$ qui est généralement plus simple à évaluer que l'opérateur proximal de $\psi(\mathbf{u})$. Similairement à P-MALA, MYULA peut également être interprété comme un algorithme MALA classique effectué sur la loi *a posteriori* donnée par la densité suivante :

$$p_\lambda(\mathbf{u}|\mathbf{z}) = G(\mathbf{z}; \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{\Gamma})\pi_\lambda(\mathbf{u})$$

où $\pi_\lambda(\mathbf{u})$ est l'approximation de Moreau de l'*a priori* $\pi(\mathbf{u})$. Notons que l'algorithme MYULA implique deux niveaux d'approximation la première vient de l'approximation de Moreau, et la seconde de la discrétisation temporelle de diffusion de la Langevin. Cependant, il est possible d'envisager, comme pour P-MALA, de rectifier les approximations par une étape d'acceptation/rejet.

1.3.2 MCMC et augmentation de données

Dans la littérature, différentes études ont été menées autour des approches d'augmentation de données (*Data Augmentation*) ou de séparation de variables (*Variable splitting*), qui consistent à introduire des variables auxiliaires (ou latentes) afin d'améliorer l'efficacité des méthodes MCMC. Ces méthodes partagent toutes le même principe suivant. Étant donné qu'il est difficile de tirer des échantillons directement à partir de la loi cible $p(\mathbf{u})$, ces méthodes construisent, en introduisant des variables aléatoires auxiliaires \mathbf{v} , une loi jointe $p(\mathbf{u}, \mathbf{v})$. Ensuite une chaîne de Markov $\{\mathbf{u}^{(t)}, \mathbf{v}^{(t)}\}_{t=1, \dots, T}$ est construite en tirant des échantillons \mathbf{u} et \mathbf{v} de façon alternée à partir des lois conditionnelles, tel que présenté dans Algorithme 1.2.

Algorithme 1.2 Échantillonneur de Gibbs générique des approches augmentation de données.

A chaque itération (t), à partir des échantillons courants $(\mathbf{u}^{(t)}, \mathbf{v}^{(t)})$:

1. tirer $(\mathbf{u}^{(t+1)}, \mathbf{v}^{(t+1)})$ comme suit :

- (a) $\mathbf{v}^{(t+1)} \sim p(\mathbf{v}|\mathbf{u}^{(t)})$,
 - (b) $\mathbf{u}^{(t+1)} \sim p(\mathbf{u}|\mathbf{v}^{(t+1)})$.
-

Évidemment, la loi jointe $p(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ doit être choisie tel que l'échantillonnage à partir des lois conditionnelles soit possible et facile à implémenter. Dans la littérature on trouve des schémas d'augmentation de données *exacts*, tel que $p(\mathbf{u}) = \int p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}$ comme dans le BLASSO [PC08] à titre d'exemple. Mais aussi des schémas d'augmentation de données *approchés* c'est-à-dire $p(\mathbf{u}) \approx \int p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}$ comme par exemple le modèle *Asymptotically Exact Data Augmentation* (AXDA) proposé dans [VDC20] qui permet de s'affranchir de la question de la construction du schéma d'augmentation de données au prix d'une approximation.

Monte Carlo Hamiltonien (HMC). Un exemple typique des méthodes MCMC avec variables auxiliaires est l'algorithme Monte Carlo Hamiltonien [DKPR87, GC11] qui peut être vu comme l'algorithme Metropolis-Hastings combinant les méthodes d'optimisation variationnelle et d'échantillonnage stochastique. Dans HMC la loi cible $p(\mathbf{u})$ est augmentée par un vecteur de variables auxiliaires $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^K$ distribué suivant une gaussienne centrée de matrice de covariance \mathbf{Q} telle que :

$$p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = p(\mathbf{u})G(\mathbf{v}; \mathbf{0}, \mathbf{Q})$$

Des échantillons de \mathbf{u} et \mathbf{v} sont ensuite générés suivant la dynamique hamiltonienne donnée par les équations différentielles paramétriques suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}}{dt} &= -\nabla_{\mathbf{v}} \ln(p(\mathbf{u}, \mathbf{v})) = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{v} \\ \frac{d\mathbf{v}}{dt} &= -\nabla_{\mathbf{u}} \ln(p(\mathbf{u}, \mathbf{v})) = \nabla_{\mathbf{u}}\psi(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (1.19)$$

Comme la résolution analytique des équations (1.19) est généralement impossible on fait appel en pratique à des schémas de discrétisation ciblant une approximation de $p(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ puis cette approximation est corrigée par une étape de Metropolis-Hastings.

Variables auxiliaires Monte Carlo (auxMC). L'échantillonnage à partir des lois *a posteriori* de grande dimension est une tâche compliquée, notamment si la vraisemblance introduit une certaine corrélation (*e.g.*, bruit corrélé). Le problème est d'autant plus compliqué que les variables d'intérêts sont considérées *a priori* corrélées (*i.e.*, *a priori* non indépendant) Un exemple typique de ce type de situation est rencontré en restauration d'image quand \mathbf{A} représente un filtre de lissage (*blur operator*) associé à un *a priori* prenant en compte certaines informations structurelles sur l'image par exemple un opérateur de gradient discret. Dans le but de dissocier les deux sources de corrélation et traiter chacune séparément, une stratégie basée sur l'introduction de variables auxiliaires à été proposé dans [MCBBP18] en particulier pour les lois *a posteriori* impliquant au moins un terme gaussien (la vraisemblance ou l'*a priori*, voire les deux).

En s'inspirant des stratégies de minimisation semi-quadratique (en particulier les travaux dans [BBFAC04]) la fonction $\psi(\mathbf{u})$ est augmentée par un vecteur de variable auxiliaires $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^J$ tel que :

$$\psi(\mathbf{u}) = \sup_{\mathbf{v}} \psi(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sup_{\mathbf{v}} \psi(\mathbf{u}) + Q(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \quad (1.20)$$

où $Q(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ est une fonction concave quadratique en \mathbf{u} et \mathbf{v} , telle que la loi jointe $p(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ s'écrit :

$$p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \exp(\psi(\mathbf{u}, \mathbf{v})) = p(\mathbf{u})G(\mathbf{v}; \mathbf{P}\mathbf{u}, \mathbf{Q}) \implies p(\mathbf{u}) = \int p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}$$

avec $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{K \times K}$ une matrice symétrique définie positive et $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{J \times K}$. L'efficacité de l'échantillonnage dépend bien entendu du choix de ces deux matrices qui est lié au problème traité et particulièrement, si la source de corrélation provient :

- (i) de la matrice de covariance du bruit $\mathbf{\Gamma}$ uniquement,
- (ii) du couplage de cette matrice avec l'opérateur \mathbf{A} en d'autres termes $\mathbf{A}^T\mathbf{\Gamma}^{-1}\mathbf{A}$.

Par ailleurs, afin de ne pas compromettre le gain apporté par cette stratégie de variables auxiliaires, ces matrices doivent avoir une structure simple afin de permettre l'échantillonnage efficace de \mathbf{v} qui est distribué suivant une loi gaussienne multidimensionnelle :

$$\mathbf{v}^{(t+1)}|\mathbf{u}^{(t)} \sim \mathcal{N}(\mathbf{P}\mathbf{u}^{(t)}, \mathbf{Q}).$$

L'échantillonnage des variables d'intérêt \mathbf{u} quand à lui se fait via la loi conditionnelle $p(\mathbf{u}|\mathbf{v})$ qui admet une forme plus simple à traiter que la loi $p(\mathbf{u})$ initiale :

$$\begin{aligned} \text{Cas (i)} : p(\mathbf{u}|\mathbf{v}) &= \text{G}(\mathbf{A}\mathbf{u}; f_1(\mathbf{v}), \mu\mathbf{I})\pi(\mathbf{u}), \quad \text{avec } 0 < \mu < 1/\|\mathbf{\Gamma}^{-1}\|_S \\ \text{Cas (ii)} : p(\mathbf{u}|\mathbf{v}) &= \text{G}(\mathbf{u}; f_2(\mathbf{v}), \mu\mathbf{I})\pi(\mathbf{u}), \quad \text{avec } 0 < \mu < 1/\|\mathbf{A}^T\mathbf{\Gamma}^{-1}\mathbf{A}\|_S \end{aligned}$$

où $\|\cdot\|_S$ est la norme spectrale et f_i sont des fonctions de \mathbf{v} dépendant des données. Observons que le terme gaussien ne fait plus intervenir les matrices sources de corrélation, car celles-ci sont couplées aux variables auxiliaires. Le cas (i) revient à un problème impliquant une « vraisemblance » avec un bruit non corrélé, alors que le cas (ii) peut s'interpréter comme un simple problème de débruitage sous l'*a priori* $\pi(\mathbf{u})$. De plus, si cet *a priori* est indépendant $\pi(\mathbf{u}) = \prod_k \pi_k(u_k)$ l'échantillonnage de \mathbf{u} peut alors se faire de façon indépendante pour chacune des composantes u_k . Par ailleurs, des algorithmes plus élaborés peuvent être également considérés pour échantillonnage de \mathbf{u} comme l'algorithme MALA pré-conditionné si l'*a priori* est différentiable ou si l'*a priori* remplit les conditions nécessaires, comme par exemple l'algorithme 3MH [MCPBB16]. Il a été montré empiriquement que cette stratégie d'augmentation de données est plus efficace que l'algorithme MALA classique ainsi que l'algorithme HMC.

Modèles bayésiens hiérarchiques. Une autre approche d'augmentation de données dans le cadre bayésien s'appuie sur des modèles bayésiens hiérarchiques. Un exemple typique de ces méthodes est le BLASSO introduit dans [PC08] dans le cadre de la régression linéaire parcimonieuse. Plus précisément, le BLASSO repose sur la représentation de l'*a priori*, supposé indépendant, en mélange de gaussiennes qui fait intervenir des variables auxiliaires $\mathbf{v} \in \mathbb{R}_+^K$. En d'autres termes $\pi(\mathbf{u})$ s'écrit :

$$\pi(\mathbf{u}) = \prod_k \pi_k(u_k) = \prod_k \int_{\mathbb{R}_+} \text{G}(u_k; 0, v_k) \pi_v(v_k) dv_k \quad (1.21)$$

Un échantillonneur de Gibbs peut alors être construit à partir de la loi *a posteriori* jointe de \mathbf{u} et \mathbf{v} :

$$p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \text{G}(\mathbf{z}; \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{\Gamma}) \text{G}(\mathbf{u}; \mathbf{0}, \mathbf{V}) \prod_k \pi_v(v_k) \quad (1.22)$$

où $\mathbf{V} = \text{diag}\{\mathbf{v}\}$. Cette stratégie permet de simplifier l'échantillonnage des variables d'intérêt \mathbf{u} dont la loi conditionnelle *a posteriori* est gaussienne. Par ailleurs, comme l'*a priori* est indépendant, les variables auxiliaires v_k peuvent être échantillonnées indépendamment. Il est important de noter que ce schéma d'augmentation est exact, dans le sens où il n'introduit aucun biais et ne nécessite donc pas d'étape de Metropolis-Hastings. En effet (1.21) implique que

$$p(\mathbf{u}) = \int_{\mathbb{R}_+^K} p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v},$$

donc les échantillons $\{\mathbf{u}^{(t)}\}_{t=1,\dots,T}$ générés conjointement avec $\{\mathbf{v}^{(t)}\}_{t=1,\dots,T}$ sont bien distribués suivant la loi cible $p(\mathbf{u})$ lorsque l'échantillonneur a convergé. Ceci est un avantage par rapport aux algorithmes LMC et HMC. De plus, contrairement à l'approche auxMC, ici aucune supposition n'est faite sur la *gaussianité* de l'*a priori* ni de la vraisemblance.

Dans [PC08] le cas particulier d'un *a priori* de Laplace est considéré avec des variables auxiliaires exponentielles, toutefois la stratégie d'augmentation de données s'applique pour n'importe quel *a priori* admettant la représentation (1.21). Par ailleurs, il est tout à fait possible d'envisager des cas où le modèle bayésien hiérarchique s'applique à la vraisemblance quand cette

dernière n'est pas gaussienne comme par exemple la loi hyperbolique. S'appuyant sur ce travail, d'autres modèles hiérarchiques ont été étudiés dans [CGGK10], notamment des cas où l'*a priori* présente une certaine corrélation entre composantes adjacentes u_k comme le *Fused LASSO* par exemple.

Cependant, certaines applications requièrent la prise en compte de lois *a priori* pour lesquelles il n'est pas toujours évident de trouver une représentation hiérarchique de type (1.21). Dans ce cas, le modèle *Asymptotically Exact Data Augmentation* (AXDA) proposé dans [VDC20] permet de construire de façon systématique un modèle bayésien hiérarchique moyennant une approximation. Plus précisément, des variables auxiliaires $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^K$ sont introduites pour définir une approximation asymptotiquement exacte de la loi cible $p(\mathbf{u})$ ou de l'*a priori* $\pi(\mathbf{u})$ (voire de la vraisemblance¹¹) :

$$\text{Approximation de la loi cible : } p_\rho(\mathbf{u}) = \int \mathcal{K}_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{v}) p(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad \rho > 0 \quad (1.23)$$

$$\text{Approximation de l'a priori : } \pi_\rho(\mathbf{u}) = \int \mathcal{K}_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \pi(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad \rho > 0 \quad (1.24)$$

où $\mathcal{K}_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathcal{K}(\rho^{-1}(\mathbf{u} - \mathbf{v}))$ est un noyau (*e.g.*, noyau de lissage [DE12]) permettant de contrôler l'écart entre les variables \mathbf{u} et \mathbf{v} . En particulier, le noyau \mathcal{K}_ρ doit converger vers la distribution de Dirac quand $\rho \rightarrow 0$, afin que l'approximation soit asymptotiquement exacte :

$$\begin{aligned} \lim_{\rho \rightarrow 0} p_\rho(\mathbf{u}) &= \lim_{\rho \rightarrow 0} \int \mathcal{K}_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{v}) p(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = p(\mathbf{u}), \\ \text{ou } \lim_{\rho \rightarrow 0} \pi_\rho(\mathbf{u}) &= \lim_{\rho \rightarrow 0} \int \mathcal{K}_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \pi(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \pi(\mathbf{u}). \end{aligned}$$

Il est important de souligner que le paramètre ρ joue un rôle crucial car celui-ci permet de contrôler l'approximation. En d'autres termes de faibles valeurs de ρ permettent de rapprocher $p_\rho(\mathbf{u})$ de la loi cible $p(\mathbf{u})$. Toutefois, plus ρ est faible, plus grande est la corrélation entre \mathbf{u} et \mathbf{v} ce qui peut compromettre considérablement l'efficacité de l'échantillonnage, nous reviendrons sur cet aspect plus en détails lorsque nous aborderons les approximations asymptotiquement exactes dans le chapitre suivant.

Il a été montré empiriquement que l'échantillonneur de Gibbs construit à partir du modèle AXDA est efficace, notamment parce qu'il permet de simplifier les corrélations structurelles entre l'*a priori* et la vraisemblance et que l'approximation engendre un biais relativement faible notamment dans le cadre de la restauration d'images ou encore d'échantillonnage de gaussiennes en grande dimension [VDC20]. Notons que dans le cas où $\mathcal{K}_\rho(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ est un noyau de lissage, le modèle AXDA peut-être une alternative intéressante pour les approches Proximal Monte Carlo en particulier quand l'évaluation de l'opérateur proximal est coûteuse et/ou ne peut pas être faite de façon exacte.

1.3.3 Échantillonneurs partiellement marginalisés

Dans un autre registre, les échantillonneurs partiellement marginalisés ont été étudiés. Le principe est de générer des échantillons en combinant des étapes durant lesquelles l'échantillonnage se fait pour certains paramètres à partir de la loi a posteriori marginalisée et pour d'autres paramètres à partir de la loi a posteriori jointe. Dans [DP08] un certain nombre d'outils mathématiques ont été introduits qui permettent de construire un *Partially Collapsed Gibbs Sampler* (PCGS) afin d'améliorer les propriétés de mélange et donc la convergence des chaînes de Markov :

1. **Réduction** : consiste à ignorer certaines variables lors de l'échantillonnage,

¹¹Notons que des travaux similaires ont été conduits dans [RJLW20] pour l'approximation de la vraisemblance.

2. **Permutation** : consiste à interchanger l'ordre dans lequel les variables sont échantillonnées,
3. **Marginalisation** : consiste à échantillonner certaines variables à partir de lois conditionnelles marginalisées.

Bien que la réduction est une étape qui permet de réduire considérablement le coût de calcul par itération des échantillonneurs, celle-ci doit être manipulée avec soin afin de ne pas modifier la distribution stationnaire de la chaîne de Markov. La marginalisation et la permutation maintiennent toutes les deux la distribution stationnaire de la chaîne de Markov. Toutefois, la marginalisation permet d'améliorer considérablement la convergence des échantillonneurs, tandis que l'effet de la permutation est généralement faible.

Prenons l'exemple simple d'une loi cible jointe $p(\mathbf{u}, \theta)$. Celle-ci peut représenter une loi *a posteriori* où $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^K$ est la variable d'intérêt et $\theta \in \mathbb{R}$ est un hyper-paramètre inconnu du modèle qui nécessite d'être estimé également (*i.e.*, $\pi(\mathbf{u})$ devient $\pi(\mathbf{u}, \theta)$). Au lieu de considérer un échantillonneur de Gibbs classique à partir des lois *a posteriori* conditionnelles $p(\mathbf{u}|\theta)$ et $p(\theta|\mathbf{u})$, il est possible, moyennant une combinaison des outils listés ci-dessus, de transformer l'échantillonneur de Gibbs en un échantillonneur de type PCGS plus efficace exploitant la loi *a posteriori* de θ marginalisée par rapport à \mathbf{u} :

$$p(\theta) = \int_{\mathbb{R}} p(\mathbf{u}, \theta) d\mathbf{u} = \int_{\mathbb{R}} G(\mathbf{z}; \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{\Gamma})\pi(\mathbf{u}, \theta) d\mathbf{u}.$$

Un tel échantillonneur PCGS est présenté dans Algorithme 1.3.

Algorithme 1.3 Échantillonneur de PCGS de la loi jointe $p(\mathbf{u}, \theta)$ exploitant le principe de marginalisation

A chaque itération (t), à partir des échantillons courants $(\mathbf{u}^{(t)}, \theta^{(t)})$:

1. tirer $(\mathbf{u}^{(t+1)}, \theta^{(t+1)})$ comme suit :

- (a) $\theta^{(t+1)} \sim p(\theta)$,
 - (b) $\mathbf{u}^{(t+1)} \sim p(\mathbf{u}|\theta^{(t+1)})$,
-

Remarquons d'abord que dans l'exemple de l'Algorithme 1.3 le paramètre θ est échantillonné à partir de sa loi marginalisée. Ceci implique que si $p(\theta)$ est une loi usuelle nous obtenons des échantillons $\{\theta^{(t)}\}$ indépendants. De plus, s'il est possible d'échantillonner conjointement la variable d'intérêt \mathbf{u} à partir de $p(\mathbf{u}|\theta)$ ce PCGS revient à un échantillonneur Gibbs par bloc, c'est-à-dire que les deux étapes du PCGS sont équivalentes à un échantillonnage conjoint à partir de $p(\mathbf{u}, \theta)$. Ainsi les échantillons $\{\mathbf{u}^{(t)}, \theta^{(t)}\}$ produits par le PCGS sont des échantillons indépendants de la loi jointe cible. Dans le cadre d'applications concrètes, le PCGS n'est pas toujours un échantillonneur de Gibbs par bloc, cependant celui-ci reste nettement plus efficace que l'échantillonneur de Gibbs classique de la loi jointe (*e.g.*, [GIL11, DT10]).

Dans un cadre général, il existe plusieurs manières de construire un PCGS, notamment dans le cas où il y a plusieurs variables mises en jeu, et le choix de la stratégie de construction peut évidemment avoir un impact considérable sur l'efficacité de l'échantillonneur PCGS résultant, tant en termes de propriété de mélange de la chaîne de Markov qu'en termes de coût de calcul. En théorie, plus l'ensemble des variables marginalisées est grand plus l'échantillonneur PCGS est efficace. Cependant, la loi marginalisée par rapport à cet ensemble des variables doit être simple à manipuler et ne doit pas nécessiter un temps de calcul important pour être échantillonnée au point d'annihiler le gain apporté par la marginalisation. Par ailleurs, comme nous le verrons par la suite, la loi marginale n'est pas toujours calculable analytiquement ce qui empêche la

construction de l'échantillonneur PCGS. En effet, dans notre exemple de la loi jointe $p(\mathbf{u}, \theta)$, la marginalisation de \mathbf{u} n'est possible que si la loi $\pi(\mathbf{u}|\theta)$ est conjuguée à la vraisemblance.

1.3.4 Conclusion sur l'échantillonnage stochastique efficace

Nous avons vu que plusieurs méthodes ont été proposées dans littérature dans le but d'améliorer l'efficacité des méthodes d'échantillonnage stochastique.

Certaines de ces méthodes s'inspirent des outils développés en optimisation, en particulier celles qui utilisent l'information du premier et/ou du second ordre du logarithme de la loi cible afin de guider les chaîne de Markov vers des régions plus probables. Évidemment, ces méthode s'appliquent uniquement si la loi cible est différentiable. Les approches Proximal-MC permettent de relaxer cette condition de différentiabilité, toutefois l'évaluation de l'opérateur proximal peut parfois s'avérer coûteuse en temps de calcul. Par ailleurs, ces approches ne peuvent pas être considérées dans le cadre des *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} car ces derniers prennent en compte des variables discrètes.

D'autre part, les méthodes d'augmentation de données, introduisent des variables auxiliaires afin de simplifier l'échantillonnage à partir des lois *a posteriori* conditionnelles. Le schéma d'augmentation de données peut être soit exact, sous certaines conditions sur la loi cible restreignant ainsi l'utilisation de ces approches uniquement à certaines lois de probabilité, soit en considérant un schéma d'augmentation de données systématique facile à mettre en œuvre, mais au prix d'une approximation de la loi cible.

Finalement, les échantillonneurs partiellement marginalisés cherchent au contraire à réduire l'ensemble des variables mises en jeu de façon partielle (c'est-à-dire uniquement sur certaines étapes de l'échantillonneur) afin de réduire les corrélations entre les variables dans le but d'améliorer les propriétés de mélange des échantillonneurs. Bien que cette approche soit particulièrement efficace, la loi *a posteriori* marginale n'admet pas toujours une forme analytique exploitable. De plus, l'échantillonnage de cette loi marginale doit être suffisamment simple à implémenter pour ne pas compromettre le gain apporté par la marginalisation.

1.4 Objectifs de la thèse et pistes suivies

L'objectif principal de cette thèse est la résolution des problèmes inverses parcimonieux dans le cadre bayésien exploitant des modèles *a priori* prenant en compte la parcimonie de façon explicite et utilisant des approches d'échantillonnage stochastique. En particulier, notre objectif est d'améliorer l'efficacité des échantillonneurs pour la résolution des problèmes inverses parcimonieux en prenant en compte un modèle *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} . En effet, comme nous l'avons évoqué plus haut, bien que ces méthodes aient montré leur efficacité en termes de restitution du signal parcimonieux y compris dans le cas non supervisé et/ou aveugle, celles-ci nécessitent un temps de calcul important, sauf dans le cas du modèle *a priori* Bernoulli-Gaussien.

PCGS pour les *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} . Dans le cas particulier du modèle *a priori* Bernoulli-Gaussien, une approche d'échantillonnage partiellement marginalisé a été proposée et étudiée dans [GIL11]. Grâce à la marginalisation des amplitudes \mathbf{x} , le PCGS proposé échantillonne les variables de Bernoulli q_k à partir de la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux amplitudes, puis échantillonne les amplitudes conjointement à partir de leur loi *a posteriori* conditionnelle. Finalement, les hyper-paramètres sont échantillonnés de la même façon que dans un algorithme de Gibbs classique (voir Algorithme 1.4).

Cet échantillonneur PCGS est comparé dans [GIL11] avec l'approche Gibbs classique (que nous avons vue dans 1.2.2.2) ainsi qu'avec l'approche dite des *K-tuples Gibbs sampler* qui

Algorithme 1.4 Échantillonneur de PCGS pour l'*a priori* Bernoulli- \mathcal{D} .

A chaque itération (t) , à partir des échantillons courants $(\mathbf{q}^{(t)}, \mathbf{x}^{(t)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)})$:

1. tirer d'abord $q_k^{(t+1)}$ pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$:
 - $q_k^{(t+1)} \sim p(q_k | \mathbf{q}_{1:k-1}^{(t+1)}, \mathbf{q}_{k+1:K}^{(t)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)}, \mathbf{y})$,
2. tirer conjointement les amplitudes $\mathbf{x}^{(t+1)}$:
 - $\mathbf{x}^{(t+1)} \sim p(\mathbf{x} | \mathbf{q}^{(t+1)}, \boldsymbol{\theta}^{(t)}, \mathbf{y})$,
3. ensuite tirer les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}$:
 - $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} \sim p(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{q}^{(t+1)}, \mathbf{x}^{(t+1)}, \mathbf{y})$,

consiste à échantillonner conjointement un groupe de K couples adjacents $\{(q_l, x_l)\}_{l=k \dots k+K-1}$. Il a été montré empiriquement que pour des problèmes de degré de parcimonie faible, la méthode K -tuple avec $K = 2$ est l'approche la plus efficace, en particulier parce que le coût de calcul par itération de cette approche est assez faible. En revanche, pour des problèmes de forte parcimonie, le PCGS est préférable, en particulier grâce aux astuces mathématiques et implémentation numérique proposées par [GIL11] qui permettent de réduire considérablement le coût de calcul par itération du PCGS. Cette même stratégie a été utilisée dans [KTHD12] dans le cadre de la déconvolution de train d'impulsions aveugle par le modèle Bernoulli-Gaussien avec une contrainte de distance minimale entre atomes. Récemment, Boudineau *et al.* [BCBB16] ont étendu l'échantillonnage PCGS à des problèmes inverses parcimonieux impliquant des dictionnaires continus $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})$ dépendant d'hyper-paramètres non-linéaires $\boldsymbol{\nu}$. Dans les deux études, il est montré que le PCGS est nettement plus efficace que le Gibbs classique.

Il est important de souligner qu'à cause des variables auxiliaires binaires des *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} , il semble naturel de privilégier le PCGS aux autres approches vues précédemment. En effet, les méthodes à base de gradient et opérateur proximal ne sont simplement pas applicables dans ce contexte¹². Par ailleurs, trouver un schéma d'augmentation de données pour l'échantillonnage efficace des variables binaires n'est pas une tâche évidente.

De plus, grâce aux variables binaires, l'étape d'échantillonnage joint des amplitudes \mathbf{x} (étape 2 de l'échantillonneur PCGS de l'Algorithme 1.4) peut se faire généralement sans difficulté, car seules les amplitudes x_k actives (*i.e.*, les amplitudes dont la variable binaire associée est égale 1) sont mise en jeu. En d'autres termes, cette étape implique l'échantillonnage d'un vecteur de dimension $L = \|\mathbf{x}\|_0$ réduite plutôt que M . Quant à l'échantillonnage des variables de Bernoulli, [GIL11] ont proposé une implémentation numérique efficace basée sur la mise à jour de Cholesky de rang 1 permettant de réduire le temps et la mémoire de calcul.

Toutefois, comme il a été précisé précédemment, pour que cette stratégie puisse être envisageable, il faut que la loi *a posteriori* marginale soit calculable analytiquement :

$$p(\mathbf{q}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) \propto P(\mathbf{q} | \lambda) p(\boldsymbol{\theta}) \int_{\mathbb{S}^K} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x} | \mathbf{q}, \boldsymbol{\theta}_x) d\mathbf{x} \quad (1.25)$$

Dans le cas du modèle Bernoulli-Gaussien le calcul de cette intégrale se fait de façon simple. En effet, l'*a priori* gaussien sur les amplitudes est un *a priori* conjugué, en d'autres termes, la loi *a posteriori* des amplitudes est elle aussi gaussienne, le calcul de l'intégrale est alors immédiat à partir de la constante de normalisation de la densité gaussienne. Cependant, en dehors du

¹²Concrètement, ces méthodes peuvent être utilisées mais uniquement pour l'échantillonnage indépendant des amplitudes conditionnellement aux variables binaires, ce qui en général ne nécessite pas de méthodes élaborées. Par ailleurs, le comportement pathologique de l'échantillonneur de Gibbs classique provient de l'échantillonnage des variables binaires \mathbf{q} et non des amplitudes (voir [BC05]).

cas gaussien, le calcul analytique de l'intégrale s'avère compliqué. De ce fait, cette approche PCGS n'est pas envisageable dans le cas des lois à longues queues comme les *a priori* Bernoulli-Laplace ou Bernoulli-Cauchy utiles pour imposer une moindre régularisation sur les amplitudes, ou dans le cas de lois définies sur un support limité comme les lois positives par exemple. Ainsi, l'approche proposée par [GIL11] ne s'applique que dans le cas gaussien.

1.4.1 Contributions

L'objectif principal des travaux menés durant cette thèse visent à proposer et étudier une nouvelle stratégie ayant pour but la conciliation de l'échantillonneur PCGS avec les *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} avec \mathcal{D} non gaussienne. Notre approche combine deux catégories de méthodes d'échantillonnage stochastique, à savoir les échantillonneurs partiellement marginalisés (PCGS) et les approches d'augmentation de donnée par des modèles bayésien hiérarchique (exacts où approchés). En effet, comme nous venons de le voir, les *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} faisant intervenir des variables binaires la stratégie PCGS est certainement la plus adéquate. Par ailleurs, pour permettre la marginalisation analytique des amplitudes, nous nous appuyons sur une stratégie d'augmentation de données basée sur des lois de mélange continu de gaussiennes.

Modèle Bernoulli mélange de gaussiennes. Notre principale contribution est l'étude d'un nouveau modèle *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} dénommé *Bernoulli mélange de gaussiennes* (BMG). Ce modèle est présenté dans un cadre unificateur, permettant de prendre en compte, de manière systématique, une myriade de lois de probabilité étudiées dans la littérature, admettant une représentation ou une approximation en mélange continu de gaussiennes. Rappelons que l'*a priori* Bernoulli- \mathcal{D} est défini par :

$$\forall k, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda) \text{ avec } \begin{cases} x_k | q_k = 1 & \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_x) \\ x_k | q_k = 0 & \sim \delta_0(x_k) \end{cases} \quad (1.26)$$

et que la loi *a posteriori* associée que nous souhaitons échantillonner est donnée par (voir section 1.2.2.2) :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) \propto |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x} | \mathbf{q}) P(\mathbf{q} | \lambda) p(\boldsymbol{\theta}) \quad (1.27)$$

Le modèle *a priori* BMG est un *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} où la distribution \mathcal{D} est une loi pouvant s'écrire comme un mélange continu de gaussiennes. En d'autres termes, la densité conditionnelle *a priori* des amplitudes vérifie :

$$p(x_k | q_k = 1) = \int p(x_k | w_k, q_k) p_W(w_k) dw \quad (1.28)$$

où $p_W(w_k)$ est la densité de la variable de mélange (ou la variable latente) w_k et $p(x_k | w_k)$ est une densité gaussienne dont la moyenne et/ou la variance dépendent de la variable de mélange w_k . Nous reviendrons plus en détail sur les différents types de mélange continu de gaussiennes dans le chapitre suivant. La loi jointe des amplitudes et des variables de mélange s'écrit :

$$\begin{aligned} p(x_k, w_k | q_k = 1) &= p(x_k | w_k, q_k = 1) p_W(w_k) \\ \implies p(\mathbf{x}, \mathbf{w} | \mathbf{q}) &= p(\mathbf{x} | \mathbf{w}, \mathbf{q}) \prod_k p_W(w_k) \end{aligned} \quad (1.29)$$

où $p(\mathbf{x} | \mathbf{w}, \mathbf{q})$ est une densité gaussienne multidimensionnelle. Nous portons un intérêt particulier aux lois de mélange de gaussiennes car la loi *a posteriori* augmentée donnée par :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) \propto |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x} | \mathbf{w}, \mathbf{q}, \boldsymbol{\theta}_x) \prod_k p_W(w_k) P(\mathbf{q} | \lambda) p(\boldsymbol{\theta})$$

est aisément intégrable par rapport aux amplitudes \mathbf{x} , car $p(\mathbf{x}|\mathbf{w}, \mathbf{q}, \boldsymbol{\theta}_x)$ et la vraisemblance sont toutes les deux gaussiennes. Ainsi, la marginalisation des amplitudes revient à remplacer l'intégrale par la constante de normalisation de cette gaussienne.

Nous reviendrons plus en détail sur les différents calculs et implication de cette stratégie dans le chapitre 3. Toutefois, grâce à cette brève introduction, nous venons de voir que l'*a priori* BMG permet de concilier les échantillonneurs partiellement marginalisés de type PCGS et les modèles *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} quand la distribution \mathcal{D} est un mélange continu de gaussiennes via l'introduction de variables auxiliaires. Il est important de souligner que plusieurs lois de probabilité usuelles sont des lois mélange continu de gaussiennes, comme la loi de Laplace, la loi de *Student* ou encore la loi hyperbolique généralisée.

Cependant, certaines lois de probabilités n'admettent pas de représentation en mélange continu de gaussiennes. Typiquement, toutes les lois à support limité, par exemple les lois à support positif, ne sont pas décomposable sous cette forme. Cela nous a amené à notre seconde contribution principale qui s'articule autour des approximations de lois de probabilité par des lois de mélange continu de gaussiennes.

Approximations ELSA. Dans le but d'étendre le champ d'application du modèle *a priori* BMG aux lois de probabilité qui n'admettent pas de représentation en mélange continu de gaussiennes, nous avons proposé une méthode de construction d'approximation asymptotiquement exacte des lois de probabilité. Plus précisément, cette méthode est basée sur un type particulier de mélange de gaussiennes dit *Location and Scale Mixture of Gaussian* (LSMG) et sera dénommée ELSA pour *asymptotically Exact Location-Scale Approximations*.

Nous aborderons les approximations ELSA plus en détail au chapitre suivant, où nous proposons une approche de construction systématique des approximations ELSA pour n'importe quelle loi à support limité, ainsi qu'une étude de leurs propriétés qui nous permettra de comparer ELSA à certaines méthodes de l'état de l'art. En particulier, nous montrons l'intérêt qu'apportent les approximations ELSA aussi bien en termes de modélisation qu'en termes de convergence quand celles-ci sont utilisées avec des méthodes d'échantillonnage stochastique.

1.4.2 Plan du manuscrit.

Avant d'introduire et d'étudier le modèle *a priori* BMG et l'échantillonneur PCGS associé, nous allons nous intéresser dans un premier temps aux lois de mélange continu de gaussiennes. Dans le chapitre 2, intitulé « [Lois de mélange continu de gaussiennes](#) », nous commençons par donner une définition des lois de mélange continu de gaussiennes ainsi que les différents types de mélange étudiés dans la littérature. Par la suite, nous dresserons un état de l'art des différentes méthodes utilisant les lois de mélange de gaussiennes aussi bien en optimisation déterministe qu'en échantillonnage stochastique afin d'établir quelques liens entre les lois de mélange de gaussiennes et certaines des approches d'échantillonnage efficace vues précédemment. Nous explorerons ensuite les caractéristiques et les disparités entre les différents types de mélanges continus de gaussiennes, tant en termes de capacité à représenter ou approcher des lois de probabilité usuelles que leur adéquation aux méthodes MCMC, notamment en termes de convergence sur des cas d'études simples. Une partie du chapitre 2 sera consacrée à l'étude du cas particulier des *Location and Scale Mixture of Gaussian* (LSMG) qui sont au cœur des approximations ELSA. Nous proposerons certains résultats fondamentaux concernant la construction et la caractérisation des lois de probabilité de type LSMG. Ces résultats permettent entre autres de clarifier et d'améliorer notre compréhension des lois de probabilité LSMG. De plus, ils apportent des connaissances supplémentaires permettant une interprétation statistique des méthodes d'optimisation semi-quadratiques asymétriques.

Le chapitre 3, intitulé « *A priori* Bernoulli mélange de gaussiennes et échantillonnage PCGS » sera consacré entièrement au modèle BMG ainsi qu'à l'échantillonneur PCGS associé. Plus précisément, nous détaillerons les étapes de construction de cet échantillonneur PCGS et montrerons que la stratégie de marginalisation par introduction de variables auxiliaires n'affecte pas la loi stationnaire de la chaîne de Markov générée. Une implémentation numérique efficace sera ensuite proposée. En particulier, nous avons adapté et étendu les techniques introduites dans [GIL11] basées sur les mises à jour de Choleksy de rang 1 permettant de réduire le temps et la mémoire de calcul nécessaires. Finalement, nous discuterons des *a priori* des hyper-paramètres et leur échantillonnage dans le cas non-supervisé.

Les performances du modèle BGM, aussi bien en termes de qualité d'estimation qu'en terme d'efficacité calculatoire sont étudiées dans le chapitre 4, intitulé « Expériences et validations ». Dans un premier temps nous montrerons l'efficacité de l'échantillonneur PCGS appliqué à un problème de déconvolution de trains d'impulsions dans un cadre non supervisé. Ensuite, nous vérifions notre approche d'approximation asymptotiquement exacte ELSA dans le cas des lois à support positif. Plus précisément, l'approximation ELSA sera associée au modèle BMG pour approcher un modèle Bernoulli- \mathcal{D} prenant en compte une contrainte de non-négativité dans le cadre de la déconvolution semi-aveugle de train d'impulsions non négatives.

Nous reviendrons dans le chapitre 5, intitulé « LSMG et méthodes d'optimisation semi-quadratiques asymétriques » vers les mélanges continus de gaussiennes, cette fois-ci dans le cadre des méthodes d'optimisation. Nous présenterons quelques résultats théoriques préliminaires d'une nouvelle l'approche semi-quadratique asymétrique inspirée de nos travaux sur les lois mélanges continus de gaussiennes LSMG. En particulier, nous montrerons que cette nouvelle approche est équivalente, sous certaines conditions, à un estimateur du maximum a posteriori (MAP) associé à un algorithme Expectation-Maximization (EM) [DLR77] impliquant des lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG.

Chapitre 2

Lois de mélange continu de gaussiennes

Sommaire

2.1	Introduction	32
2.1.1	Classes de mélange de gaussiennes	33
2.1.2	Mélange de gaussiennes et optimisation déterministe	37
2.1.3	Mélange de gaussiennes et échantillonnage stochastique	39
2.2	Étude de la classe LSMG	40
2.2.1	Construction des lois LSMG	40
2.2.2	Caractérisation des lois LSMG	42
2.3	Approximations asymptotiquement exactes	43
2.3.1	ELSA : approximation LSMG asymptotiquement exacte	43
2.3.2	Exemple d'approximation ELSA pour la loi gaussienne tronquée	46
2.3.3	Exemple d'approximation ELSA pour la loi exponentielle et cas limites de la famille GH	47
2.4	Expériences préliminaires	50
2.4.1	Exemple 1 : cas d'un <i>a priori</i> Exponentiel	51
2.4.2	Exemple 2 : cas d'un <i>a priori</i> de Laplace	54
2.5	Conclusion	60

Ce chapitre présente nos travaux sur les représentations en mélange continu de gaussiennes et les méthodes échantillonnage stochastique associées. Nous commençons dans la section 2.1 par donner les définitions des représentations de mélange continu de gaussiennes dans un cadre général tout en introduisant les notations mathématiques utilisées dans ce chapitre. Nous ferons ensuite une brève analyse de l'état de l'art des approches utilisant ces représentations aussi bien en optimisation déterministe qu'en échantillonnage stochastique.

La section 2.2 sera consacrée aux lois de mélange de gaussiennes de la classe *Location and Scale Mixture of Gaussian*. En particulier nous proposons des résultats théoriques sur la construction, la décomposition, ainsi que la caractérisation de cette classe de lois de probabilité.

Dans la section 2.3 nous proposons une nouvelle approche pour la construction d'une approximation asymptotiquement exacte à base de lois LSMG et étudions ses propriétés. Cette nouvelle approche d'approximation dite ELSA pour *asymptotically Exact Location-Scale Approximations* est comparée avec les méthodes de l'état de l'art en termes de modélisation en se basant sur les propriétés théoriques ainsi que sur des exemples pratiques.

Nous finirons ce chapitre avec quelques expériences préliminaires dans le but d'étudier les performances des échantillonneurs construits à partir d'ELSA et de les comparer avec les autres

méthodes de l'état de l'art. Par ailleurs, nous étudierons sur un exemple simple, la construction d'un échantillonneur PCGS par mélange de gaussiennes dans le but de montrer la faisabilité et l'efficacité de cette approche.

2.1 Introduction

Les lois de probabilités dites mélanges continus de gaussiennes sont un type particulier de lois de probabilités composées (*Compound Probability Distribution*)¹. De manière générale, la variable aléatoire X est dite distribuée suivant une loi de mélange de gaussiennes, si sa fonction de densité de probabilité peut s'écrire comme suit :

$$p_X(x) = \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}} G(x; \mu, \sigma^2) p_{\mu, \sigma^2}(\mu, \sigma^2) d\mu d\sigma^2 \quad (2.1)$$

où $\mu \in \mathbb{R}$ et $\sigma^2 > 0$ sont des variables aléatoires ayant comme densité de probabilité jointe $p_{\mu, \sigma^2}(\mu, \sigma^2)$. Les variables μ et σ^2 sont dénommées variables de mélange (ou parfois variables latentes), et leur densité jointe est dite densité de mélange. Ici, et dans le reste du manuscrit, nous considérons que le support des densités de mélange est infini et que μ et σ^2 sont des variables aléatoires à valeurs continues.

*Remarque : Les mélanges de gaussiennes traitées dans cette thèse sont des mélanges **continus** de gaussiennes, contrairement aux modèles GMM (Gaussian Mixture Models) largement utilisés en traitement du signal, où les variables de mélange sont discrètes. Cependant, pour alléger les discussions nous les nommerons mélange de gaussiennes par la suite.*

La densité de probabilité (2.1) suggère que la variable aléatoire X est un modèle hiérarchique avec la représentation stochastique suivante :

$$X = \mu + \sigma Z,$$

où Z est une variable aléatoire distribuée suivant la loi gaussienne centrée réduite, ce qui implique que la loi conditionnelle de X est une gaussienne de moyenne et variance aléatoires μ et σ^2 respectivement :

$$\begin{cases} (\mu, \sigma^2) \sim p_{\mu, \sigma^2}(\mu, \sigma^2), \\ X | \mu, \sigma^2 \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \end{cases} \quad (2.2)$$

Ce type de lois composées a reçu beaucoup d'attention durant les dernières décennies [SI06, EK95, WF15, BNK77], notamment grâce au rôle central que joue la loi gaussienne en modélisation statistique des données et à ses propriétés intéressantes comme la conservation de la loi par transformation affine ou la conservation par additivité qui sont généralement héritées par les lois de mélange de gaussiennes. Par ailleurs, dans le cadre des méthodes d'échantillonnage stochastique, la représentation hiérarchique (2.2) offre une alternative simple pour l'échantillonnage de la variable aléatoire X . De plus, dans le cadre des méthodes d'optimisation, les mélanges de gaussiennes permettent d'introduire des variables latentes afin de construire des algorithmes de descente alternée comme le *Block Coordinate Descent* par d'exemple. Par ailleurs, la densité gaussienne est liée aux fonctions de régularisations quadratiques ce qui la rend importante dans ce contexte en raison de sa maniabilité mathématique.

¹Une loi de probabilité composée est la distribution de probabilité d'une variable aléatoire X distribuée suivant une certaine loi paramétrée $\mathcal{D}(\theta)$ avec un paramètre inconnu θ qui est lui-même une variable aléatoire distribuée suivant une autre loi \mathcal{D}' .

2.1.1 Classes de mélange de gaussiennes

Les lois de mélange de gaussiennes ont été étudiées dans différents domaines et applications, par exemple en traitement du signal [SI06, FG06], en analyse de données [WF15] ou encore en finance [EK95, Pro04]. Dans cette section nous allons explorer les trois classes de mélange de gaussiennes les plus étudiées dans littérature [LM21], à savoir ² :

- mélange à moyenne aléatoire (ou *Location Mixture of Gaussian* LMG),
- mélange à variance aléatoire (ou *Scale Mixture of Gaussian* SMG),
- mélange à moyenne et variance aléatoires (ou *Location and Scale Mixture of Gaussian* LSMG).

Dans la Table 2.1 sont données les représentations stochastiques et les densités de probabilités de ces trois types de lois de mélange de gaussiennes. Notons qu'il est possible, pour chacune des trois définitions, d'introduire un paramètre de décalage $\mu \in \mathbb{R}$, cependant, dans ce chapitre nous considérons que $\mu = 0$ afin d'alléger les notations.

TABLE 2.1 : Définition des types de lois de mélange de gaussiennes où $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$. W est une variable aléatoire de mélange de densité continu $p_W(w)$. W est indépendante de Z .

Type	Représentation stochastique	Domaine de définition	Densité de probabilité
LMG	$X = W + \rho Z$	$W \in \mathbb{R}, \rho \in \mathbb{R}_+^*$	$\int_{\mathbb{R}} G(x; w, \rho^2) p_W(w) dw$
SMG	$X = \sqrt{W} Z$	$W \in \mathbb{R}_+$	$\int_{\mathbb{R}_+} G(x; 0, w) p_W(w) dw$
LSMG	$X = \beta W + \sqrt{W} Z$	$W \in \mathbb{R}_+, \beta \in \mathbb{R}$	$\int_{\mathbb{R}_+} G(x; \beta w, w) p_W(w) dw$

Location Mixture of Gaussian (LMG). Les lois de probabilités LMG ont reçu beaucoup d'attention en particulier grâce à leurs capacité à représenter les lois asymétriques. À titre d'exemple la loi de probabilité *gaussienne exponentiellement modifiée (Exponentially modified Gaussian)* (EMG) [SRS09, KKM⁺11] est un cas spécial de la classe LMG où la variable de mélange est distribuée suivant une loi exponentielle standard $W \sim \mathcal{E}(1)$.

Un autre cas particulier de la classe LMG est la loi *gaussienne asymétrique (Skew Normal)* (SN) introduite dans [Azz85] définie par la densité de probabilité suivante :

$$p_{\text{SN}}(x) = 2G(x; 0, 1)\Phi(\lambda x), \text{ avec } \lambda \in \mathbb{R}, \tag{2.3}$$

où $\Phi(\lambda x)$ est la fonction de répartition de la loi gaussienne standard. L'idée derrière cette approche est de dé-symétriser la densité gaussienne en la multipliant par une fonction qui a la forme d'une sigmoïde (ici la fonction de répartition) où le paramètre λ permet de contrôler la courbure de la sigmoïde et donc l'asymétrie de la densité $p_{\text{SN}}(x)$. Dans [Hen86] il a été

²On parle parfois de *Mean Mixture of Normal* (MMN) pour désigner les LMG, *Variance Mixture of Normal* (VMN) pour désigner les SMG et de *Mean Variance Mixture of Normal* (MVMN) pour désigner les LSMG. Toutefois, dans la suite du manuscrit nous utiliserons plutôt les acronymes LMG, SMG et LSMG.

démontré qu'une variable aléatoire X dont la densité de probabilité est donnée par (2.3) admet la représentation stochastique suivante :

$$X = \frac{\lambda}{\sqrt{1 + \lambda^2}}U + \frac{1}{\sqrt{1 + \lambda^2}}Z,$$

où la variable aléatoire U est distribuée suivant une loi gaussienne standard tronquée $U \sim \mathcal{N}^+(0, 1)$ et $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$. En d'autres termes, la loi *Skew Normal* est une loi LMG où la variable de mélange est distribuée suivant une loi gaussienne tronquée *i.e.*, $W \sim \mathcal{N}^+(0, (\lambda^2/(1 + \lambda^2)))$ avec ρ fixé à $(1 + \lambda^2)^{-\frac{1}{2}}$.

Toute densité de probabilité LMG est une fonction continue et différentiable sur tout l'intervalle \mathbb{R} . Plus précisément, étant donné que la densité de probabilité LMG est une convolution de la densité de mélange $p_W(w)$ avec un noyau Gaussien, la densité de probabilité résultante est déjà infiniment différentiable. Dans [CI04] un théorème stipulant les conditions nécessaires et suffisantes pour qu'une loi de probabilité donnée soit de type LMG a été démontré :

Théorème 1. [CI04] *Une variable aléatoire X est une LMG si et seulement si $\exists \rho > 0$ tel que $C_X(\zeta) \exp(\rho^2 \zeta^2 / 2)$ est une fonction définie positive, où $C_X(\zeta)$ est la fonction caractéristique de X .*

Ce théorème suggère que, si X est une variable aléatoire LMG à densité, la fonction caractéristique $C_X(\zeta)$ doit tendre vers zéro plus rapidement que $\exp(-\rho^2 \zeta^2 / 2)$. Les densités de probabilité ayant cette propriété sont parfois désignées comme *supersmooth* d'ordre 2 [Fan91]. Cette propriété des LMG est intéressante notamment dans le cadre des méthodes d'optimisation convexe différentiable. Toutefois, pour des applications nécessitant la prise en compte de densités de probabilité avec de fortes variations d'autres classes de lois de mélange de gaussiennes sont généralement préférées.

Scale Mixture of Gaussian (SMG). La classe SMG³ est certainement la classe de mélange de gaussiennes la plus répandue dans la littérature, principalement parce qu'elle englobe de nombreuses lois de probabilité usuelles telles que celles citées dans la Table 2.2. Il est important de souligner que toute loi de probabilité SMG est une loi de probabilité centrée et symétrique par rapport à l'origine, puisqu'elle résulte d'un mélange de gaussiennes centrées (symétriques par rapport à l'origine).

TABLE 2.2 : Exemples de distributions SMG avec la distribution de la variable de mélange correspondante

Distribution de X	Distribution de W
Laplace $X \sim \mathcal{L}(\sigma)$	exponentielle $W \sim \mathcal{E}(\frac{1}{2\sigma^2})$
<i>Student</i> $X \sim \mathcal{T}(\nu)$	Inverse-Gamma $W \sim \text{IG}(\frac{\nu}{2}, \frac{\nu}{2})$
Cauchy $X \sim \mathcal{C}(\sigma)$	Inverse-Gamma $W \sim \text{IG}(\frac{1}{2}, \frac{\sigma^2}{2})$

Un aspect intéressant de la classe SMG est qu'elle permet de représenter des lois de probabilités *sur-gaussiennes*, *i.e.*, des lois de probabilité avec une masse importante autour de l'origine

³Notons que dans certains papiers de la littérature la classe SMG est parfois dénommée *Normal/Independent* [LS93, DLR77]

et une décroissance asymptotique moins rapide que celle de la gaussienne (loi à longues queues ou *heavy-tailed*). Des exemples typiques de loi sur-gaussiennes sont la loi de Laplace et la loi de Cauchy. Ces propriétés sont un aspect important des SMG, car les distributions à longues queues sont généralement moins sensibles aux valeurs aberrantes que la gaussienne. Par ailleurs, les lois sur-gaussiennes sont souvent associées à la parcimonie étant donné que les valeurs proches de l'origine sont plus probables tout en autorisant d'avoir de grandes valeurs.

Dans [AM74] un théorème stipulant les conditions nécessaires et suffisantes pour qu'une loi de probabilité donnée soit de la classe SMG a été démontré :

Théorème 2. [AM74] Une variable aléatoire X avec une densité de probabilité symétrique $p_X(x)$ est une SMG si et seulement si $p_X(\sqrt{x})$ est complètement monotone sur l'intervalle $[0, \infty[$.

Définition 1. Une fonction $f(x)$ continue et infiniment différentiable sur $[0, \infty[$ est complètement monotone si et seulement si :

$$(-1)^n \frac{d}{dx^n} f(x) \geq 0, \forall x \geq 0, n \in \mathbb{N}.$$

De plus, si $p_X(\sqrt{x})$ est complètement monotone, alors $\phi(x) = -\ln p_X(\sqrt{x})$ est une fonction concave sur l'intervalle $[0, \infty[$ (voir par exemple [CI04, Lemme 3]). En d'autres termes, $p_X(\sqrt{x})$ est une fonction log-convexe et décroissante sur $[0, \infty[$. Ce résultat implique que si $p_X(x)$ est une SMG alors elle est également *fortement sur-gaussiennes* (*Strongly Super-Gaussians*) (SSG) et admet donc la représentation variationnelle⁴ suivante [PKDRW06] :

$$p_X(x) = \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} G(x; 0, \xi^{-1}) \psi(\xi) \tag{2.4}$$

avec

$$\psi(\xi) = \sqrt{2\pi\xi^{-1}} \exp(\phi^*(\xi/2)),$$

où $\phi^*(\cdot)$ est la conjuguée concave de $\phi(\cdot)$ ⁵.

Cette représentation variationnelle permet d'établir un lien, dans le cadre Bayésien avec un *a priori* SMG, entre les approches estimateur du Maximum *a posteriori*, l'algorithme *Expectation-Maximization*, la méthode *Variational Bayes* [PKDRW06] ainsi que les approches semi-quadratiques que nous verrons dans la section 2.1.2.

Remarque 1. Notons que si $p_X(\sqrt{x})$ est une fonction log-convexe et décroissante sur $[0, \infty[$ alors $p_X(\sqrt{x})$ n'est pas nécessairement complètement monotone et donc $p_X(x)$ n'est pas nécessairement une SMG. En d'autres termes, il existe des densités de probabilités qui admettent la représentation (2.4) mais qui ne sont pas SMG.

Prenons l'exemple de la densité de probabilité $p_H(x)$ associé à la fonction de *Huber* définie par

$$p_H(x) \propto \exp(-f_H(x)), \text{ avec } f_H(x) = \begin{cases} x^2 & \text{si } |x| < s \\ 2s|x| - s^2 & \text{sinon} \end{cases}$$

où $s \in \mathbb{R}_+^*$. Clairement, $p_H(\sqrt{x})$ est une fonction log-convexe et décroissante sur $[0, \infty[$. Toutefois $p_H(\sqrt{x})$ n'est pas complètement monotone, donc $p_H(x)$ n'est pas une SMG.

Remarque 2. La différentiabilité infinie de $p_X(\sqrt{x})$ sur l'intervalle $[0, \infty[$, n'implique par forcément la différentiabilité de la densité p_X à l'origine. Un exemple de loi SMG dont la densité de probabilité est non différentiable à l'origine est la loi de Laplace.

⁴On parle de «représentation variationnelle» car la densité non gaussienne est représentée de manière «variationnelle» en termes de gaussiennes [PKDWR05].

⁵La conjuguée concave d'une fonction $f(x)$ est donnée par $f^*(t) = \inf_x tx - f(x)$.

À ce propos, nous avons déterminé les conditions nécessaires et suffisantes sur la densité de mélange p_W pour qu'une loi SMG soit différentiable à l'origine :

Théorème 3. *Une densité SMG p_X est différentiable à l'origine si et seulement si sa densité de mélange p_W satisfait*

$$\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} p_W(w) dw < \infty. \quad (2.5)$$

Démonstration. Voir Annexe A.1

Ainsi, contrairement au cas LMG, une densité de probabilité d'une loi SMG n'est pas nécessairement une fonction lisse et différentiable à l'origine. D'un point de vue modélisation, cette propriété est intéressante car elle permet de modéliser des densités de probabilité avec de fortes variations.

Notons que la condition sur p_W (2.5) est satisfaite uniquement si $\lim_{w \rightarrow 0^+} p_W(w) = 0$, ainsi nous avons le corollaire suivant,

Corollaire 1. *Si la densité de mélange p_W d'une densité SMG p_X est non nulle à l'origine i.e., $\lim_{w \rightarrow 0^+} p_W(w) > 0$, alors p_X est non différentiable à l'origine.*

Démonstration. Voir Annexe A.2

Location and Scale Mixture of Gaussian (LSMG). La classe LSMG combine les classes LMG et SMG en une seule classe, permettant ainsi de modéliser des lois de probabilité à longues queues, avec de fortes variations et asymétriques. Il est important de souligner que les lois LSMG ne correspondent pas au modèle le plus général de mélanges de gaussienne (2.1) puisque la moyenne et la variance des gaussiennes sont gouvernées par la même variable aléatoire de mélange W , où le paramètre β permet de gérer le poids associé à la moyenne. Ainsi, les lois LSMG n'englobent pas les lois LMG. Cependant, la classe LSMG peut être interprétée comme une extension de la classe SMG aux cas asymétriques, où β joue le rôle d'un paramètre d'asymétrie. Si $\beta > 0$ (respectivement $\beta < 0$) alors la densité LSMG est positivement (respectivement négativement) asymétrique. Dans le cas $\beta = 0$ la densité LSMG est symétrique et devient simplement une densité SMG.

Les distributions LSMG [BNKS82, Yu17] ont été utilisées dans le cadre d'applications diverses, comme la finance [EK95, Pro04], les statistiques, où encore en analyse de données [KS09, WF15], en particulier parce qu'elles permettent de modéliser l'épaisseur des queues des distributions ainsi que leur asymétrie. La Table 2.3 donne des exemples de lois de probabilité LSMG ainsi que la distribution de la variable de mélange W correspondante.

TABLE 2.3 : Exemples de distributions LSMG avec la distribution de la variable de mélange correspondante, où $\gamma^2 = \alpha^2 - \beta^2$

Distribution de X	Distribution de W
Laplace Asymétrique $X \sim \text{AL}(\alpha, \beta, \mu)$	Exp. $W \sim \mathcal{E}(\frac{\gamma^2}{2})$
Variance-Gamma $X \sim \text{VG}(\lambda, \alpha, \beta, \mu)$	Gamma $W \sim \Gamma(\lambda, \frac{\gamma^2}{2})$
Hyperbolique Généralisée $X \sim \text{GH}(\lambda, \alpha, \beta, \delta, \mu)$	GIG $W \sim \text{GIG}(\lambda, \gamma, \delta)$

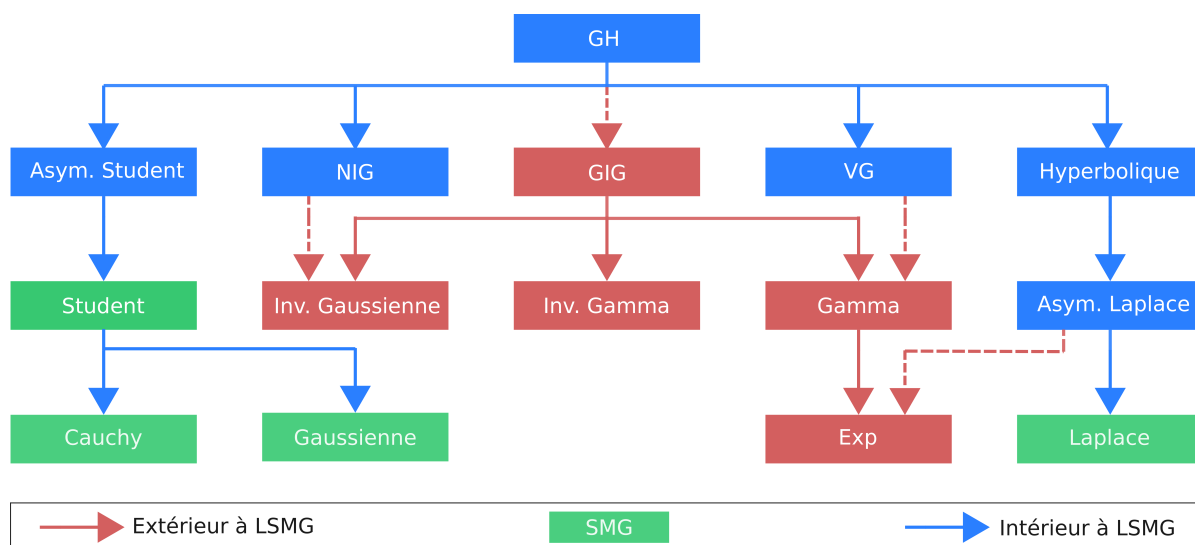


FIGURE 2.1 : Représentation non exhaustive des lois de la famille GH ainsi que certains cas spéciaux et limites. LSMG en bleu, SMG en vert et cas limites hors mélange de gaussiennes en rouge.

La famille des lois Hyperboliques-Généralisées (*Generalized-Hyperbolic*) (GH) [BNK77] est un cas particulier des lois LSMG où la variable de mélange W est distribuée suivant la loi *Inverse gaussienne Généralisée* (*Generalised-Inverse-Gaussian*) (GIG) [Jø82]. Cette famille de lois englobe un nombre conséquent de distributions de probabilité usuelles [EH04] (*e.g.*, Hyperbolique, Variance-Gamma (VG), Normal-Inverse-gaussienne...). Dans la Figure 2.1 est donné un schéma non exhaustif représentant des cas spéciaux et limites de la famille des lois GH. Il est important de souligner qu'un nombre conséquent de lois à support positif, bien qu'elles ne soient pas des lois de mélange de gaussiennes, sont des cas limites des lois GH. A titre d'exemple, la loi Gamma est un cas limite de la loi Variance-Gamma, et la loi exponentielle (qui est un cas particulier de la loi Gamma) est un cas limite de la loi de Laplace asymétrique (AL). Nous reviendrons sur cet aspect des lois GH dans la section 2.3 quand nous aborderons les approximations de lois à support positif par des lois de mélange de gaussiennes.

À notre connaissance, la question de la caractérisation des lois LSMG n'a pas été étudiée jusqu'à présent. Nous proposerons dans la section 2.2.2 une telle caractérisation.

2.1.2 Mélange de gaussiennes et optimisation déterministe

Dans le contexte Bayésien, particulièrement en estimation des paramètres au sens du MAP par des méthodes d'optimisation, les lois de mélange de gaussiennes s'inscrivent dans le cadre des approches d'optimisation dites semi-quadratiques. Ces approches sont largement utilisées en traitement et restauration d'images [GR92, GY95, CBFAB94, DKN03], où les fonctions semi-quadratiques sont utilisées dans le processus de construction de fonctions de régularisations non quadratiques permettant de préserver les détails et contours des images. Pour bien expliciter ce type d'approche, nous allons considérer ici le problème l'optimisation d'un critère $J(\mathbf{x})$ donné par :

$$J(\mathbf{x}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \phi([\mathbf{A}\mathbf{x}]_m)$$

2.1. Introduction

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^K$, $Q : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction quadratique, $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction non quadratique et $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times K}$ un opérateur linéaire (*e.g.*, gradient discret). La notation $[\mathbf{x}]_m$ représente le m -ième élément du vecteur \mathbf{x} .

Le principe de ces approches consiste à reformuler le problème via la construction d'un critère augmenté $K(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ en introduisant des variables latentes \mathbf{u} telles que :

$$\inf_{\mathbf{u}} K(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = J(\mathbf{x}) \implies \inf_{\mathbf{u}, \mathbf{x}} K(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \inf_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}).$$

En d'autres termes, les critères K et J ont le même infimum et la minimisation de K par rapport à (\mathbf{x}, \mathbf{u}) est équivalente à la minimisation de J par rapport à \mathbf{x} . Sous certaines conditions sur la fonction ϕ , deux types de critère augmenté ont été proposés dans [GR92, GY95] :

$$K_{\text{GR}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2} u_m ([\mathbf{A}\mathbf{x}]_m)^2 + \psi_{\text{GR}}(u_m) \right), \text{ avec } u_m \in \mathbb{R}_+ \quad (2.6)$$

$$K_{\text{GY}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2\alpha} ([\mathbf{A}\mathbf{x}]_m - u_m)^2 + \psi_{\text{GY}}(u_m) \right), \text{ avec } u_m \in \mathbb{R}, \alpha \in \mathbb{R}_+ \quad (2.7)$$

Où ψ_{GR} et ψ_{GY} sont des fonctions liées à la convexe conjuguée de ϕ (voir par exemple [Idi01]). Notons que ces deux critères (2.6) et (2.7) sont quadratiques en \mathbf{x} quand les variables latentes \mathbf{u} sont fixées, d'où la dénomination semi-quadratique de ces approches. De plus, la minimisation de ces critères par rapport aux variables latentes \mathbf{u} admet une expression analytique⁶. Ainsi, leur minimisation peut se faire en considérant des algorithmes de descente alternée de type *Block Coordinate Descent* (BCD) comme présentés dans la Table 5.1.

TABLE 2.4 : Minimisation des critères semi-quadratiques K_{GR} et K_{GY} par algorithme de type *Block Coordinate Descent*

	Étape (1)	Étape (2)
GR :	$\mathbf{u}_{\text{GR}}^{(t+1)} = \arg \min_{\mathbf{u}} K_{\text{GR}}(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u}),$	$\mathbf{x}_{\text{GR}}^{(t+1)} = \arg \min_{\mathbf{x}} Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2} u_m^{(t+1)} ([\mathbf{A}\mathbf{x}]_m)^2 \right)$
GY :	$\mathbf{u}_{\text{GY}}^{(t+1)} = \arg \min_{\mathbf{u}} K_{\text{GY}}(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u}),$	$\mathbf{x}_{\text{GY}}^{(t+1)} = \arg \min_{\mathbf{x}} Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2\alpha} ([\mathbf{A}\mathbf{x}]_m - u_m^{(t+1)})^2 \right)$

Dans [Idi01] il a été souligné que les algorithmes *Iteratively Reweighted Least Squares* (IRLS) et *Residual Steepest Descent* (RSD) sont des cas spéciaux des schémas itératifs semi-quadratiques GR et GY respectivement. Par ailleurs, dans le cadre Bayésien où

$$p(\mathbf{x}) \propto \exp \left(- \sum_{m=1}^M \phi([\mathbf{A}\mathbf{x}]_m) \right),$$

définit une fonction de densité de probabilité, l'estimation de \mathbf{x} au sens du MAP avec un algorithme EM adéquat revient à la minimisation de $J(\mathbf{x})$ avec l'approche semi-quadratique. Plus précisément, [CI04] ont montré que si $p(\mathbf{x})$ est une densité LMG (respectivement SMG) alors l'algorithme EM s'identifie avec le schéma GY (respectivement GR). Dans ce cas les variables latentes \mathbf{u} s'identifient avec les variables de mélange, la minimisation par rapport à \mathbf{u} (étape

⁶Notons qu'en exploitant les propriétés de dualité convexe, ces expressions dépendent uniquement de la fonction ϕ , par conséquent, les expressions explicites de ψ_{GR} et ψ_{GY} ne sont pas nécessaires.

(1)) avec l'étape *Expectation* et la minimisation par rapport à \mathbf{x} (étape (2)) avec l'étape *Maximisation*.

Cette minimisation itérative par BCD est généralement plus efficace que la minimisation du critère initial $J(\mathbf{x})$ par des méthodes de gradient [NN05], en particulier parce que les problèmes de minimisation des étapes (1) et (2) admettent une solution analytique et ne nécessitent pas de recherche linéaire pour le réglage du pas de descente.

Finalement, il est important de souligner que ces approches semi-quadratique rentrent dans le cadre des méthodes *Majorize-Minimize* (MM) avec une fonction majorante quadratique. En effet, les critères augmentés GR et GY ci-dessus satisfont l'inégalité suivante

$$K_{\text{GR}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_{\text{GR}}^{(t+1)}) \geq J(\mathbf{x}), \text{ avec } K_{\text{GR}}(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u}_{\text{GR}}^{(t+1)}) = J(\mathbf{x}^{(t)}) \quad (2.8)$$

$$K_{\text{GY}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_{\text{GY}}^{(t+1)}) \geq J(\mathbf{x}), \text{ avec } K_{\text{GY}}(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u}_{\text{GY}}^{(t+1)}) = J(\mathbf{x}^{(t)}) \quad (2.9)$$

où $\mathbf{u}_{\text{GR}}^{(t+1)}$ et $\mathbf{u}_{\text{GY}}^{(t+1)}$ sont données par l'étape de minimisation par rapport à \mathbf{u} pour $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(t)}$ (étape (1) du schéma BCD de la Table 5.1). Dans ce cas l'étape (1) est une étape *Majorize* alors que l'étape (2) est une étape *Minimize*.

2.1.3 Mélange de gaussiennes et échantillonnage stochastique

Dans cette section, nous revenons brièvement sur l'analyse de l'état de l'art abordée au chapitre précédent et montrons que certaines des approches d'échantillonnage stochastique de la littérature font intervenir implicitement des lois de mélange de gaussiennes. Ainsi, nous avons vu dans la section 1.3 des approches d'échantillonnage stochastique qui prennent en compte des lois *a priori* mélange de gaussiennes, comme l'exemple du *Bayesian LASSO* qui prend en compte la décomposition de la loi de Laplace en un mélange de gaussiennes SMG. Toutefois, d'autres méthodes d'échantillonnage stochastique rentrent dans le cadre des mélanges de gaussiennes de façon plus implicite.

Le modèle AXDA [VDC20] par exemple, peut dans certains cas être interprété comme une méthode d'augmentation de données par mélange de gaussiennes LMG. En effet, AXDA construit une approximation asymptotiquement exacte d'une densité de probabilité $\pi(\mathbf{u})$ donnée (densité *a priori* ou *a posteriori*), comme suit :

$$\pi_{\rho}(\mathbf{u}) = \int \mathcal{K}_{\rho}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \pi(\mathbf{v}) \, d\mathbf{v}$$

Nous constatons que si le noyau de lissage est choisi Gaussien, *i.e.*, $\mathcal{K}_{\rho}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \text{G}(\mathbf{u}; \mathbf{v}, \rho)$ (*e.g.*, [VDC19]) alors $\pi_{\rho}(\mathbf{u})$ est une densité LMG avec une densité de mélange $\pi(\mathbf{v})$:

$$\pi_{\rho}(\mathbf{u}) = \int \mathcal{K}_{\rho}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \pi(\mathbf{v}) \, d\mathbf{v} = \int \text{G}(\mathbf{u}; \mathbf{v}, \rho) \pi(\mathbf{v}) \, d\mathbf{v}$$

Dans [VDC19] un tel schéma d'augmentation de données a été utilisé pour construire un algorithme de Gibbs, dénommé *Split Gibbs Sampler* (SP), où la loi *a priori* $\pi(\mathbf{u})$ est remplacée par son approximation $\pi_{\rho}(\mathbf{u})$ puis l'échantillonnage se fait à partir de la loi *a posteriori* jointe augmentée :

$$p_{\rho}(\mathbf{u}, \mathbf{v} | \mathbf{y}) = p(\mathbf{y} | \mathbf{u}) \mathcal{K}_{\rho}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \pi(\mathbf{v}) = p(\mathbf{y} | \mathbf{u}) \text{G}(\mathbf{u}; \mathbf{v}, \rho) \pi(\mathbf{v})$$

où $p(\mathbf{y} | \mathbf{u})$ représente la vraisemblance des observations \mathbf{y} supposée gaussienne. Plus précisément, les variables d'intérêt \mathbf{u} et les variables latentes \mathbf{v} sont alternativement échantillonnées à partir de leurs lois conditionnelles *a posteriori* :

- (a) $\mathbf{v}^{(t+1)} \sim \mathbf{G}(\mathbf{u}^{(t)}; \mathbf{v}, \rho)\pi(\mathbf{v}),$
- (b) $\mathbf{u}^{(t+1)} \sim p(\mathbf{y}|\mathbf{u})\mathbf{G}(\mathbf{u}; \mathbf{v}^{(t+1)}, \rho)$

Remarquons que cet échantillonneur de Gibbs peut être interprété comme l’analogue stochastique du schéma semi-quadratique GY [GY95]. En effet, comme la vraisemblance est gaussienne la loi *a posteriori* conditionnelle de \mathbf{u} l’est également, donc l’étape (b) de SP est clairement l’analogue stochastique de l’étape (2) du schéma GY. Par ailleurs, dans [CI04, Proposition 4], il a été démontré que l’espérance de \mathbf{v} sous sa loi conditionnelle $p(\mathbf{v}|\mathbf{u})$ est identique à l’étape (1) du schéma GY ⁷.

D’autre part, l’algorithme auxMC [MCBBP18] rentre également dans le cadre des lois LMG. Nous avons vu que l’algorithme auxMC utilise un schéma d’augmentation de données exact où la densité de la loi cible $p(\mathbf{u})$ est augmentée via l’introduction d’un vecteur de variables latentes \mathbf{v} tel que :

$$p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = p(\mathbf{u})\mathbf{G}(\mathbf{v}; \mathbf{P}\mathbf{u}, \mathbf{Q}) \implies p(\mathbf{u}) = \int p(\mathbf{u}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}$$

Remarquons que la densité marginale des variables latentes \mathbf{v} est une LMG avec une densité de mélange $p(\mathbf{u})$:

$$p(\mathbf{v}) = \int p(\mathbf{u})\mathbf{G}(\mathbf{v}; \mathbf{P}\mathbf{u}, \mathbf{Q}) d\mathbf{u}.$$

Par ailleurs, la loi conditionnelle *a posteriori* de $\mathbf{v}|\mathbf{u}$ est une gaussienne de moyenne $\mathbf{P}\mathbf{u}$, donc l’échantillonneur de Gibbs de la densité $p(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ peut être interprété comme un échantillonneur de Gibbs utilisant un schéma d’augmentation de données LMG où le vecteur \mathbf{u} joue le rôle des variables de mélange.

2.2 Étude de la classe LSMG

Nous nous intéressons dans cette section aux lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG. En particulier, nous proposons une approche de construction des densités LSMG à partir d’une densité symétrique SMG donnée. Ce résultat nous permet entre autres d’étendre le Théorème 3 pour déterminer les conditions suffisantes pour qu’une densité LSMG soit différentiable à l’origine. Par ailleurs, nous donnons des conditions nécessaires et suffisantes pour qu’une densité de probabilité donnée soit une densité LSMG.

Commençons par rappeler qu’une densité de probabilité LSMG est définie par :

$$p(x) = \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \beta w)^2}{w}\right) p_W(w) dw, \quad (2.10)$$

où $p_W(w)$ est une densité de probabilité telle que $\forall t < 0, p_W(t) = 0$, et $\beta \in \mathbb{R}$.

2.2.1 Construction des lois LSMG

Nous avons vu que les lois LSMG forment une famille de lois de probabilité très flexible et bénéficient de différentes propriétés intéressantes. Toutefois, pour construire une densité LSMG

⁷Les auteurs [VDC19] ont souligné les similarités entre l’échantillonneur SP et les méthodes de *Splitting* en optimisation et en particulier l’approche *Alternating Direction Method of Multipliers* (ADMM) appliquée à l’inverse du logarithme de la loi *a posteriori* initiale $p(\mathbf{u}|\mathbf{y}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{u})\pi(\mathbf{v})$. Toutefois, étant donné que le cadre de l’échantillonnage stochastique ne permet pas d’inclure des contraintes d’égalités qui sont au cœur de l’approche ADMM, l’interprétation au sens du schéma semi-quadratique GY est probablement plus adéquate.

adéquate à partir de (2.10), il est nécessaire de trouver la densité de mélange $p_W(w)$ correspondante, ce qui n'est pas une tâche évidente.

Nous proposons à travers la Proposition 1 une approche permettant de construire une loi LSMG asymétrique par le biais de la « dé-symétrisation » d'une loi SMG (symétrique) dont la densité de mélange est déjà connue.

Proposition 1. *Soit p_S une densité de probabilité symétrique telle que $p_S(\sqrt{x})$ est complètement monotone (i.e., p_S est une SMG) alors pour toute valeur de $\beta \in \mathbb{R}$*

$$p(x) = \frac{1}{K} p_S(x) \exp(\beta x)$$

est une densité LSMG, pourvu que $K = \int_{\mathbb{R}} p_S(x) \exp(\beta x) dx < \infty$.

Démonstration. Voir Annexe A.4

Remarquons que cette approche partage quelques similarités avec la méthode de construction de la loi *Skew Normal* [Azz85] évoquée dans la section 2.1.1. En effet, les deux approches partent d'une densité de probabilité symétrique et modifient cette dernière en la multipliant par une fonction monotone. Cependant, ici, le point de départ est une loi SMG qui est modifiée par une fonction exponentielle ce qui offre plus de flexibilité quant à la modélisation de l'asymétrie ainsi que la décroissance des queues de la densité.

De plus, la réciproque de la Proposition 1 est également valide. En effet, toute densité LSMG est proportionnelle au produit d'une densité SMG avec une fonction exponentielle ce que l'on exprime dans Proposition 2.

Proposition 2. *Si p est une densité de probabilité LSMG alors p admet une représentation unique de la forme :*

$$p(x) = \frac{1}{K} p_S(x) \exp(\beta x) \tag{2.11}$$

où est une densité SMG et $\beta \in \mathbb{R}$.

Démonstration. Voir Annexe A.5

Ce résultat est très important, car il propose une façon systématique permettant de décomposer une densité LSMG en un produit faisant intervenir une fonction monotone et une densité SMG. Ainsi, il est possible d'étendre facilement les résultats de la classe SMG au cas LSMG ce que nous présentons ci-dessous.

Premièrement, la Proposition 2 nous permet d'étudier le comportement des queues des lois LSMG. Plus précisément, cette proposition nous permet de déduire des bornes supérieures sur le comportement asymptotique des densités LSMG quand $x \rightarrow \pm\infty$:

Corollaire 2. *Si $p(x)$ est une densité LSMG négativement asymétrique ($\beta < 0$) (respectivement positivement asymétrique ($\beta > 0$)) alors $p(x)$ décroît plus rapidement que la fonction $\exp(-\beta|x|)$ quand $x \rightarrow \infty$ (respectivement quand $x \rightarrow -\infty$).*

Démonstration. A partir de la Proposition 2 nous savons que si $p(x)$ est une densité LSMG alors (2.11) est vraie, donc

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow -\infty} \frac{p(x)}{\exp(\beta x)} &= 0, \text{ quand } \beta > 0 \\ \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{p(x)}{\exp(\beta x)} &= 0, \text{ quand } \beta < 0 \end{aligned}$$

■

D'autre part, le résultat de la Proposition 2 suggère que les densités LSMG ne sont pas nécessairement différentiable à l'origine, puisqu'elles résultent de la multiplication d'une fonction continue et d'une distribution SMG (qui n'est pas nécessairement différentiable à l'origine, voir Remarque 2). Toutefois, il est possible d'étendre le Théorème 3 au cas des densités LSMG.

Corollaire 3. *Une densité LSMG p est différentiable à l'origine si et seulement si sa densité de mélange p_W satisfait*

$$\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w) dw < \infty$$

Démonstration. Voir Annexe A.6

De plus, le Corollaire 1 peut également être étendu au cas LSMG, les conditions restant identique au cas SMG :

Corollaire 4. *Si la densité de mélange p_W d'une densité LSMG p est non nulle à l'origine i.e., $\lim_{w \rightarrow 0^+} p_W(w) > 0$, alors p est non différentiable à l'origine.*

Démonstration. Voir Annexe A.7

Par ailleurs, sachant que les densités SMG peuvent être représentées sous une forme variationnelle, il est possible de montrer, grâce à la Proposition 2, que les densités LSMG admettent également une représentation variationnelle :

Corollaire 5. *Si p est une densité LSMG de paramètre d'asymétrie $\beta \in \mathbb{R}$ alors elle admet la représentation variationnelle suivante :*

$$p(x) = \frac{1}{K} \sup_{\xi} G(x; \beta\xi^{-1}, \xi^{-1})\psi(\xi)$$

avec

$$K = \int_{\mathbb{R}} \sqrt{p(x)p(-x)} dx$$

$$\psi(\xi) = \sqrt{2\pi\xi^{-1}} \exp\left(\phi^*(\xi/2) + \beta^2\xi^{-1}\right)$$

où ϕ^* est la conjuguée concave de $\phi(x) = -\ln \sqrt{p(x)p(-x)}$.

Démonstration. Voir Annexe A.8

Nous reviendrons plus en détails sur les implications de ce résultat dans le chapitre 5 quand nous aborderons les schémas semi-quadratiques GR asymétriques et leur lien avec les lois LSMG.

2.2.2 Caractérisation des lois LSMG

Nous avons vu dans la section 2.1.1 que la question de la caractérisation des lois de mélange de gaussiennes LMG et SMG à déjà été étudiée dans la littérature (voir Théorèmes 1 et 2 respectivement). Des conditions suffisantes et nécessaires permettent d'identifier si une densité de probabilité donnée est une loi de mélange de gaussiennes de type LMG ou SMG. Toutefois, à notre connaissance, aucune caractérisation équivalente n'existe dans le cas des lois de mélange de gaussiennes de type LSMG. Nous proposons grâce aux résultats précédents, des conditions nécessaires et suffisantes pour qu'une loi de probabilité soit une LSMG :

Théorème 4. Une variable aléatoire X de densité de probabilité p définie sur \mathbb{R} et à valeur dans \mathbb{R}_+^* est une LSMG si et seulement si :

$$\sqrt{p(\sqrt{x})p(-\sqrt{x})} \text{ est complètement monotone,}$$

$$\text{et } \phi(x) = \ln \left(\sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}} \right) \text{ est une fonction linéaire.}$$

Démonstration. Voir Annexe A.9

Remarquons que ce résultat peut être interprété comme une généralisation du Théorème 2 donnée dans [AM74] pour le cas SMG. En effet, si la densité p est symétrique, alors $\phi(x) = 0$ est une fonction linéaire par défaut et la condition sur $\sqrt{p(\sqrt{x})p(-\sqrt{x})}$ devient simplement une condition sur $p(\sqrt{x})$. En d'autres termes, sachant que les lois SMG sont un cas particulier des lois LSMG, le Théorème 2 est un cas particulier du Théorème 4.

2.3 Approximations asymptotiquement exactes

Nous avons vu que les lois de mélange de gaussiennes couvrent un large éventail de distributions de probabilité usuelles, allant des lois asymétriques simples comme la loi *Skew Normal* (SN) aux lois asymétriques et à longues queues plus élaborées comme la famille Hyperbolique-Généralisée (GH).

Cependant, sachant que la gaussienne est non nulle sur \mathbb{R} , le support des densités de mélange de gaussiennes est nécessairement \mathbb{R} également. De ce fait, toute distribution définie sur un intervalle semi-fermé (*e.g.*, famille des lois GIG) ou fermé (*e.g.*, la loi uniforme) n'admet pas de représentation en mélange de gaussiennes. Dans ce cas, les lois de mélange de gaussiennes ne peuvent être considérées que comme des approximations de la loi cible.

Ce constat soulève naturellement les questions suivantes : quelle est la meilleure approximation en mélange de gaussiennes d'une loi donnée, et comment la construire ? Évidemment, la première question dépend de l'application, du cahier des charges et des critères établis pour différencier les approximations, tandis que la deuxième dépend de la classe de la loi de mélange de gaussiennes considérée. Dans le cas des LMG, nous avons vu que cette question a déjà été abordée dans le cadre du modèle AXDA [VDC20]. Toutefois, nous avons vu aussi que les lois LMG sont des lois lisses et ne permettent pas à modéliser les fortes variations. Par ailleurs, le cas des lois SMG est assez restrictif car seules les lois symétriques peuvent être considérées.

Nous proposons ici d'étudier les approximations en mélange de gaussiennes de la classe LSMG. Plus précisément, dans le même esprit que AXDA, nous proposons une approche systématique pour construire une approximation LSMG asymptotiquement exacte d'une loi de probabilité définie sur un intervalle semi-fermé ou fermé.

2.3.1 ELSA : approximation LSMG asymptotiquement exacte

Soit une distribution de probabilité $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ où $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{D}^M$ est un vecteur de paramètres et soit $p_{\mathcal{D}}$ sa densité de probabilité définie sur l'intervalle $\mathbb{E} = [\mu, \infty[$ avec $\mu \in \mathbb{R}$. Nous supposons également que la distribution $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ est une distribution stable (fermée) par transformation linéaire : si $Y \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ alors

$$Y' = aY \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}'), \text{ et } a > 0 \text{ avec } \boldsymbol{\theta}' = T_a(\boldsymbol{\theta}) \text{ et } Y' \in \mathbb{E}_{(a)} = a \times \mathbb{E} = [a\mu, \infty[$$

où T_a est une application linéaire de \mathbb{D}^M vers \mathbb{D}^M . Notons que ces suppositions ne sont pas trop restrictives. En effet, la plupart des densités de probabilités usuelles respectent ces conditions (*e.g.*, famille des lois GIG, la loi uniforme, la gaussienne tronquée...).

2.3. Approximations asymptotiquement exactes

Comme expliqué précédemment, ces distributions $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ n'admettent pas de représentation exacte en mélange de gaussiennes. Toutefois, nous montrons ici qu'il est possible de construire une approximation en mélange de gaussiennes LSMG asymptotiquement exacte de ces distributions $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$. Ces approximations, qui seront dénommées par l'acronyme ELSA pour *asymptotically Exact Location-Scale Approximations*, sont définies ci-dessous.

Définition 2. Une approximation ELSA de la distribution $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ est définie par la densité de probabilité suivante :

$$p_{\text{LS}}(x) = \int_{\mathbb{R}_+} G(x; \beta w + \mu, w) \beta p_{\mathcal{D}}(\beta w + \mu) dw \quad (2.12)$$

où $\boldsymbol{\nu} = [\mu, \beta, \boldsymbol{\theta}]^T$ est le vecteur de paramètres de cette densité avec $\beta > 0$.

Nous notons $\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$ la distribution de probabilité associée à cette densité. Nous avons vu dans la section 2.1.1 que le paramètre β des lois LSMG permet de régler l'asymétrie de la distribution. Dans le cadre des approximations ELSA, β joue un rôle additionnel qui est le réglage de la qualité de l'approximation. Plus précisément, plus β est grand, plus l'approximation ELSA se rapproche de la densité cible $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ et plus précisément nous avons le théorème suivant.

Théorème 5. Soit les variables aléatoires $X^* \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ et $X \sim \mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$ alors X converge en probabilité vers X^* quand $\beta \rightarrow \infty$ i.e.,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} P(|X^* - X| > \epsilon) = 0, \forall \epsilon > 0$$

Démonstration. Voir Annexe A.10

Évidemment, ce théorème implique que l'approximation ELSA $\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$ de la distribution $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ converge en loi vers la distribution $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ quand $\beta \rightarrow \infty$, i.e.,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \text{TV}[\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}), \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})] = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}} |p_{\text{LS}}(t) - p_{\mathcal{D}}(t)| dt = 0.$$

Par ailleurs, en exploitant le fait que les approximations ELSA sont des lois de mélange de gaussiennes LSMG, nous mettons en avant certaines de leurs propriétés.

Proposition 3. Soit les variables aléatoires $X^* \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ et $X \sim \mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$ (i.e., $\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$ est l'approximation ELSA de $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$) alors nous avons les propriétés suivantes :

(i) Représentation stochastique LSMG :

$$X = \mu + \beta W + \sqrt{W} Z,$$

avec $W = \frac{X^* - \mu}{\beta}$ indépendant de $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$.

(ii) Moments et coefficient de corrélation normalisé :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X] &= \mathbb{E}[X^*] \\ \text{var}(X) &= \text{var}(X^*) + \frac{\mathbb{E}[X^*] - \mu}{\beta} \\ \text{Corr}(X, W) &= \left(\frac{\text{var}(X^*)}{\text{var}(X)} \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

(iii) *Stabilité par transformation linéaire :*

$$X_s = sX \sim \mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}'), \quad s > 0 \text{ avec } \boldsymbol{\nu}' = H_s(\boldsymbol{\nu})$$

où H_s est une application linéaire de \mathbb{D}^{M+2} vers \mathbb{D}^{M+2} telle que :

$$\boldsymbol{\nu}' = \begin{bmatrix} \mu' \\ \beta' \\ \boldsymbol{\theta}' \end{bmatrix} = H_s(\boldsymbol{\nu}) = H_s \left(\begin{bmatrix} \mu \\ \beta \\ \boldsymbol{\theta} \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} s\mu \\ s^{-1}\beta \\ T_{s^2}(\boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix}$$

(iv) *Invariance de la variation totale par transformation linéaire :*

$$\text{TV}[\mathcal{D}_{\text{LS}}(H_s(\boldsymbol{\nu})), \mathcal{D}(T_s(\boldsymbol{\theta}))] = \text{TV}[\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}), \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})]$$

(v) *La probabilité $P(X_s \leq s\mu)$ est indépendante de $s > 0$:*

$$P(X_s \leq s\mu) = P(X \leq \mu)$$

Démonstration. Voir Annexe A.11

Ces propriétés sont d'un grand intérêt, en particulier dans le cadre de l'inférence Bayésienne. En effet,

- Le point (i) est une conséquence de la définition de ELSA qui est une loi LSMG, donc l'échantillonnage d'une variable aléatoire distribuée suivant ELSA peut se faire à travers le schéma hiérarchique des LSMG. Notons qu'ici nous avons un paramètre de décalage additionnel μ comparée à la représentation stochastique donnée dans la Table 2.1 p. 33.
- Le point (ii) de cette proposition implique que si l'approximation ELSA est utilisée pour remplacer une loi *a priori* alors l'approximation correspond simplement à un *a priori* moins informatif dans le sens où ELSA correspond à une distribution plus diffuse autour de la même espérance que la loi initiale. Toutefois, le coefficient de corrélation $\text{Corr}(X, W)$ est une fonction croissante de β . Ceci implique que dans un cadre d'échantillonnage stochastique, l'efficacité d'un schéma d'augmentation de données utilisant ELSA décroît en augmentant la valeur de β . En pratique, β doit être fixé afin de régler le compromis entre la qualité de l'approximation ELSA et l'efficacité de l'échantillonnage. Nous reviendrons plus en détails sur ce point dans la section 2.3.3 et le chapitre 4 quand nous aborderons les approximations ELSA dans le cadre du modèle *a priori* BMG.
- Le point (iii) suggère qu'en pratique, il est possible de construire l'approximation ELSA une fois pour toute pour un paramètre d'échelle donnée, à partir de la loi cible normalisée par exemple, puis de la mettre à l'échelle suivant l'application H_s .
- Le point (iv) nous assure que la qualité de l'approximation est invariante par transformation linéaire. Ce résultat est important, en particulier dans le cadre non-supervisé où le paramètre d'échelle est inconnu et est autorisé à varier.
- De même le point (v) assure que la probabilité d'avoir X_s inférieur à $s\mu$ est également invariante par rapport à l'échelle s , cette propriété s'avère pratique dans le cadre d'applications nécessitant la prise en compte d'une contrainte additionnelle. Par exemple, dans le cas d'une loi à support positif $\mathbb{E} = [0, \infty[$ cette propriété nous assure que la probabilité d'avoir X_s négatif est invariante par rapport à l'échelle s .

Remarque 3. Les approximations ELSA s'appliquent uniquement sur des distributions dont le domaine de définition est au moins semi-fermé, et ne peut être utilisée pour approximer des distributions définie sur \mathbb{R} . Par ailleurs, notons que si la distribution cible est à support fermé $[\mu_m, \mu_M]$, il est possible de construire une approximation ELSA de cette dernière en considérant que son domaine de définition est $[\mu_m, \infty[$ et que sa densité de probabilité est nulle sur $]\mu_M, \infty[$, ainsi tous les résultats démontrés ci-dessous restent valides.

2.3.2 Exemple d'approximation ELSA pour la loi gaussienne tronquée

Nous présentons ici un exemple d'approximation ELSA pour une distribution à support positif, celui de la loi gaussienne tronquée $\mathcal{N}^+(0, \sigma^2)$ sur l'intervalle $\mathbb{E} = [0, \infty[$ dont la densité de probabilité est la suivante⁸ :

$$p(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \mathbb{1}_{x \geq 0}.$$

Rappelons que la loi gaussienne tronquée est stable par transformation linéaire : en effet, si $X \sim \mathcal{N}^+(0, \sigma^2)$ alors $Y = aX \sim \mathcal{N}^+(0, a^2\sigma^2)$. En d'autres termes, l'application linéaire $T_a : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ associée à cette transformation s'écrit $T_a(\sigma^2) = a^2\sigma^2$.

En suivant la construction proposée ci-dessus nous obtenons l'approximation ELSA de la gaussienne tronquée standard, que nous notons $\mathcal{N}_{LS}^+(0, 1, \beta)$ et qui est définie par la densité de probabilité suivante :

$$\begin{aligned} p_{LS}(x) &= \int_{\mathbb{R}_+} G(x; \beta w, w) \frac{2}{\sqrt{2\pi\beta^{-2}}} \exp\left(-\frac{w^2}{2\beta^{-2}}\right) dw \\ &= \frac{\sqrt{\beta}}{\pi} \exp(\beta x) M_\beta(x) \end{aligned} \quad (2.13)$$

où la fonction $M_\beta(x)$ est définie par l'intégrale suivante :

$$M_\beta(x) = \int_{\mathbb{R}_+} t^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta x \left(\frac{x}{t} + \frac{t}{x}\right)\right) \exp\left(-\frac{1}{2}t^2\right) dt$$

La distribution définie par la densité (2.13) sera dénommée par *Normal Truncated Gaussian* (NTG)⁹ dans la suite de ce manuscrit. Bien que la densité $p_{LS}(x)$ de la distribution NTG fasse intervenir la fonction M_β qui ne peut être évaluée analytiquement¹⁰, il est possible, grâce aux résultats de la section précédente, de déduire certaines propriétés de la distribution \mathcal{N}_{LS}^+ . D'abord, à partir de la Proposition 3 nous obtenons :

- (i) Stabilité par transformation linéaire : si $X \sim \mathcal{N}_{LS}^+(0, 1, \beta)$ alors $Y = \sigma X \sim \mathcal{N}_{LS}^+(0, \sigma^2, \beta/\sigma)$, dont la densité est donnée par :

$$\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\beta}{s}} \exp\left(\frac{\beta}{s} x\right) M_\beta(s^{-1}x)$$

⁸L'espérance et la variance de cette loi gaussienne tronquée sont données par : $E[X] = \sigma\sqrt{\frac{2}{\pi}}$ et $\text{var}(X) = \sigma^2(1 - \frac{2}{\pi})$

⁹Cette loi NTG peut être vue comme l'analogie LSMG de la loi *Skew Normal* [Azz85].

¹⁰Notons que la définition de la fonction $M_\beta(\cdot)$ est assez similaire à la fonction de Bessel modifiée du second genre, une perspective intéressante serait d'étudier cette fonction dans le but de trouver des approches rapides et précises pour son évaluation.

(ii) Espérance et variance : si $X \sim \mathcal{N}_{LS}^+(0, \sigma^2, \beta/\sigma)$ alors

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X] &= \sigma \sqrt{\frac{2}{\pi}} \\ \text{var}(X) &= \sigma^2 \left(1 - \frac{2}{\pi}\right) + \frac{\sigma^2}{\beta} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \end{aligned}$$

Par ailleurs, comme la densité gaussienne tronquée est non nulle à l'origine Corollaire 4 nous dit que la densité $p_{LS}(x)$ est non différentiable à l'origine.

La Figure 2.2 donne la densité de probabilité associée à l'approximation ELSA de la gaussienne tronquée pour deux valeurs du paramètre $\beta \in \{1, 5\}$. Cette approximation est comparée à une approximation AXDA avec un noyau Gaussien¹¹ ainsi qu'avec l'approximation de Moreau¹² (voir (1.18) ou [Per16, Définition 2.2]) où les paramètres de ces dernières ont été fixés pour atteindre la même variation totale que pour l'approximation ELSA.

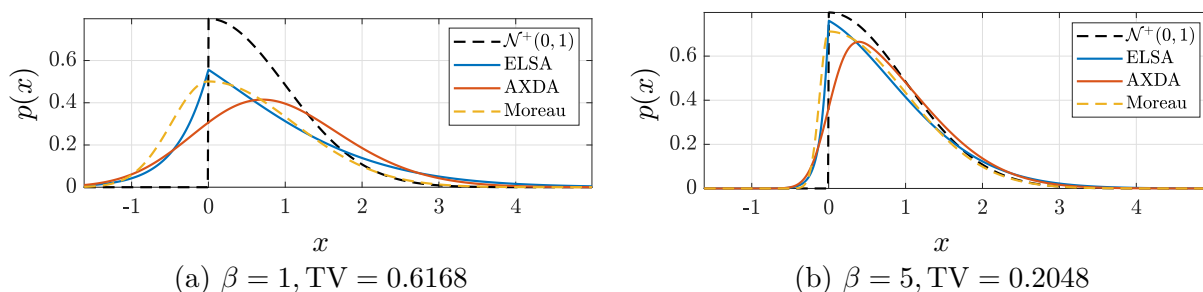


FIGURE 2.2 : Densité de probabilité de l'approximation ELSA d'une loi exponentielle de paramètre d'échelle unitaire (en bleu) comparée à une approximation AXDA (en rouge) et l'approximation de Moreau (en jaune). Les paramètres des approximations ont été fixés de sorte que les variations totales soient identiques.

On peut remarquer, grâce au caractère non différentiable de l'approximation ELSA, que celle-ci est plus adaptée à l'approximation des densités à support réduit comme la gaussienne tronquée que l'approximation AXDA. En effet, nous constatons que la densité de l'approximation ELSA, comme l'approximation de Moreau, a deux comportements différents à droite et à gauche de l'origine. Il est encore plus important de souligner que contrairement à AXDA, l'approximation ELSA ainsi que l'approximation de Moreau préservent le mode de la densité de la gaussienne tronquée qui est situé à l'origine. Cette caractéristique est particulièrement souhaitable dans le cadre d'applications parcimonieuses, pour favoriser les valeurs faibles, voire nulles. Par ailleurs, contrairement à l'approximation de Moreau les approximations ELSA et AXDA préservent l'espérance de la distribution initiale.

2.3.3 Exemple d'approximation ELSA pour la loi exponentielle et cas limites de la famille GH

Dans le but de montrer la richesse qu'offre la classe LSMG, nous allons présenter dans cette section deux approches pour la constricton d'approximation de la loi exponentielle par des lois de mélange de gaussiennes LSMG. La première s'appuie sur la définition de l'approximation

¹¹Notons que cette approximation peut également être interprété comme une approximation LMG ou comme la densité de probabilité *Skew Normal*.

¹²Rappelons que les approximations de Moreau sont au cœur des méthodes MCMC proximal comme P-MALA et MYULA.

ELSA donnée par la Définition 2 et la seconde exploite les connaissances sur les cas limite de la famille de lois GH.

Approximation ELSA de la loi exponentielle. Nous présentons ici l'approximation ELSA de la loi exponentielle $\mathcal{E}(s^{-1})$ de paramètre d'échelle s dont la densité est donnée par :

$$p(x) = \frac{1}{s} \exp\left(-\frac{x}{s}\right) \mathbb{1}_{x \geq 0}.$$

On rappelle que la loi exponentielle est stable par transformation linéaire : si $X \sim \mathcal{E}(s^{-1})$ alors $Y = aX \sim \mathcal{E}((as)^{-1})$. En d'autres termes, l'application linéaire $T_a : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ associée à cette transformation s'écrit $T_a(s) = as$.

En suivant la construction des approximations ELSA présentée précédemment nous obtenons l'approximation de la loi exponentielle standard *i.e.*, $\mathcal{E}(1)$ définie par la densité suivante :

$$p_{LS}(x) = \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{\beta+2}} \exp\left(-\sqrt{\beta^2+2\beta}|x| + \beta x\right)$$

qui correspond à la loi de Laplace asymétrique $\text{AL}(\sqrt{\beta^2+2\beta}, \beta, 0)$ [KKP12]. À partir de la Proposition 3 on peut déduire que si $X \sim \text{AL}(\sqrt{\beta^2+2\beta}, \beta, 0)$ alors $Y = sX$ est distribuée suivant la loi $\text{AL}(s^{-1}\sqrt{\beta^2+2\beta}, s^{-1}\beta, 0)$ de moyenne et variance :

$$\begin{aligned} \text{E}[X] &= s \\ \text{var}(X) &= s^2 + \frac{1}{\beta} s^2 \end{aligned}$$

Notons que l'espérance de l'approximation ELSA est la même que celle de la loi exponentielle cible.

Approximation de la loi exponentielle comme cas limite de la loi GH. Nous venons de voir que l'approximation ELSA de la loi exponentielle est une loi de Laplace asymétrique qui est une loi LSMG de la famille GH. Ici nous allons voir un autre cas particulier de la loi Laplace asymétrique qui permet de construire une approximation LSMG asymptotiquement exacte de loi exponentielle. En effet, nous avons vu dans la section 2.1.1 que certaines lois à support positif étaient des cas limites des lois de la famille GH (voir Figure 2.1 p. 37). Plus précisément, toute loi de la famille GIG est un cas limite d'une certaine loi de la famille GH (car la loi GIG est un cas limite de la loi GH).

Rappelons que la loi $\text{AL}(\alpha, \beta, \mu)$ est un mélange de gaussiennes LSMG de la famille GH où la variable de mélange est distribuée suivant une loi exponentielle $\mathcal{E}((\alpha^2 - \beta^2)/2)$ (voir Table 2.3 p. 36).

Considérons la distribution AL avec la paramétrisation suivante $\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)$ ¹³ où $\beta > 0$ est un paramètre d'asymétrie qui va nous permettre de contrôler la qualité de l'approximation et $s > 0$ est un paramètre d'échelle. La densité de probabilité de cette distribution s'écrit :

$$p(x) = \frac{2\beta+1}{2(\beta+1)s} \exp\left(-\frac{\beta+1}{s}|x| + \frac{\beta}{s}x\right) \quad (2.14)$$

Nous montrons que la distribution $\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)$, qui sera dénommée par la suite AMEX pour *Asymmetric Laplace Majorized by Exponential*, est une approximation asymptotiquement exacte de la distribution exponentielle $\mathcal{E}(s^{-1})$.

¹³On aurait pu choisir une autre paramétrisation, par exemple la paramétrisation $\text{AL}(\sqrt{\beta^2+2\beta}, \beta, 0)$ qui nous ramène vers l'approximation ELSA vu précédemment. L'intérêt de la paramétrisation que nous avons choisie ici va apparaître par la suite.

Proposition 4. *La distribution $\text{AL}((\beta + 1)/s, \beta/s, 0)$ converge en loi vers la distribution $\mathcal{E}(1)$ i.e.,*

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \text{TV} \left[\text{AL}((\beta + 1)/s, \beta/s, 0), \mathcal{E}(s^{-1}) \right] = 0$$

et

$$\begin{aligned} \text{TV} \left[\text{AL}((\beta + 1)/s, \beta/s, 0), \mathcal{E}(s^{-1}) \right] &= \frac{1}{\beta + 1} \\ P(X \leq 0) &= \frac{1}{2(\beta + 1)} \end{aligned}$$

Démonstration. Voir Annexe A.12

Il est important de souligner, que l'approximation AMEX de la loi exponentielle ne rentre pas dans le cadre de l'approximation ELSA donnée par la Définition 2. En effet, il est immédiat de montrer que si $X \sim \text{AL}((\beta + 1)/s, \beta/s, 0)$ alors,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X] &= \frac{2\beta}{2\beta + 1} s \\ \text{var}(X) &= s^2 \left(1 + \frac{1}{(2\beta + 1)^2} \right) \\ \text{Corr}(X, W) &= \left(1 + \frac{2\beta + 1}{2\beta^2} \right)^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

où contrairement à la Proposition 3 des approximations ELSA, l'espérance de l'approximation AMEX n'est pas égale à l'espérance de loi exponentielle cible, sauf dans le cas limite $\beta \rightarrow \infty$. En revanche le coefficient de corrélation normalisé $\text{Corr}(X, W)$ a le même comportement asymptotique, c'est-à-dire $\text{Corr}(X, W) = 1$ quand $\beta \rightarrow \infty$, avec les mêmes implications algorithmiques discutées précédemment.

L'approximation AMEX possède cependant une propriété intéressante. Plus précisément, on peut montrer que la densité de $\text{AL}((\beta + 1)/s, \beta/s, 0)$ est majorée par celle de la loi exponentielle $\mathcal{E}(s^{-1})$. En effet, à partir de (2.14) il est immédiat de montrer que :

$$d_{\mathcal{E}(1)}(t) = C_{\beta} d_{\text{AL}((\beta+1),\beta,0)}(t), \quad \forall t \in \mathbb{R}_+ \text{ avec } C_{\beta} = \frac{2(\beta + 1)}{2\beta + 1} \quad (2.15)$$

où la notation $d_{\mathcal{A}}(t)$ désigne la densité de probabilité de la distribution \mathcal{A} évalué à t , et $C_{\beta} \in [1, 2]$, $\forall \beta \in \mathbb{R}_+$. Cette propriété est très intéressante dans le cadre de l'inférence Bayésienne avec un *a priori* Exponentiel car elle suggère l'utilisation de la méthode *Rejection Sampling* [Dev86] avec l'approximation AMEX comme loi de proposition. En d'autres termes, si l'*a priori* Exponentiel est remplacé par l'approximation AMEX et que tous les échantillons négatifs sont rejetés durant le processus d'échantillonnage alors les échantillons restant sont distribués suivant la loi *a posteriori* initiale, de plus le taux d'acceptation est connu *a priori* et vaut C_{β}^{-1} , donc au moins 50%.

La Figure 2.3 compare les approximations par lois de mélange de gaussienne LSMG, ELSA et AMEX de la loi exponentielle, ainsi que son approximation AXDA par noyau Gaussien¹⁴ et son approximation de Moreau. Premièrement, nous remarquons, comme pour l'exemple précédent, que les approximations par lois LSMG sont non différentiables à l'origine (car leur loi de mélange est la loi exponentielle dont la densité est non nulle à l'origine) ce qui permet de

¹⁴Notons que cette approximation peut également être interprété comme une approximation LMG ou comme la densité de probabilité *Exponentially modified Gaussian*.

tirer les mêmes conclusions que précédemment. Toutefois, contrairement à AXDA qui permet de préserver l'espérance mais n'est pas majorée par la loi exponentielle cible, et à l'approximation de Moreau qui est majorée par la loi cible mais ne préserve pas son espérance, les approximations par lois de mélange de gaussiennes LSMG permettent de considérer les deux situations en prenant l'approximation ELSA ou AMEX avec un simple changement de paramétrisation. Cet exemple permet de souligner la souplesse et la richesse des approximations utilisant les lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG.

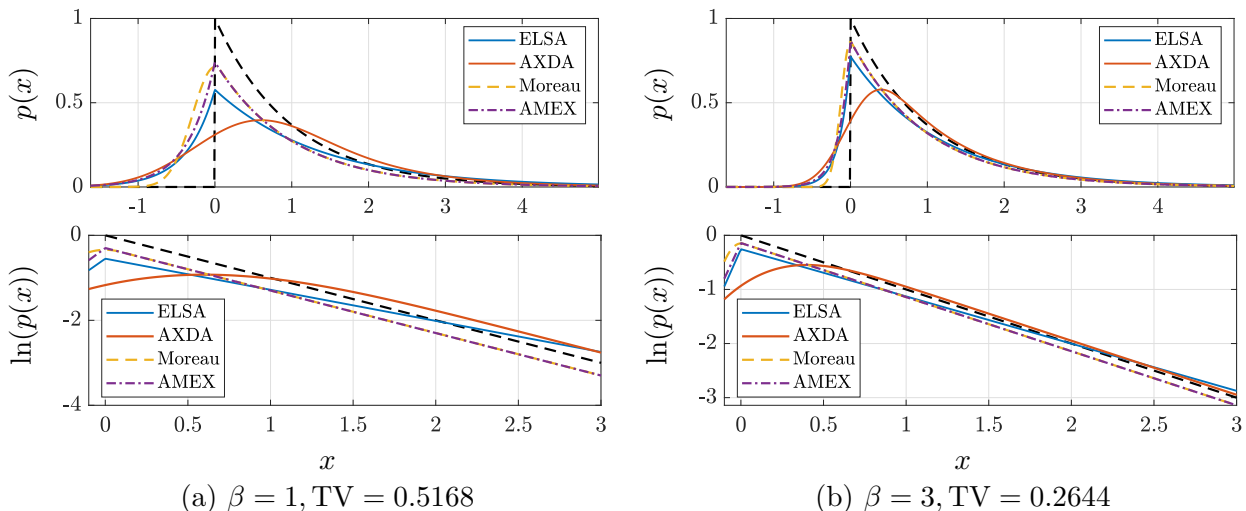


FIGURE 2.3 : Densités de probabilité (a) et représentations logarithmiques (b) des approximations LSMG (ELSA en bleu et AMEX en magenta) d'une loi exponentielle de paramètre d'échelle unitaire comparée à une approximation AXDA (en rouge) et l'approximation de Moreau (en jaune). Les paramètres des approximations ont été fixés de sorte que les variations totales soient identiques.

2.4 Expériences préliminaires

Nous allons clore ce chapitre sur les lois de mélange de gaussiennes par une étude préliminaire des propriétés de convergence des méthodes d'échantillonnage stochastique à base de lois de mélange de gaussiennes. Pour ce faire, nous considérons un exemple motivé par celui du modèle à effet aléatoire donné dans [DP08] où les observations sont données par :

$$y_{kl} = x_k + \epsilon_{kl} \quad (2.16)$$

pour $k = 1, \dots, K$ et $l = 1, \dots, L$. Nous supposons que x_k et ϵ_{kl} sont indépendants pour toute valeur de k et l et que $\epsilon_{kl} \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$. En d'autres termes, y_{kl} représente l'observation l du groupe k , L le nombre d'éléments par groupe et x_k est la moyenne du groupe k . Par ailleurs, $E[x_k]$ est la moyenne des moyennes de tous les groupes, $\text{var}(x_k)$ est la variance inter-groupe et σ^2 la variance intra-groupe. Dans la suite de cette section, la variance intra-groupe σ^2 est supposée connue, et le but est de retrouver la moyenne de chaque groupe x_k à partir des observations y_{kl} . Nous proposons d'étudier deux cas de figure pour l'*a priori* de x_k . Dans le premier exemple nous prenons en compte un *a priori* à support positif (qui n'est donc pas un mélange de gaussiennes) afin d'étudier les propriétés de convergence des échantillonneurs à base d'approximations ELSA et en particulier de leur comportement en fonction de la qualité de l'approximation. Nous comparons cet échantillonneur avec des échantillonneurs à base de

modèle AXDA avec noyau Gaussien ainsi qu'avec un algorithme proximal MCMC. Dans le second exemple, nous prenons en compte un *a priori* qui admet une décomposition exacte en mélange de gaussiennes, dans le but de valider notre approche de marginalisation par mélange de gaussiennes.

2.4.1 Exemple 1 : cas d'un *a priori* Exponentiel

Dans la section précédente, nous avons effectué une comparaison des approximations ELSA, AXDA et Moreau, en termes de modélisation dans le cas de la loi exponentielle. Ici, nous étudions empiriquement les propriétés de convergence des échantillonneurs stochastiques construits à partir de ces approximations.

Nous considérons que les variables d'intérêt sont distribuées suivant une loi exponentielle $x_k \sim \mathcal{E}(\tau)$ de paramètre d'intensité $\tau = 1$ connu. Notre objectif est d'échantillonner efficacement la densité *a posteriori* de $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_K]^T$ qui s'écrit¹⁵ :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto \prod_k \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_l (y_{kl} - x_k)^2\right) \exp\left(-\frac{x_k}{\tau}\right) \mathbb{1}_{x_k \geq 0} \quad (2.17)$$

où $\mathbf{y} = \{y_{kl}\}_{k=1, \dots, K, l=1, \dots, L}$. Notons que ce problème peut être interprété comme l'équivalent Bayésien du *non-negative LASSO*.

Échantillonneur de Gibbs pour l'approximation ELSA. Pour cet échantillonneur l'*a priori* Exponentiel sur les variables d'intérêt x_k est remplacé par son approximation ELSA vue précédemment. Plus précisément, nous utilisons la représentation en mélange de gaussiennes LSMG d'ELSA pour aboutir à la densité *a posteriori* augmentée suivante :

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{w}|\mathbf{y}) \propto \prod_k \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_l (y_{kl} - x_k)^2\right) w_k^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{(x_k - w_k\beta/\tau)^2}{2w_k}\right) \exp\left(-\frac{\beta w_k}{\tau^2}\right).$$

Sachant que la vraisemblance est gaussienne, la loi conditionnelle *a posteriori* de \mathbf{x} est gaussienne également. Par ailleurs, il est facile de montrer que la loi conditionnelle *a posteriori* des variables w_k est une loi GIG. Donc, la loi *a posteriori* jointe de \mathbf{x} et \mathbf{w} peut être facilement échantillonnée par l'échantillonneur de Gibbs donné dans Algorithme 2.1¹⁶.

Algorithme 2.1 Échantillonneur de Gibbs pour l'approximation ELSA.

A chaque itération (t) tirer $(x_k^{(t+1)}, w_k^{(t+1)})$ pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$:

- (a) $w_k^{(t+1)} \sim p(w_k | \mathbf{x}_{-k}^{(t)}, \mathbf{w}_{-k}^{(t)}, \mathbf{y})$, loi GIG,
 - (b) $x_k^{(t+1)} \sim p(x_k | \mathbf{x}_{-k}^{(t)}, \mathbf{w}^{(t+1)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne.
-

Il est important de souligner que la loi *a posteriori* des variables x_k est une loi mélange de gaussiennes (au sens large (2.1)), car la moyenne et la variance de $p(x_k | \mathbf{x}_{-k}^{(t)}, \mathbf{w}_k^{(t+1)})$ dépendent de $w_k^{(t+1)}$, toutefois la relation entre la moyenne et la variance n'est pas linéaire, ce n'est donc pas une LSMG.

¹⁵Il est important de rappeler que cet exemple est donné à titre illustratif uniquement, et qu'il ne nécessite pas la mise en œuvre de méthodes d'échantillonnage élaborées.

¹⁶La notation $\mathbf{u}_{-k}^{(t)}$ désigne le vecteur $\mathbf{u}^{(t)}$ sans la k -ième composante, *i.e.*, $\mathbf{u}_{-k}^{(t)} = [\mathbf{u}_1^{(t+1)}, \mathbf{u}_2^{(t+1)}, \dots, \mathbf{u}_{k-1}^{(t+1)}, \mathbf{u}_{k+1}^{(t)}, \dots, \mathbf{u}_K^{(t)}]$.

Échantillonneur de Gibbs pour l'approximation AXDA. Pour ce second échantillonneur, l'*a priori* Exponentiel sur les variables d'intérêt x_k est remplacé par son approximation AXDA avec noyau gaussien donnant lieu à la densité *a posteriori* augmentée suivante :

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{u} | \mathbf{y}) \propto \prod_k \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_l (y_{kl} - x_k)^2\right) \exp\left(-\frac{(x_k - u_k)^2}{2\rho^2}\right) \exp\left(-\frac{u_k}{\tau}\right) \mathbb{1}_{u_k \geq 0},$$

Là encore, la loi conditionnelle *a posteriori* des variables x_k est gaussienne, quant aux variables u_k il est facile de voir que leur loi conditionnelle est une loi gaussienne tronquée sur $[0, \infty[$. La loi jointe de \mathbf{x} et \mathbf{u} peut donc facilement être échantillonnée par l'échantillonneur de Gibbs donné dans Algorithme 2.2.

Algorithme 2.2 Échantillonneur de Gibbs pour l'approximation AXDA.

A chaque itération (t) tirer $(x_k^{(t+1)}, u_k^{(t+1)})$ pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$:

- (a) $u_k^{(t+1)} \sim p(u_k | \mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u}_{-k}^{(t)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne tronquée,
 - (b) $x_k^{(t+1)} \sim p(x_k | \mathbf{x}_{-k}^{(t)}, \mathbf{u}^{(t+1)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne.
-

Ici, la loi *a posteriori* des variables x_k peut être interprétée comme un modèle AXDA à noyau gaussien, car la moyenne de $p(x_k | \mathbf{x}_{-k}^{(t)}, \mathbf{u}_k^{(t+1)})$ dépend de $u_k^{(t+1)}$. En d'autre terme la loi *a posteriori* des variables x_k est une loi mélange de gaussiennes de classe LMG.

Échantillonneur MYULA. Nous proposons de comparer les approximations ELSA et AXDA et leur échantillonneur de Gibbs associé à l'échantillonneur MCMC proximal MYULA. Remarquons que la densité *a posteriori* (2.17) s'écrit :

$$p(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \propto \exp(-\psi_1(\mathbf{x}) - \psi_2(\mathbf{x}))$$

où les fonctions $\psi_1(\mathbf{x})$ et $\psi_2(\mathbf{x})$ sont données par :

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{x}) &= \frac{L}{2\sigma^2} \left(\mathbf{x}^T \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \bar{\mathbf{y}} \right), \\ \psi_2(\mathbf{x}) &= \begin{cases} \mathbf{x}/\tau, & \text{si } \mathbf{x} \in \mathbb{R}_+^K \\ \infty, & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned}$$

avec $\bar{\mathbf{y}} = [\bar{y}_1, \dots, \bar{y}_K]^T$ et $\bar{y}_k = \sum_l y_{kl}/L$. La fonction $\psi_1(\mathbf{x})$ est continûment différentiable sur \mathbb{R} et à gradient Lipschitz de constante $L_{\psi_1} = L/\sigma^2$. Par ailleurs, $\psi_2(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est convexe, semi-continue inférieurement et son opérateur proximal est donné par :

$$[\text{prox}_{\psi_2}^\lambda(\mathbf{x})]_k = \max(0, x_k - \lambda/\tau)$$

Rappelons que dans le cadre de MYULA le paramètre d'échelle $\lambda > 0$ permet de gérer la qualité de l'approximation. Plus précisément, plus λ est faible, plus l'approximation de Moreau se rapproche de la loi *a priori* initiale. L'échantillonneur MYULA pour ce problème est donné dans Algorithme 2.3.

Algorithme 2.3 Échantillonneur MYULA.

A chaque itération (t) tirer $\mathbf{x}^{(t+1)}$:

- (a) $\mathbf{b} \sim \mathcal{N}(0, 1)$,
 - (b) $\mathbf{x}^{(t+1)} = \left(1 - \frac{\gamma}{\lambda}\right) \mathbf{x}^{(t)} - \gamma \nabla \psi_1(\mathbf{x}^{(t)}) + \frac{\gamma}{\lambda} \text{prox}_{\psi_2}^\lambda(\mathbf{x}^{(t)}) + \sqrt{2\gamma} \mathbf{b}$.
-

Le paramètre de discrétisation temporelle γ doit être fixé dans l'intervalle $\gamma \in]0, \lambda/(\lambda L_{\psi_1} + 1)[$ afin de garantir la stabilité de la discrétisation d'Euler-Maruyama. De grandes valeurs de γ produisent une chaîne de Markov qui converge rapidement au prix d'un biais important. Inversement, de petites valeurs de γ permettent d'avoir un faible biais, mais produisent une chaîne de Markov potentiellement lente. Pour nos expériences nous avons suivi les conseils pratiques donnés dans [DMP18, Section 3.3], qui suggère de pendre γ dans l'intervalle $\gamma \in [\lambda/5(\lambda L_{\psi_1} + 1), \lambda/2(\lambda L_{\psi_1} + 1)]$; nous avons donc fixé $\gamma = \lambda/2(\lambda L_{\psi_1} + 1)$.

Résultats expérimentaux. Nous avons simulé des observations y_{kl} à partir du modèle (2.16) où $K = L = 10$, les variables x_k ont été générées suivant la loi *a priori* exponentielle de paramètre d'intensité $\tau = 1$, et la variance intra-groupe est choisie unitaire $\sigma^2 = 1$.

À partir des observations, nous avons mené trois expériences distinctes, chacune avec un degré d'approximation différent. Plus précisément, la variation totale entre la distribution de l'*a priori* Exponentiel et chacune des approximations vaut $TV = 0.2644$ pour la première (celle-ci correspond aux densités données dans la Figure 2.3-(b)), $TV = 0.1000$ pour la seconde et $TV = 0.0274$ pour la dernière.

Pour étudier quantitativement les propriétés de convergence des trois échantillonneurs, nous nous sommes intéressés à l'indice *Effective Sample Size Ratio* (ESSR) [Liu04, Section 5.8] qui représente la proportion d'échantillons i.i.d. produits par l'échantillonneur, défini par :

$$ESSR = \left(1 + 2 \sum_{t=1}^{\infty} ACF_t \right)^{-1} \quad (2.18)$$

où ACF_t est la fonction d'auto-corrélation (ACF) entre les échantillons de la chaîne de Markov. Précisément, pour une chaîne de Markov donnée $\{U_t\}_{t=1, \dots, T}$, l'ACF entre tous les échantillons U_t et $U_{t'}$ séparés par $\Delta t = t - t'$ est donnée par :

$$ACF_{\Delta t} = \frac{E[(U_t - \mu_U)(U_{t'} - \mu_U)]}{\sigma_U^2},$$

où μ_U et σ_U^2 sont la moyenne et la variance de la chaîne de Markov respectivement. Un échantillonneur efficace est un échantillonneur dont l'ESSR est proche de 1. Comme en pratique nous n'avons accès qu'à un nombre fini d'échantillons la sommation dans (2.18) est tronquée à T_{max} , le premier instant t où $ACF_t + ACF_{t+1} < 0$ [GCS⁺13].

Pour chacune des expériences et chacun des échantillonneurs, la Table 2.5 donne les estimées de l'ESSR de la variable x_1 . Premièrement, si nous regardons les performances de chacun des échantillonneurs séparément, nous constatons qu'ils ont le même comportement général. Plus précisément, plus la qualité de l'approximation augmente (*i.e.*, la variation totale diminue) plus l'ESSR décroît, ce qui est synonyme de perte de performance. Nous avons montré dans le cadre des approximations ELSA que la corrélation entre variables d'intérêt et variables de mélange augmente si la variation totale diminue (voir Proposition 3-(ii)) et en particulier que la corrélation vaut 1 dans le cas limite où la variation totale est nulle. En d'autres termes, plus la qualité de l'approximation est élevée plus les variables de mélanges sont couplées avec les variables d'intérêts et donc l'échantillonneur est moins performant.

TABLE 2.5 : *Effective Sample Size Ratio* (ESSR) des chaînes de Markov générées par chacun des échantillonneurs de la variable x_1 . L'ESSR a été estimé à partir de $T = 5000$ échantillons.

	ELSA	AXDA	MYULA	TV $[\cdot, \mathcal{E}(1)]$
ESSR(x_1)	0.5009	0.4338	0.0856	TV = 0.2644
	0.2337	0.0631	0.0047	TV = 0.1000
	0.0792	0.0082	0.0007	TV = 0.0274

Cela s'explique aisément pour l'approximation AXDA, car en augmentant la qualité de l'approximation la variance du noyau gaussien diminue et la corrélation entre variables latentes et variables d'intérêt augmente. Par ailleurs, dans le cadre de l'échantillonneur MYULA, la variable qui gère la discrétisation temporelle de la diffusion de Langevin γ prend ses valeurs dans l'intervalle $]0, \lambda/(\lambda L_{\psi_1} + 1)[$, ce qui implique que si la qualité de l'approximation augmente (*i.e.*, λ diminue) la valeurs maximale admissible pour γ diminue et donc l'échantillonneur MYULA produit des échantillons très corrélés les uns aux autres.

D'autre part, nous constatons pour les trois expériences, que ELSA est l'échantillonneur le plus efficace en terme d'ESSR. Pour la première expérience (première ligne de la Table 2.5), donc pour une qualité d'approximation relativement faible, nous constatons que ELSA et AXDA sont nettement plus efficace que MYULA. Plus précisément, 50% des échantillons produit par ELSA peuvent être considéré comme i.i.d., 40% pour AXDA, et seulement 8% pour MYULA. Par ailleurs, plus la qualité de l'approximation augmente, plus l'écart entre les échantillonneurs se creuse. Plus précisément, nous constatons que l'efficacité d'ELSA se dégrade beaucoup moins que les deux autres échantillonneurs en augmentant la qualité de l'approximation. A titre d'exemple, pour la seconde expérience (deuxième ligne de la Table 2.5), 25% des échantillons générés par ELSA sont i.i.d. contre 6% pour AXDA et moins de 1% pour MYULA.

Les bonnes performances d'ELSA par rapport à AXDA s'expliquent par le fait que ELSA autorise un degré de liberté additionnel au niveau des variances des gaussiennes mises en jeu. En effet, comme ces variances sont des variables aléatoires, celles-ci (bien que leur espérance tende vers zéro quand la variation totale tend vers zero) peuvent parfois prendre des valeurs assez grandes permettant une exploration plus rapide et efficace de la loi, contrairement à AXDA où les gaussiennes ont toujours la même variance. La remarque s'applique également à MYULA, bien que celui-ci ne fait pas intervenir de mélange de gaussiennes, le paramètre de discrétisation temporelle de la diffusion de Langevin γ est majoré et constant durant tout le processus d'échantillonnage menant à une exploration nettement moins efficace que ELSA.

2.4.2 Exemple 2 : cas d'un *a priori* de Laplace

Dans ce second exemple, nous nous intéressons à la stratégie de construction d'échantillonneur PCGS grâce aux représentations en mélange de gaussiennes, donc cette fois-ci sans approximation. Pour ce faire, nous prenons l'exemple de l'*a priori* de Laplace qui, comme nous l'avons vu précédemment, est une loi de mélange de gaussiennes de classe SMG. Plus précisément, nous considérons dans cet exemple que les variables d'intérêt sont distribuées suivant une loi de Laplace $x_k \sim \mathcal{L}(\mu, \tau)$, de paramètre d'échelle $\tau = 0.1$ connu et de moyenne μ inconnue à laquelle est attribué un *a priori* non informatif $p(\mu) \propto 1$. L'objectif est d'estimer, en utilisant des méthodes d'échantillonnage, le vecteur $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_K]^T$ conjointement avec l'hyper-paramètre μ à partir

de la loi *a posteriori* donnée par :

$$p(\mathbf{x}, \mu | \mathbf{y}) \propto \prod_k \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_l (y_{kl} - x_k)^2\right) \exp\left(-\frac{1}{\tau} |x_k - \mu|\right) \quad (2.19)$$

où $\mathbf{y} = \{y_{kl}\}_{k=1, \dots, K, l=1, \dots, L}$. Notons que ce problème est équivalent au *Bayesian LASSO* où l'*a priori* est décalé de μ .

Pour échantillonner la loi *a posteriori* donnée par la densité (2.19), nous proposons de comparer trois approches, la première utilise échantillonneur de Gibbs classique, la seconde inspirée du *Bayesian LASSO* [PC08] consiste à remplacer l'*a priori* de Laplace par sa représentation en mélange de gaussiennes SMG, et la troisième qui consiste à construire un PCGS en utilisant la représentation en mélange de gaussiennes SMG de l'*a priori* de Laplace.

Échantillonneur de Gibbs. Pour cet échantillonneur de Gibbs les variables \mathbf{x} et μ sont alternativement échantillonnés à partir de leur loi conditionnelle *a posteriori*. Plus précisément, comme la loi conditionnelle *a posteriori* de μ n'est pas une loi usuelle nous utilisons une étape de Metropolis-Hastings à marche aléatoire (*Random Walk Metropolis-Hastings*) (RWMH) avec une loi de proposition gaussienne¹⁷ pour l'échantillonnage de cette dernière. L'échantillonneur résultant (parfois appelé *Metropolis-Hastings within Gibbs*) est donné dans Algorithme 2.4.

Algorithme 2.4 Échantillonneur de Gibbs pour la loi *a posteriori* (2.19).

A chaque itération (t)

1. tirer $x_k^{(t+1)}$ pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$:
 - $x_k^{(t+1)} \sim p(x_k | \mathbf{x}_{-k}^{(t)}, \mu^{(t)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne tronquée,
 2. tirer $\mu^{(t+1)}$:
 - $\mu^{(t+1)} \sim p(\mu | \mathbf{x}^{(t+1)}, \mathbf{y})$, par RWMH.
-

Échantillonneur de Gibbs par représentation SMG (*Bayesian LASSO*). Pour cet échantillonneur inspiré du *Bayesian LASSO*¹⁸ [PC08], l'*a priori* de Laplace est remplacé par sa représentation en mélange de gaussiennes SMG donnant lieu à la densité *a posteriori* augmentée suivante :

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mu | \mathbf{y}) \propto \prod_k \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_l (y_{kl} - x_k)^2\right) w_k^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{(x_k - \mu)^2}{2w_k}\right) \exp\left(-\frac{w_k}{2\tau^2}\right) \quad (2.20)$$

Il est important de rappeler que contrairement à l'exemple précédent, aucune approximation n'est introduite ici. En effet, (2.19) est la loi marginale de (2.20) par rapport à \mathbf{w} .

À partir de (2.20) il est facile de déduire que la loi conditionnelle *a posteriori* de \mathbf{x} est gaussienne, et que celle de \mathbf{w} est une GIG. Par ailleurs, nous constatons que grâce à l'introduction des variables de mélange \mathbf{w} , la loi conditionnelle *a posteriori* de μ est gaussienne et peut donc être échantillonnée sans passer par l'étape de RWMH. L'échantillonneur de cette loi *a posteriori* augmentée (que l'on note Gibbs-SMG par la suite) est donné dans Algorithme 2.5.

¹⁷Ici, et pour toutes nos expériences faisons intervenir une étape de RWMH la variance de la loi de proposition est fixé afin d'atteindre un taux d'acceptation de 30%

¹⁸Il est important de souligner que contrairement au problème étudié dans [PC08], nous considérons ici que τ et σ^2 sont connues. Il n'est donc pas nécessaire de conditionner la loi *a priori* de \mathbf{x} sur σ car dans notre cas la loi *a posteriori* de \mathbf{x} est toujours uni-modale.

Algorithme 2.5 Échantillonneur Gibbs-SMG pour la loi *a posteriori* augmentée (2.20).

A chaque itération (t)

1. tirer $(x_k^{(t+1)}, w_k^{(t+1)})$ pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$:
 - (a) $w_k^{(t+1)} \sim p(w_k | \mathbf{w}_{-k}^{(t)}, \mathbf{x}^{(t)}, \mu^{(t)}, \mathbf{y})$, loi GIG,
 - (b) $x_k^{(t+1)} \sim p(x_k | \mathbf{x}_{-k}^{(t)}, \mathbf{w}^{(t+1)}, \mu^{(t)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne,
 2. tirer $\mu^{(t+1)}$:
 - (a) $\mu^{(t+1)} \sim p(\mu | \mathbf{x}^{(t+1)}, \mathbf{w}^{(t+1)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne.
-

Échantillonneur PCGS par représentation SMG. Cet échantillonneur PCGS est partiellement marginalisé par rapport à \mathbf{x} . Comme la marginalisation des variables \mathbf{x} de la loi *a posteriori* initiale (2.19) est en pratique impossible, nous proposons de passer par la représentation en mélange de gaussiennes SMG de l'*a priori* de Laplace. En effet, nous avons vu pour l'algorithme Gibbs-SMG que la loi conditionnelle *a posteriori* de \mathbf{x} (2.20) est gaussienne. Il est donc facile de marginaliser \mathbf{x} de (2.20) en calculant simplement la constante de normalisation de cette gaussienne. La densité de cette loi marginalisée est donnée par :

$$p(\mathbf{w}, \mu | \mathbf{y}) \propto \int_{\mathbb{R}^K} p(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mu | \mathbf{y}) d\mathbf{x} \propto \prod_k \rho_k^{\frac{1}{2}} w_k^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{\nu_k^2}{2\rho_k} - \frac{\mu^2}{w_k} - \frac{w_k}{2\tau^2}\right), \quad (2.21)$$

où

$$\nu_k = \rho_k \left(\frac{\sum_k y_{kl}}{\sigma^2} + \frac{\mu}{w_k} \right) \quad \text{et} \quad \rho_k = \frac{\sigma^2 w_k}{L w_k + \sigma^2}$$

À partir de (2.21) il est facile de montrer que la loi conditionnelle *a posteriori* de μ est gaussienne. Cependant, la loi conditionnelle *a posteriori* des w_k n'est pas une loi usuelle. Nous proposons alors d'utiliser une étape de RWMH avec une loi de proposition gaussienne tronquée pour les échantillonner.

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent (Section 1.3) le PCGS combine des étapes d'échantillonnage, pour \mathbf{w} et μ dans cet exemple, à partir des lois conditionnelles marginalisées (2.21) et des étapes d'échantillonnage, pour \mathbf{x} dans cet exemple, à partir de la loi jointe (2.20). Notons également qu'il est nécessaire de permuter l'ordre de l'échantillonnage (par rapport à l'échantillonneur de Gibbs-SMG donnée par Algorithme 2.5) afin d'assurer la compatibilité des lois conditionnelles et de préserver la corrélation structurelle entre les différentes variables (voir organigramme [DP08, Figure 2]). L'échantillonneur résultant (que l'on note PCGS-SMG par la suite) est donné dans Algorithme 2.6.

Algorithme 2.6 Échantillonneur PCGS-SMG à partir de (2.20) et (2.21).

A chaque itération (t)

1. tirer $w_k^{(t+1)}$ pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$:
 - $w_k^{(t+1)} \sim p(w_k | \mathbf{w}_{-k}^{(t)}, \mu^{(t)}, \mathbf{y})$, par RWMH (2.21),
 2. tirer $\mu^{(t+1)}$:
 - $\mu^{(t+1)} \sim p(\mu | \mathbf{w}^{(t+1)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne (2.21),
 3. tirer $\mathbf{x}^{(t+1)}$ conjointement :
 - $\mathbf{x}^{(t+1)} \sim p(\mathbf{x} | \mathbf{w}^{(t+1)}, \mu^{(t+1)}, \mathbf{y})$, loi gaussienne (2.20).
-

Résultats expérimentaux. Nous avons simulé des observations y_{kl} à partir du modèle (2.16) où $K = L = 10$; les variables x_k ont été générées suivant la loi de Laplace de moyenne $\mu = 10$ et de paramètre d'échelle $\tau = 10^{-1}$, et la variance intra-groupe est fixée à $\sigma^2 = 4$.

Pour analyser les performances de chacun des échantillonneurs nous nous intéressons dans un premier temps à la chaîne de Markov de l'hyper-paramètre μ et à sa *corrélation structurelle*¹⁹ avec les variables x_k . Dans la Figure 2.4 sont données, pour chaque échantillonneur, l'évolution de la chaîne $\mu^{(t)}$ en fonction de l'itération (t) (colonne de gauche), un nuage de points représentant μ en fonction de x_1 qui va nous permettre d'analyser la structure de corrélation entre les deux variables (colonne centrale) ainsi que la fonction d'auto-corrélation (ACF) de μ (colonne de droite).

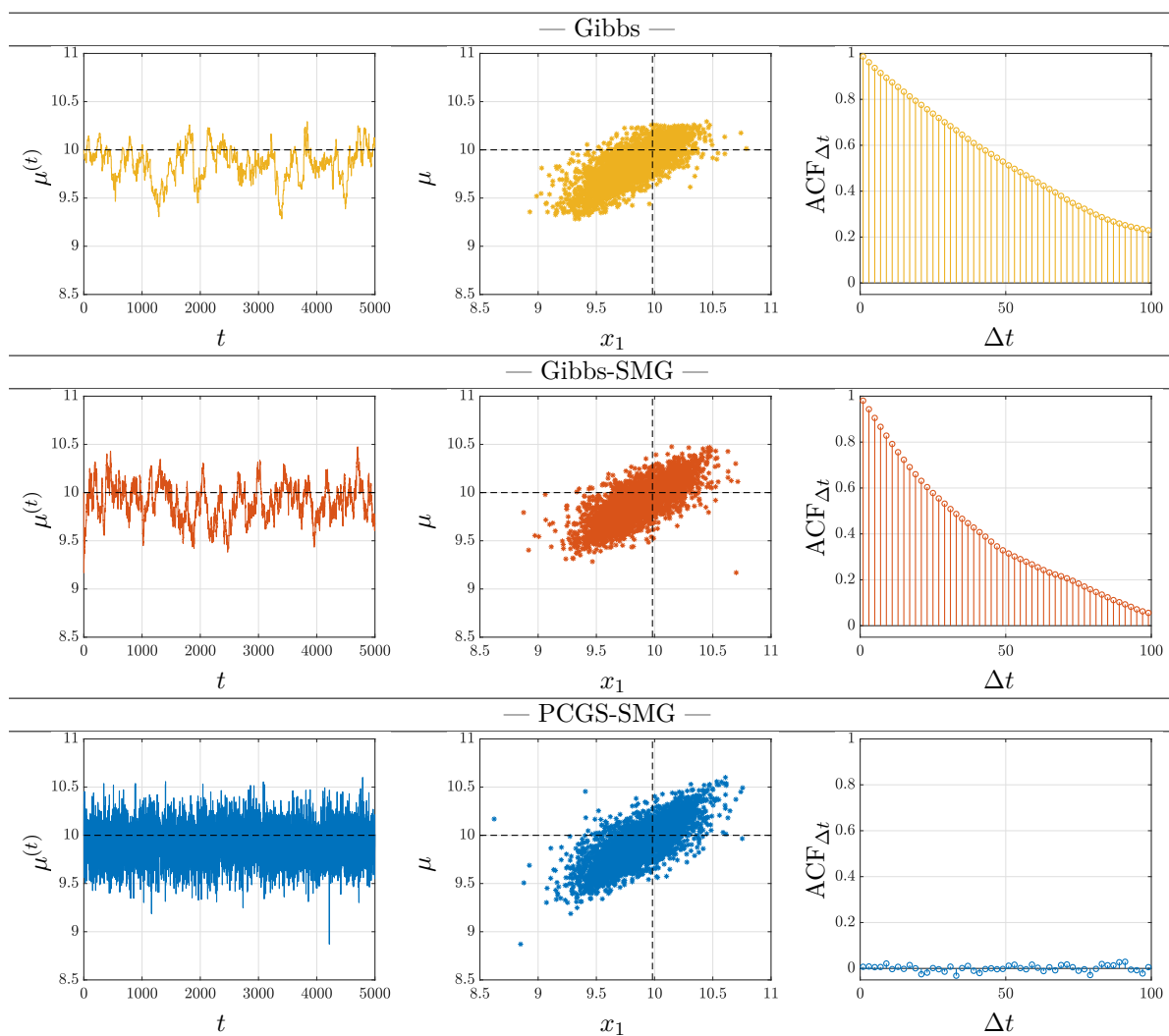


FIGURE 2.4 : Comparaisons des performances des échantillonneurs : Gibbs classique (première ligne), Gibbs avec décomposition SMG (deuxième ligne) et PCGS avec décomposition SMG (dernière ligne). Première colonne : échantillons $\mu^{(t)}$ générés; deuxième colonne : corrélation structurelle entre μ et x_1 ; troisième colonne : fonction d'auto-corrélation ACF de μ .

La première ligne de la Figure 2.4 donne les résultats de l'échantillonneur de Gibbs classique

¹⁹Nous parlerons de corrélation structurelle pour désigner la corrélation entre les variables aléatoires μ et \mathbf{x} qui est dicté par la loi *a posteriori* (2.19), à ne pas confondre avec la corrélation « temporelle » (estimée par l'ACF dans nos exemples) qui nous sert à mesurer la corrélation entre échantillons successifs d'une itération à l'autre.

(Algorithme 2.4). Nous observons que les échantillons $\mu^{(t)}$ générés sont autour de la vraie valeur de l’hyper-paramètre $\mu^* = 10$. Cependant, les échantillons générés sont fortement corrélés les uns aux autres, comme le confirme l’ACF. La figure représentant le nuage de points de μ en fonction de x_1 montre qu’il y a une corrélation linéaire entre les deux variables. Plus précisément, il y a une corrélation linéaire entre μ et toutes les variables $x_k, \forall k$. En effet, μ est la moyenne *a priori* des x_k qui sont *a priori* distribués suivant une loi de Laplace. Donc si la valeur de μ est grande, cela implique que les x_k prennent également de grandes valeurs, réciproquement lorsque la valeur de μ est faible. Cette figure nous sert de référence pour les deux autres échantillonneurs, afin d’assurer que cette *corrélation structurelle* n’a pas été altérée par l’introduction des variables de mélange \mathbf{w} et par la marginalisation.

Nous constatons que l’échantillonneur Gibbs-SMG permet en effet de préserver cette *corrélation structurelle* entre l’hyper-paramètre μ et x_1 (cela est valide pour toutes les variables $x_k, \forall k$), toutefois bien que cet échantillonneur produise des échantillons de μ moins corrélés que l’algorithme de Gibbs classique, la corrélation entre échantillons successifs $\mu^{(t)}$ reste assez importante. En effet, dans Gibbs-SMG, l’échantillonnage de μ se fait directement à partir de sa loi conditionnelle *a posteriori* (gaussienne), alors que dans l’algorithme de Gibbs classique une étape RWMH est nécessaire, où un certain nombre d’échantillons sont rejetés. Cependant, l’efficacité de cet échantillonneur Gibbs-SMG reste modeste, en particulier parce que l’échantillonnage de (\mathbf{x}, μ) se fait de façon alternée : $\mathbf{x}^{(t+1)}|\mu^{(t)}$ et $\mu^{(t+1)}|\mathbf{x}^{(t+1)}$, ce qui réduit les performances de l’échantillonnage en terme de propriétés de mélange et d’exploration de la loi.

Le PCGS en revanche, permet non seulement de préserver la corrélation structurelle entre les variables, mais en plus, les échantillons générés $\mu^{(t)}$ sont faiblement corrélés les uns aux autres. En effet, comme l’échantillonnage de μ se fait à partir de la loi marginalisée (2.21), les échantillons $\mu^{(t)}$ ne sont pas affectés par \mathbf{x} car il n’y a pas d’interaction entre μ et \mathbf{x} . Par ailleurs, comme la variable μ est réintroduite dans l’échantillonnage de \mathbf{x} qui se fait à partir de la loi jointe (2.20), la corrélation structurelle entre les deux variables n’est pas altérée, donnant lieu à un échantillonneur efficace de la loi cible (2.19).

Si nous regardons l’échantillonnage des variables d’intérêt x_k , nous constatons évidemment que cette efficacité de l’échantillonnage de l’hyper-paramètre μ a un effet direct sur les chaînes de Markov des variables x_k . Dans la Table 2.6 sont donnés les ESSR de la variable x_1 pour chacun des échantillonneurs qui montrent que le PCGS-SMG est de loin l’échantillonneur le plus efficace des trois avec un ESSR de 0.85 correspondant à un facteur de gain en efficacité de 30 par rapport au Gibbs-SMG et de 45 par rapport au Gibbs classique.

TABLE 2.6 : *Effective Sample Size Ratio* (ESSR) des chaînes de Markov générées par chacun des échantillonneurs de la variable x_1 . L’ESSR a été estimé à partir de $T = 5000$ échantillons.

	PCGS-SMG	Gibbs-SMG	Gibbs
ESSR(x_1)	0.8529	0.0255	0.0187

Sur la stratégie de marginalisation. Lors de la construction d’un échantillonneur PCGS, le choix de la ou des variables à marginaliser est d’une très grande importance. Nous avons expliqué dans le chapitre précédent (section 1.3.3) qu’il faut que la loi *a posteriori* marginalisée soit relativement simple à échantillonner, sans quoi son échantillonnage risque d’annihiler le gain apporté par la marginalisation. Nous revenons ici sur cet aspect en s’appuyant sur l’exemple que nous venons de voir.

Commençons par souligner que nous aurions pu marginaliser l’hyper-paramètre μ à partir de (2.20). En effet, nous avons vu que la loi conditionnelle *a posteriori* de μ est gaussienne, il

est donc possible d'intégrer la loi *a posteriori* par rapport à μ , donnant lieu à la loi *a posteriori* marginalisée suivante :

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{w} | \mathbf{y}) \propto \prod_k \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_l (y_{kl} - x_k)^2\right) p(\mathbf{x}, \mathbf{w}) \quad (2.22)$$

où

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{w}) \propto \frac{|\mathbf{W}^{-\frac{1}{2}}|}{\sqrt{\mathbf{1}_K^T \mathbf{W}^{-1} \mathbf{1}_K}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{\mathbf{w}^T \mathbf{1}_K}{\tau^2} + \mathbf{x}^T \mathbf{W}^{-1} \mathbf{x} - (\mathbf{1}_K^T \mathbf{W}^{-1} \mathbf{1}_K)(\mathbf{x}^T \mathbf{W}^{-1} \mathbf{1}_K)^2\right)\right),$$

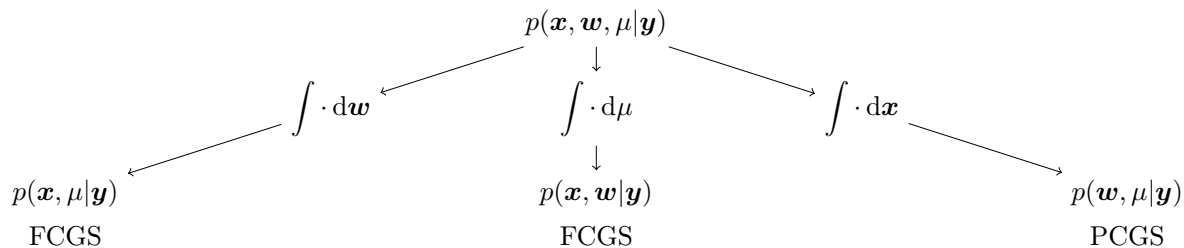
avec $\mathbf{W} = \text{diag}(\mathbf{w})$ et $\mathbf{1}_K$ est le vecteur de taille K dont les éléments sont tous égaux à 1. Comme μ est un hyper-paramètre, et que nous sommes intéressés par l'estimation de \mathbf{x} uniquement, il n'est pas nécessaire d'échantillonner μ . Il est alors possible dans ce cas, de construire un *Fully Collapsed Gibbs Sampler* (FCGS) à partir de (2.22). Cet échantillonneur correspond simplement à l'échantillonneur de Gibbs de (2.22) qui alterne entre échantillonnage de x_k et w_k . Cependant, les variables de mélange w_k ne sont plus indépendantes les unes des autres. De plus, chaque variable x_k dépend de toutes les variables w_k , cela implique que les x_k sont également dépendantes les unes des autres. Cette stratégie de marginalisation est clairement contre-productive, car elle mène vers une structure complexe de l'*a priori* $p(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ où les variables d'intérêt sont couplées les unes aux autres et donne lieu à un échantillonnage inefficace, sans oublier que w_k n'admet pas une loi conditionnelle *a posteriori* usuelle, et nécessite une étape de RWMH à marche aléatoire. Finalement, suivant les modalités du problème et le choix de l'*a priori*, la marginalisation des hyper-paramètres n'est pas toujours faisable, contrairement à la marginalisation de \mathbf{x} qui est garantie par la représentation en mélange de gaussiennes proposée.

D'autre part, rappelons que la loi *a posteriori* (2.19) n'est autre que la loi *a posteriori* (2.20) marginalisée par rapport aux variables de mélange \mathbf{w} , et l'échantillonneur de Gibbs donné dans Algorithme 2.4 peut être interprété comme un FCGS. Ici encore, les variables de mélange peuvent être considérées comme des hyper-paramètres et ne sont pas réintroduites dans l'échantillonneur car nous ne sommes pas intéressés par leur estimation.

En d'autres termes, (2.19), (2.21) et (2.22) correspondent à trois marginalisations différentes de la loi jointe (2.20) (voir Figure 2.5). La marginalisation des variables de mélange \mathbf{w} ou de l'hyper-paramètre μ donnent lieu à des échantillonneurs FCGS, alors que la marginalisation des variables d'intérêt nécessite la prise en compte d'un échantillonneur PCGS. Cependant, seul le PCGS permet de réduire l'effet de couplage dû aux interactions entre \mathbf{x} et μ . En effet, sur le plan théorique, la marginalisation de la variable μ semble intéressante car elle permet de se débarrasser complètement de cette dernière. Toutefois, sur le plan pratique, cette marginalisation est contre-productive, car elle donne lieu à un *a priori* non indépendant, qui n'est pas simple à manipuler. Aussi, les résultats de l'expérience précédente montrent que la marginalisation des variables de mélange donne lieu à un échantillonneur inefficace car avec cette marginalisation les variables μ et \mathbf{x} interagissent de façon fondamentalement similaire au cas de l'échantillonneur de Gibbs de la loi jointe (Algorithme 2.5).

Passage à l'échelle et coût de calcul. Jusqu'à présent nous avons évalué les performances des échantillonneurs sans parler du coût de calcul nécessaire par itération. En effet, comme le problème que nous avons étudié est de petite taille, le coût de calcul par itération des échantillonneurs sont assez faibles et les disparités d'un échantillonneur à l'autre sont négligeables.

Cependant, dans le cadre d'applications concrètes, nous pouvons faire face à des lois *a posteriori* de très grandes dimensions. Dans ce cas, la stratégie PCGS par mélange de gaussiennes

FIGURE 2.5 : Différentes stratégies de marginalisation de la loi jointe $p(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mu | \mathbf{y})$.

peut s'avérer contre-productive, car l'échantillonnage de \mathbf{x} revient à échantillonner une gaussienne de grande dimension qui n'est pas une tâche évidente. En effet, l'efficacité du PCGS repose sur l'échantillonnage joint de la variable \mathbf{x} , et si celle-ci est échantillonnée de façon séquentielle (c'est-à-dire que les x_k sont échantillonnés conditionnellement aux autres) les chaînes de Markov résultantes seront évidemment fortement corrélées puisque l'échantillonnage de la variable x_k est conditionnée par toutes les autres variables \mathbf{x}_{-k} .

Par ailleurs, l'échantillonnage joint de \mathbf{x} utilisant des méthodes de factorisation de Cholesky, ou des méthodes dédiées à l'échantillonnage de gaussiennes en grande dimension telle que le *Reversible Jump Perturbation Optimization* (RJPO) [GMI15] est très coûteux en temps de calcul et en charge mémoire, et risque d'annihiler le gain (en temps de calcul) apporté par la marginalisation. D'autre part, bien que les méthodes d'échantillonnage efficace approchées (*e.g.*, AXDA ou MYULA) peuvent être envisagées, celles-ci requièrent la prise en compte d'une étape de rectification par Metropolis-Hastings sans laquelle la loi stationnaire des chaînes de Markov est altérée. Cette étape de rectification est bien évidemment coûteuse en temps de calcul car elle requiert, entre autres, l'inversion de la matrice de covariance de la gaussienne initiale.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons passé en revue les trois classes de mélange de gaussiennes les plus étudiées dans la littérature tant en optimisation déterministe qu'en échantillonnage stochastique. Nous avons vu que certaines méthodes d'échantillonnage stochastique efficace par augmentation de données faisaient intervenir de façon implicite des lois de mélange de gaussiennes. Nous avons vu que la classe LSMG, bien que moins étudiée dans la littérature, est la plus flexible parmi les trois classes. Elle englobe un nombre conséquent de lois de probabilité usuelles et permet de modéliser aussi bien des lois asymétriques que des lois à longues queues et à variations rapides.

Une partie conséquente de ce chapitre a été dédiée à l'étude de la classe LSMG, pour laquelle nous avons démontré certains résultats théoriques fondamentaux. En particulier, nous avons proposé un théorème sur la décomposition des lois LSMG en un produit d'une loi SMG et une fonction monotone. Ce théorème nous a permis d'étendre certains résultats de la classe SMG vers la classe LSMG. Parmi ces résultats figure un théorème sur la caractérisation des lois LSMG stipulant des conditions nécessaires et suffisantes pour qu'une loi de probabilité soit une LSMG. Ce théorème peut être interprété comme une généralisation du théorème donné dans [AM74] sur la caractérisation des SMG.

Nous avons également proposé et étudié l'approximation ELSA, qui est une nouvelle approche de construction d'approximations asymptotiquement exactes par des lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG. Nous avons étudié les propriétés de cette approximation et nous avons montré que celle-ci était plus adaptée pour l'approximation des lois à support semi-fermé ou fermé, en particulier les lois à support positif et favorisant la parcimonie. Par ailleurs, les expériences préliminaires que nous avons menées dans ce chapitre montrent l'efficacité des

échantillonneurs construits à partir d'ELSA par rapport aux méthodes de l'état de l'art, et en particulier quand la qualité de l'approximation augmente. En effet, comme ELSA est basée sur les lois de mélange de gaussiennes LSMG, celle-ci bénéficie d'un degré de liberté additionnel par rapport à AXDA, par exemple, où seul le paramètre de localisation est aléatoire.

Finalement, nous avons vu que les méthodes d'augmentation de données par mélange de gaussiennes pouvaient être une alternative à l'échantillonnage de Gibbs de la loi *a posteriori* cible. Cependant, celles-ci restent inefficaces comparées à notre stratégie de marginalisation par mélange de gaussiennes qui permet de construire un PCGS largement plus efficace. En effet, l'introduction de variables latentes peut réduire la complexité des lois conditionnelles *a posteriori*, mais le couplage entre les variables reste principalement le même. Au contraire, le PCGS permet de réduire certains couplages entre variables tout en préservant la corrélation structurelle afin d'assurer que la loi stationnaire des chaînes de Markov est bien la loi *a posteriori* cible. À titre d'exemple, nous avons choisi un *a priori* qui admet une décomposition exacte en mélange de gaussiennes. Pour terminer, la stratégie de marginalisation PCGS peut évidemment être utilisée avec les approximations ELSA pour construire des échantillonneurs efficaces.

Chapitre 3

A priori Bernoulli mélange de gaussiennes et échantillonnage PCGS

Sommaire

3.1	L'<i>a priori</i> Bernoulli mélange de gaussiennes	64
3.2	Lois <i>a posteriori</i> et marginalisation	66
3.2.1	Loi <i>a posteriori</i> conditionnelle des amplitudes \mathbf{x}	67
3.2.2	Loi <i>a posteriori</i> marginalisée par rapport à \mathbf{x}	67
3.2.3	Loi <i>a posteriori</i> des hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$	67
3.3	Échantillonneur PCGS pour le modèle Bernoulli mélange de gaussiennes	69
3.4	Implémentation efficace du PCGS	72
3.4.1	Simplification de la fonction ψ	73
3.4.2	Factorisation de Cholesky	74
3.4.3	Mise à jour des matrices \mathbf{G} et \mathbf{F}	74
3.4.4	Simplification de la fonction ϕ	77
3.4.5	Implémentation efficace avancées	78
3.5	Cas semi-aveugle ou aveugle	78
3.6	Bilan	79

Nous allons présenter et étudier dans ce chapitre notre principale contribution à savoir le modèle *a priori Bernoulli mélange de gaussiennes* (BMG) qui est un *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} où la distribution \mathcal{D} est une loi de mélange de gaussiennes de la classe LSMG. Le BMG offre la possibilité de prendre en compte un nombre conséquent de lois de probabilité usuelles de la classe LSMG. Il permet aussi d'approcher des lois à support réduit grâce aux approximations ELSA que nous avons proposées dans le chapitre précédent. De plus, le BMG nous permet de construire un échantillonneur PCGS efficace grâce à une stratégie de marginalisation par mélange de gaussiennes.

Dans un premier temps, nous allons présenter l'*a priori* BMG et expliciter le rôle des différents hyper-paramètres entrant en jeu. Nous déroulerons ensuite les expressions mathématiques des lois *a posteriori* nécessaires pour l'implémentation de l'échantillonneur PCGS et nous examinerons les aspects calculatoires pour une implémentation numérique efficace. Plus précisément, nous avons adapté et étendu les techniques basées sur la mise à jour de Cholesky d'ordre 1 proposé dans [GIL11] pour le cas Bernoulli-Gaussien.

Avant de présenter le modèle Bernoulli mélange de gaussiennes, rappelons le contexte général des problèmes inverses parcimonieux que nous souhaitons résoudre par le BMG ainsi que quelques définitions et notations mathématiques.

Rappel sur les problèmes inverses parcimonieux. Comme nous l'avons expliqué dans le Chapitre 1, nos travaux cherchent à résoudre les problèmes inverses parcimonieux où les observations $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^N$ sont considérées comme une combinaison linéaire d'un faible nombre d'atomes $\{\mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k)\}_{k \in \Omega}$ et perturbées par un bruit additif gaussien $\boldsymbol{\epsilon}$:

$$\mathbf{y} = \sum_k^K \mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k)x_k + \boldsymbol{\epsilon} = \sum_{k \in \Omega} \mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k)x_k + \boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{y} = \mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon} \quad (3.1)$$

où $x_k \in \mathbb{S}$ est l'amplitude associée à l'atome $\mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}) \in \mathbb{R}^N$, $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu}) = [\mathbf{h}_1(\boldsymbol{\nu}_1), \dots, \mathbf{h}_K(\boldsymbol{\nu}_K)]$ est le dictionnaire et $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_K]^T$ est le vecteur parcimonieux des amplitudes (voir (1.1), (1.2) et la section 1.1 pour plus de détails). L'objectif est de retrouver quels sont les atomes \mathbf{h}_k impliqués dans le signal observé, en d'autres termes le support Ω , ainsi que les amplitudes \mathbf{x} .

Dans la suite de ce chapitre, nous nous plaçons dans le cadre général d'un dictionnaire qui peut dépendre des hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}$. Toutefois, afin d'alléger les notations, la dépendance en les hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}$ ne sera pas explicitée et nous noterons \mathbf{H} et \mathbf{h}_k au lieu de $\mathbf{H}(\boldsymbol{\nu})$ et $\mathbf{h}_k(\boldsymbol{\nu}_k)$ respectivement.

3.1 *L'a priori* Bernoulli mélange de gaussiennes

Nous proposons de modéliser *l'a priori* de parcimonie par un modèle Bernoulli mélange de gaussiennes (BMG). Le BMG est un *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} où la distribution \mathcal{D} est une loi de mélange de gaussiennes LSMG. Cependant, contrairement à la définition que nous avons donnée dans le Chapitre 1 (équations (1.11) et (1.12)) la définition du BMG fait explicitement apparaître des variables auxiliaires additionnelles qui correspondent aux variables de mélange de la distribution \mathcal{D} . Le BMG est défini comme suit :

- (a) Les variables de Bernoulli (binaires) q_k sont considérées *indépendantes et identiquement distribuées* (i.i.d.) suivant une loi de Bernoulli de paramètre λ :

$$\forall k \in \llbracket 1; K \rrbracket, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda) \implies \begin{cases} \Pr(q_k = 1) & = \lambda \\ \Pr(q_k = 0) & = 1 - \lambda \end{cases} \quad (3.2)$$

où l'hyper-paramètre $\lambda \in [0, 1]$ est la probabilité d'avoir $q_k = 1$.

- (b) Les amplitudes x_k ainsi que les variables de mélange w_k sont définies conditionnellement à q_k comme suit :

$$\begin{aligned} \text{quand } q_k = 1, & \begin{cases} w_k \sim p_W(w_k; \boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x)) \\ x_k | w_k \sim \mathcal{N}(\mu\sigma_x + w_k\beta/\sigma_x, w_k), \end{cases} \\ \text{quand } q_k = 0, & \quad x_k = 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

où σ_x est un paramètre d'échelle des amplitudes $x_k | q_k = 1$.

Remarque 4. Notons que contrairement aux amplitudes x_k qui sont nulles si les variables de Bernoulli sont nulles, les variables de mélange w_k ne sont définies que si $q_k = 1$.

En d'autres termes, $x_k | q_k = 1$ est distribué suivant une loi LSMG où $p_W(w_k; \boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x))$ est la densité de probabilité des variables de mélange w_k de paramètres $\boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x)$, avec :

- $\beta \in \mathbb{R}$ paramètre d'asymétrie de $p(x_k | q_k = 1)$ (ou paramètre de l'approximation ELSA),
- $\mu \in \mathbb{R}$ paramètre de localisation de $p(x_k | q_k = 1)$ (ou paramètre de l'approximation ELSA),

- $\sigma_x > 0$ paramètre d'échelle de $p(x_k|q_k = 1)$ introduit par transformation linéaire (voir plus loin),
- $\boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x)$ vecteur de paramètres de forme de la loi des variables de mélange p_W . $\boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x)$ dépend du paramètre d'échelle σ_x par le biais de l'application $T_a(\cdot)$ associée à la transformation linéaire de la densité de mélange (voir Proposition 3-(iii) p. 45) : $\boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x) = T_{\sigma_x^2}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}_w)$ où $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_w$ est un vecteur de paramètres de forme de référence (dans le cas d'une approximation ELSA $\tilde{\boldsymbol{\theta}}_w$ est le vecteur de paramètres de la loi cible).

Afin de mieux comprendre le rôle de chacun des paramètres de ce modèle nous donnons ci-dessous sa représentation stochastique :

$$\begin{aligned} \text{quand } q_k = 1, \quad x_k &= \left(\sigma_x \mu + \frac{\beta}{\sigma_x} w_k + \sqrt{w_k} z_k \right), \\ \text{quand } q_k = 0, \quad x_k &= 0 \end{aligned}$$

où $z_k \sim \mathcal{N}(0, 1)$ est indépendant de $w_k \sim p_W(w_k; \boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x))$. Moyennant quelques réarrangements il est simple de montrer que cette représentation est équivalente à :

$$\begin{aligned} \text{quand } q_k = 1, \quad x_k &= \sigma_x (\mu + \beta \tilde{w}_k + \sqrt{\tilde{w}_k} z_k), \\ \text{quand } q_k = 0, \quad x_k &= 0 \end{aligned}$$

où $\tilde{w}_k \sim p_W(w_k; \tilde{\boldsymbol{\theta}}_w)$. Clairement, quand $q_k = 1$ l'amplitude x_k est une variable aléatoire LSMG de paramètre d'asymétrie $\beta \in \mathbb{R}$ et de paramètre de localisation $\mu \in \mathbb{R}$ où σ_x est un paramètre d'échelle introduit par transformation linéaire.

La prise en compte d'un paramètre d'échelle dans le cas des modèles *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} est en effet nécessaire, en particulier dans le cadre non supervisée quand aucune information sur l'échelle des amplitudes n'est disponible. Dans les *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} classiques, les lois prises en compte font explicitement apparaître un paramètre d'échelle dans leur paramétrisation usuelle : la variance de la gaussienne pour le Bernoulli-Gaussien ou le paramètre d'échelle de la loi de Laplace pour le Bernoulli-Laplace. Toutefois, dans la paramétrisation classique des lois LSMG un tel paramètre d'échelle explicite n'existe pas. De ce fait, nous avons fait le choix d'introduire le paramètre d'échelle σ_x dans le BMG par le biais d'une transformation linéaire.

Remarque. Rappelons que dans le cas d'une approximation ELSA, les Propositions 3-(iv) et 3-(v) p. 44 nous garantissent que la qualité de l'approximation est invariante par rapport à σ_x .

Finalement, il est important de distinguer les hyper-paramètres de forme du modèle BMG, β, μ et $\boldsymbol{\theta}_w$ qui permettent de déterminer la nature de la densité LSMG, et les hyper-paramètres λ et σ_x qui permettent de déterminer la parcimonie et l'échelle des amplitudes \mathbf{x} respectivement. Dans la suite de ce chapitre les hyper-paramètres de forme (β, μ et $\boldsymbol{\theta}_w$) sont considérés connus et fixés, alors que λ et σ_x sont inconnus et estimés avec le reste des paramètres. Dans la Table 3.1 nous donnons quelques exemples de paramétrisation du BMG avec la représentation Bernoulli- \mathcal{D} correspondante.

Densité de probabilité du modèle BMG. La densité de probabilité associée à l'*a priori* défini par (3.2) et (3.3) est donnée par¹ :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}) = \lambda^L \prod_{k \in \Omega} G(x_k; \mu \sigma_x + w_k \beta / \sigma_x, w_k) p_W(w_k) (1 - \lambda)^{K-L} \prod_{k \notin \Omega} \delta_0(x_k) \quad (3.4)$$

où $L = \|\mathbf{x}\|_0 = \sum_k q_k$ et $\delta_0(\cdot)$ est la distribution de Dirac. Clairement, la marginale de (3.4)

¹Pour simplifier les notations, dans la suite du manuscrit la dépendance de $p_W(w_k; \boldsymbol{\theta}_w(\sigma_x))$ en les paramètres $\boldsymbol{\theta}_w$ sera omise et nous noterons simplement $p_W(w_k)$. Par ailleurs, comme p_W est la densité de probabilité d'une loi quelconque, p_W représentera à la fois la densité et la distribution de la variable w_k .

TABLE 3.1 : Exemples de paramétrisation de l'*a priori* BMG et leur représentation Bernoulli- \mathcal{D} correspondante. Les variables q_k sont distribuées suivant (3.2) et $x_k|q_k = 0 \sim \delta_0(x_k)$.

	<i>A priori</i>	Paramétrisation BMG	Représentation Bernoulli- \mathcal{D}
Exact	Bernoulli-Laplace	$\begin{cases} w_k \sim \mathcal{E}(\frac{1}{2\sigma_x^2}) \\ \beta = 0, \mu \in \mathbb{R} \end{cases}$	$x_k q_k = 1 \sim \mathcal{L}(\mu, \sigma_x)$
	Bernoulli-Cauchy	$\begin{cases} w_k \sim \text{IG}(\frac{1}{2}, \frac{\sigma_x^2}{2}) \\ \beta = 0, \mu \in \mathbb{R} \end{cases}$	$x_k q_k = 1 \sim \mathcal{C}(\mu, \sigma_x)$
ELSA	Bernoulli-Exponentiel ²	$\begin{cases} w_k \sim \mathcal{E}(\frac{\beta}{\sigma_x^2}) \\ \beta > 0, \mu = 0 \end{cases}$	$x_k q_k = 1 \sim \mathcal{E}(\sigma_x^{-1})$, quand $\beta \rightarrow \infty$
	Bernoulli-TG ³	$\begin{cases} w_k \sim \mathcal{N}^+(0, \frac{\sigma_x^4}{\beta^2}) \\ \beta > 0, \mu = 0 \end{cases}$	$x_k q_k = 1 \sim \mathcal{N}^+(0, \sigma_x^2)$, quand $\beta \rightarrow \infty$

par rapport à $\mathbf{w} = \{w_k|k \in \Omega\}$ est un *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} où les amplitudes x_k sont distribuées suivant une loi LSMG. L'*a priori* donné dans (3.4) peut être mis sous la forme vectorielle suivante :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}) = \underbrace{\text{G}(\bar{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\mu}_x, \mathbf{W})}_{p(\bar{\mathbf{x}}|\mathbf{q}, \mathbf{w}, \sigma_x)} \underbrace{\delta_0(\bar{\mathbf{x}}^C)}_{p(\bar{\mathbf{x}}^C|\mathbf{q})} \underbrace{p_W(\mathbf{w})}_{p(\mathbf{w}|\mathbf{q}, \sigma_x)} \underbrace{\lambda^L(1-\lambda)^{K-L}}_{P(\mathbf{q}|\lambda)} \quad (3.5)$$

où $\bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^L$ regroupe toutes les amplitudes non nulles *i.e.*, $\bar{\mathbf{x}} = \{x_k|k \in \Omega\}$ et sera désigné par *amplitudes réduites* par la suite, $\bar{\mathbf{x}}^C$ et le complément de $\bar{\mathbf{x}}$ (c'est-à-dire que $\bar{\mathbf{x}}^C$ regroupent les amplitudes nulles) et $\mathbf{w} = \{w_k|k \in \Omega\}$. Le vecteur $\boldsymbol{\mu}_x \in \mathbb{R}^L$ et la matrice $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{K \times K}$ représentent la moyenne et la variance *a priori* de $\mathbf{x}|\mathbf{q}, \mathbf{w}$ respectivement :

$$\boldsymbol{\mu}_x = \sigma_x \mathbf{1}_L + \mathbf{w}\beta/\sigma_x, \quad (3.6)$$

$$\mathbf{W} = \text{diag}\{\mathbf{w}\}. \quad (3.7)$$

Finalement, p_W est la loi *a priori* jointe des variables de mélange $\mathbf{w} \in \mathbb{R}_+^L$ telle que

$$p_W(\mathbf{w}) = \prod_{k \in \Omega} p_W(w_k).$$

3.2 Loix *a posteriori* et marginalisation

Comme précisé dans le Chapitre 1 nous considérons ici que le bruit additif $\boldsymbol{\epsilon}$ est distribué suivant une loi gaussienne centrée de matrice de covariance $\boldsymbol{\Sigma}$. Cela implique que la loi *a posteriori* des paramètres s'écrit via la règle de Bayes comme suit :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = (2\pi)^{-N/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{q}|\sigma_x, \lambda) p(\boldsymbol{\theta}) \quad (3.8)$$

où $\bar{\mathbf{H}}$ regroupe les colonnes \mathbf{h}_k tel que $k \in \Omega$, $p(\boldsymbol{\theta})$ est l'*a priori* sur les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta} = \{\lambda, \boldsymbol{\Sigma}, \sigma_x\}$ et $\|\mathbf{v}\|_{\mathbf{A}}^2 = \mathbf{v}^T \mathbf{A} \mathbf{v}$.

²À partir de l'exemple donné dans la section 2.3.3.

³À partir de l'exemple donné dans la section 2.3.2.

3.2.1 Loi *a posteriori* conditionnelle des amplitudes \mathbf{x}

À partir de la loi *a posteriori* (3.8), on montre (voir Annexe B.2) que la loi *a posteriori* conditionnelle des amplitudes réduites $\bar{\mathbf{x}}|\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}$ est une gaussienne de moyenne $\boldsymbol{\eta}$ et matrice de covariance $\boldsymbol{\Gamma}$ telle que

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\eta} &= \boldsymbol{\Gamma}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{y} + \boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x, & (L \times 1) \\ \boldsymbol{\Gamma} &= \left(\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}} + \mathbf{W}^{-1}\right)^{-1}. & (L \times L)\end{aligned}$$

Par ailleurs, le vecteur complémentaire $\bar{\mathbf{x}}^C$ est un vecteur nul, car les variables de Bernoulli associées sont toutes nulles, *i.e.*, $\bar{\mathbf{x}}^C = \mathbf{0}$.

3.2.2 Loi *a posteriori* marginalisée par rapport à \mathbf{x}

Comme la loi *a posteriori* conditionnelle des amplitudes réduites est gaussienne, l'expression de la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux amplitudes s'obtient simplement en remplaçant l'intégrale par la constante de normalisation de cette gaussienne, ainsi nous avons (voir Annexe B.3 pour les détails des calculs) :

$$\begin{aligned}p(\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) &= \int p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) d\mathbf{x} \\ &\propto |\mathbf{B}|^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{y}^T\mathbf{B}^{-1}\mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}_x^T\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x - 2\mathbf{y}^T\mathbf{D}\boldsymbol{\mu}_x)\right) p(\mathbf{w}|\mathbf{q})P(\mathbf{q}|\lambda)p(\boldsymbol{\theta})\end{aligned}\quad (3.9)$$

où les matrices \mathbf{B}^{-1} , \mathbf{C}^{-1} et \mathbf{D} , de dimensions $N \times N$, $L \times L$ et $N \times L$ respectivement, sont définies par :

$$\mathbf{B}^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}, \quad (3.10)$$

$$\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{W}^{-1} - \mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}, \quad (3.11)$$

$$\mathbf{D} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}. \quad (3.12)$$

Ces matrices jouent un rôle central dans cette expression de la loi *a posteriori* marginalisée. En effet, elles dépendent de la matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$, du dictionnaire réduit $\bar{\mathbf{H}}$ et de \mathbf{W} (soit explicitement, soit à travers la matrice de covariance *a posteriori* des amplitudes réduites $\boldsymbol{\Gamma}$). De plus notons que ces matrices dépendent implicitement des variables de Bernoulli \mathbf{q} à travers le dictionnaire réduit $\bar{\mathbf{H}}$ de dimension $N \times L$ et de la matrice $\boldsymbol{\Gamma}$ de dimension $L \times L$, où $L = \|\mathbf{q}\|_0$ représente le nombre d'atomes présents dans $\bar{\mathbf{H}}$.

3.2.3 Loi *a posteriori* des hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$

Dans le cadre non supervisé, les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta} = \{\lambda, \boldsymbol{\Sigma}, \sigma_x\}$ sont inconnus, il est donc nécessaire de les échantillonner avec le reste des paramètres. Le choix de la loi *a priori* $p(\boldsymbol{\theta})$ peut bien évidemment affecter le comportement de l'échantillonneur. En l'absence d'information sur les hyper-paramètres, on choisit des lois *a priori* non informatives et si possible conjuguées à la loi *a posteriori* afin qu'elles puissent être échantillonnées aisément dans le cadre du PCGS. Ici nous considérons que les hyper-paramètres λ , $\boldsymbol{\Sigma}$ et σ_x sont indépendants (*i.e.*, $p(\boldsymbol{\theta}) = p(\lambda)p(\boldsymbol{\Sigma})p(\sigma_x)$), et le choix de ces lois *a priori* est détaillé ci-dessous.

Hyper-paramètre λ . Le paramètre λ est la probabilité *a priori* que la variable de Bernoulli q_k soit égale à 1. Plus λ est faible, plus la solution est *a priori* parcimonieuse et vice-versa. Ce paramètre permet donc de régler *a priori* la parcimonie de la solution. La loi *a posteriori* conditionnelle de λ est donnée par :

$$p(\lambda|\mathbf{y}, \mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{-\lambda}) \propto \lambda^L (1 - \lambda)^{K-L} p(\lambda) \quad (3.13)$$

La loi *a priori* conjuguée à la loi *a posteriori* $p(\lambda|\mathbf{y}, \mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{-\lambda})$ est la loi Beta, $\lambda \sim \mathcal{B}e(\alpha_\lambda, \beta_\lambda)$. Le cas $\alpha_\lambda = \beta_\lambda = 1$ correspond au cas uniforme sur $]0; 1[$ (*a priori* non informatif). Si α_λ est grand, les valeurs proches de 1 sont favorisées, alors que les grandes valeurs de β_λ favorisent plutôt les valeurs proches de 0. Une première intuition serait donc de considérer une paramétrisation favorisant la parcimonie, et donc des λ de valeurs faibles. Cependant, dans [Bou19, Chapitre 3] il a été montré empiriquement que la prise en compte d'un *a priori* non informatif sur l'hyper-paramètre λ permet une exploration plus efficace de la loi *a posteriori*. En effet, la prise en compte de l'*a priori* non informatif engendre une phase initiale (durant la période de chauffe ou *Burn-in period*) à faible parcimonie qui permet en pratique une exploration rapide des différentes combinaisons des variables de Bernoulli \mathbf{q} et donc une convergence plus rapide, en termes de nombre d'itérations, vers la loi cible. Dans ce cas la loi *a posteriori* conditionnelle de λ est :

$$\lambda|\mathbf{q} \sim \mathcal{B}e(L + 1, K - L + 1)$$

Notons que $\lambda|\mathbf{q}$ est indépendant de \mathbf{x} et \mathbf{w} , et par conséquent de p_W , μ , β et du paramètre d'échelle σ_x .

Covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$. La loi *a posteriori* conditionnelle de la matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$ s'écrit :

$$p(\boldsymbol{\Sigma}|\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\boldsymbol{\Sigma}}) \propto |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \overline{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\boldsymbol{\Sigma}) \quad (3.14)$$

L'échantillonnage de cette loi est une tâche délicate, puisqu'il s'agit d'une matrice de dimension $N \times N$. Cependant, dans le cas d'un bruit i.i.d la matrice de covariance s'écrit $\boldsymbol{\Sigma} = \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_N$ et dépend uniquement d'un paramètre scalaire σ_ϵ^2 . Dans ce cas on privilégie une loi *a priori* conjuguée Inverse-Gamma $\sigma_\epsilon^2 \sim \text{IG}(\alpha_\epsilon, \beta_\epsilon)$ telle que la loi *a posteriori* conditionnelle est, elle aussi, une loi Inverse-Gamma :

$$p(\sigma_\epsilon^2|\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_\epsilon^2}) \propto \frac{1}{(\sigma_\epsilon^2)^{\alpha_\epsilon + N/2 + 1}} \exp\left(-\left(\beta_\epsilon + \frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2\right) \frac{1}{\sigma_\epsilon^2}\right) \quad (3.15)$$

Dans la littérature le réglage $\alpha_\epsilon = \beta_\epsilon = 0$ est couramment utilisé. Celui-ci correspond à un *a priori* non informatif de *Jeffreys*, $p(\sigma_\epsilon^2) \propto \sigma_\epsilon^{-2}$. Toutefois, nous recommandons d'utiliser une loi Inverse-Gamma non-dégénérée ($\alpha_\epsilon, \beta_\epsilon > 0$) car l'*a priori* de *Jeffreys* peut causer certaines instabilités numériques lors de l'échantillonnage de σ_ϵ en particulier pour des problèmes avec un rapport signal sur bruit (RSB) élevé. En effet, si $\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2$ est proche de zéro, la loi *a posteriori* conditionnelle de σ_ϵ (3.15) devient une loi de *Jeffreys* et donc dégénérée. Nous avons donc fait le choix de fixer $\alpha_\epsilon = \beta_\epsilon = 1$, tel que la loi *a posteriori* conditionnelle de σ_ϵ soit :

$$\sigma_\epsilon^2|\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_\epsilon^2} \sim \text{IG}\left(\frac{N}{2} + 1, \frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 + 1\right)$$

Finalement, la matrice de covariance $\boldsymbol{\Sigma}$ (ou σ_ϵ^2 dans le cas i.i.d) dépend de \mathbf{x} à travers la vraisemblance, ce qui implique que son échantillonnage est indépendant du choix de p_W , μ , β et du paramètre d'échelle σ_x .

Hyper-paramètre d'échelle σ_x . Compte tenu du fait que l'hyper-paramètre σ_x est lié directement à l'*a priori* des amplitudes \mathbf{x} et donc à p_W , il n'est pas évident d'établir un cadre général pour son échantillonnage. Suivant le choix de l'*a priori* des amplitudes \mathbf{x} , il est parfois possible de trouver un *a priori* conjugué à la loi *a posteriori* $p(\sigma_x|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y})$, permettant ainsi l'échantillonnage direct de σ_x . Par exemple, Si $\mu = \beta = 0$ et que p_W est une loi de la famille GIG, alors la loi *a posteriori* conditionnelle de σ_x est également de la famille GIG. Dans ce cas, un choix classique pour l'*a priori* $p(\sigma_x)$ serait l'*a priori* non informatif $\text{IG}(1, 1)$ (rappelez que la loi Inverse Gamma est une loi de la famille GIG). Cependant, dans certains cas, la loi *a posteriori* conditionnelle $p(\sigma_x|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y})$ n'est pas une loi de probabilité usuelle et ne peut être échantillonnée directement. Nous utiliserons alors une étape de Métropolis-Hasting à marche aléatoire (RWMH) avec une loi de proposition à support positif (*e.g.*, loi gaussienne tronquée).

Notons que l'échantillonnage du paramètre d'échelle σ_x , peut également se faire à partir de la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux variables de mélange \mathbf{w} . En effet, on peut écrire :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) &= \int p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) d\mathbf{w}, \\ &= (2\pi)^{-N/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \overline{\mathbf{H}\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \int p(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{q}|\sigma_x, \lambda) d\mathbf{w} p(\boldsymbol{\theta}), \\ &= (2\pi)^{-N/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \overline{\mathbf{H}\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x}, \mathbf{q}|\sigma_x, \lambda) p(\boldsymbol{\theta}), \\ &= (2\pi)^{-N/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \overline{\mathbf{H}\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x}|\mathbf{q}, \sigma_x) P(\mathbf{q}, \lambda) p(\boldsymbol{\theta}), \end{aligned}$$

et donc la loi *a posteriori* conditionnelle du paramètre d'échelle σ_x est :

$$p(\sigma_x|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}) \propto p(\mathbf{x}|\mathbf{q}, \sigma_x) p(\sigma_x). \quad (3.16)$$

Cette stratégie de marginalisation est intéressante car elle permet de supprimer les interactions entre σ_x et les variables de mélanges \mathbf{w} , ce qui permet d'avoir un échantillonnage plus efficace du paramètre d'échelle σ_x . Évidemment, pour que cette approche puisse être mise en œuvre, il est nécessaire d'avoir l'expression analytique de la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux variables de mélange. Notons que dans ce cas, l'échantillonnage du paramètre d'échelle σ_x à partir de (3.16) est identique à son échantillonnage dans le cadre d'un échantillonneur de Gibbs classique.

3.3 Échantillonneur PCGS pour le modèle Bernoulli mélange de gaussiennes

Maintenant que nous avons les expressions des différentes lois *a posteriori* conditionnelles, nous proposons dans cette section un échantillonneur PCGS pour le modèle *a priori* BMG. La stratégie d'échantillonnage que nous avons adoptée est résumée dans l'Algorithme 3.1, que l'on peut scinder en trois étapes principales.

- La première étape consiste, pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$, à échantillonner conjointement la variable de Bernoulli q_k et la variable de mélange w_k à partir de leur loi conditionnelle obtenue à partir de loi *a posteriori* marginalisée (3.9).
- La seconde étape consiste à échantillonner conjointement les amplitudes \mathbf{x} conditionnellement à \mathbf{q} et \mathbf{w} à partir d'une loi gaussienne multidimensionnelle (de dimension L).

3.3. Échantillonneur PCGS pour le modèle Bernoulli mélange de gaussiennes

- La troisième étape est l'échantillonnage des hyper-paramètres comme expliqué dans la section 3.2.3.

Par ailleurs, les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$ sont initialisés à partir de leur loi *a priori* tandis que \mathbf{q} est fixé au vecteur nul (ce qui implique que $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{w} = \emptyset$).

Algorithme 3.1 Échantillonneur PCGS du modèle *a priori* BMG

— Initialisation :

- Modèle : définir p_W, β , et μ ,
- Algorithme : $\mathbf{q} = \mathbf{x} = \mathbf{0}$, $\mathbf{w} = \emptyset$ et $\boldsymbol{\theta} \sim p(\boldsymbol{\theta})$.

A chaque itération ($t + 1$) faire :

- tirer $(\mathbf{q}^{(t+1)}, \mathbf{w}^{(t+1)})$:
 Pour chaque $k \in \llbracket 1; K \rrbracket$ tirer conjointement $(q_k^{(t+1)}, w_k^{(t+1)})$:
 — $q_k, w_k | \mathbf{q}_{-k}, \mathbf{w}_{-k}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y} \sim p(q_k, w_k | \mathbf{q}_{-k}, \mathbf{w}_{-k}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})$, étape RJ-MCMC (voir Algorithme 3.2).
 - tirer $\mathbf{x}^{(t+1)}$ conjointement :
 — $\bar{\mathbf{x}} | \mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Gamma})$, et $\bar{\mathbf{x}}^C = \mathbf{0}$.
 - tirer $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}$:
 (a) $\lambda | \mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\lambda}, \mathbf{y} \sim \mathcal{B}e(L + 1, K - L + 1)$,
 (b) $\sigma_\epsilon | \mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_\epsilon}, \mathbf{y} \sim \text{IG}\left(\frac{N}{2} + 1, \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}\|^2 + 1\right)$,
 ou $\boldsymbol{\Sigma} | \mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\boldsymbol{\Sigma}}, \mathbf{y} \sim p(\boldsymbol{\Sigma} | \mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\boldsymbol{\Sigma}})$ à partir de (3.14),
 (c) $\sigma_x | \mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y}$ ou $\sigma_x | \mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y}$, suivant le choix de p_W .
-

Échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) par RJMCMC. Étant donné que la loi *a posteriori* marginalisée (3.9) n'est pas une loi usuelle en q_k et w_k , celle-ci ne peut pas être échantillonnée directement. Par ailleurs, comme la variable de mélange w_k est définie uniquement quand $q_k = 1$, la loi *a posteriori* (jointe $p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y})$ ou marginalisée $p(\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y})$) est définie dans un espace à dimension variable, car $\mathbf{w} \in \mathbb{R}_+^L$ où $L = \|\mathbf{q}\|$. Par conséquent, nous utilisons une étape de MCMC à sauts réversibles ou *Reversible Jump MCMC* (RJMCMC) [Gre95] pour l'échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) . Dans la suite de cette section, nous allons détailler la stratégie RJMCMC que nous avons adoptée pour l'échantillonneur PCGS du modèle *a priori* BMG.

Stratégie Reversible Jump MCMC adoptée. Pour l'échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) nous avons deux états possibles :

- L'état $u = 1$ correspond à $q_k = 1$ et $w_k \in \mathbb{R}_+$,
- l'état $u = 0$ correspond à $q_k = 0$ et w_k n'est pas définie.

Dans le cadre du RJMCMC, le passage d'un état vers un autre est appelé « *saut* » (d'où le nom sauts réversibles). Pour notre échantillonneur, passer d'un état u à un autre état u' est effectué en utilisant l'un des « sauts » suivants⁴ :

- Naissance* : passage d'un état $u = 0$ avec $q_k = 0$ vers $u' = 1$ avec $(q'_k = 1, w'_k)$.
- Mort* : passage d'un état $u = 1$ avec $(q_k = 1, w_k)$ vers $u' = 0$ avec $q'_k = 0$.

⁴Notons que le passage d'un état $u = 0$ vers $u' = 0$ est sans intérêt, car c'est un saut trivial qui est toujours accepté mais n'apporte aucune information supplémentaire et la chaîne de Markov reste inchangée.

3. *Mise à jour* : passage d'un état $u = 1$ avec $(q_k = 1, w_k)$ vers $u' = 1$ avec $(q'_k = 1, w'_k)$.

Cette étape d'échantillonnage par RJ-MCMC peut être vue comme une généralisation de l'algorithme Metropolis-Hastings pour des densités définies dans des espaces de dimensions différentes. Plus précisément, à partir d'un état courant u un nouvel état u' est proposé, puis celui-ci est soit acceptée et le saut de u vers u' est effectué, soit u' est rejeté et l'état suivant correspond à u . Notons que dans le cas d'une *Mise à jour*, l'étape RJ-MCMC est équivalente à une étape de Metropolis-Hastings car les dimensions sont identiques comme on passe d'un état $u = 1$ (avec $(q_k = 1, w_k)$) vers $u' = 1$ (avec $(q'_k = 1, w'_k)$).

Dans la suite, nous notons par $p_{uu'}$ la probabilité de proposer l'état u' quand l'état courant est u . Comme nous avons fait le choix de proposer systématiquement une *Naissance* quand $u = 0$ alors $p_{01} = 1$. Par ailleurs, si l'état courant est $u = 1$ alors un choix naturel est de proposer soit une *Mort* soit une *Mise à jour* de manière équiprobable, donc $p_{10} = p_{11} = 1/2$. Les candidats w'_k sont proposés par les lois de propositions $q_{uu'}(w_k)$ définies comme suit :

- *Naissance* : le choix naturel ici est de prendre la loi *a priori* p_W comme loi de proposition pour w'_k , donc $q_{01}(w_k) = p_W(w_k)$.
- *Mort* : dans ce cas la proposition est déterministe comme en passe de $w_k \in \mathbb{R}_+$ vers un état où w_k n'est plus définie. Cette proposition est autorisée par le cadre RJ-MCMC (pour plus de détails voir [WS01, Remarque 4.2]).
- *Mise à jour* : ici, un mélange, équiprobable, de deux propositions est considéré. La première proposition consiste à tirer w'_k à partir de sa loi *a priori* $q_{11}^{(1)}(w'_k) = p_W(w'_k)$ indépendante de w_k , permettant une exploration de l'ensemble du domaine de w_k . La seconde proposition est faite par une étape de Metropolis-Hastings à marche aléatoire (RWMH) avec comme loi de proposition une gaussienne positive $q_{11}^{(2)}(w'_k) = d_{\mathcal{N}^+(w_k, \rho_{rw}^2)}(w'_k)$, qui permet une exploration locale de la loi *a posteriori* [BC06, AD99]. Le paramètre ρ_w^2 est fixé empiriquement tel que le taux d'acceptation des propositions soit de l'ordre de 30% [RR01].

Afin de garantir la réversibilité et l'invariance de la chaîne de Markov vis-à-vis de la loi *a posteriori* [WS01, Gre95], les candidats proposés sont ensuite acceptés avec la probabilité d'acceptation $\alpha_{uu'} = \min\{1, r_{uu'}\}$, avec :

$$\begin{aligned} r_{01} &= \frac{p(\mathbf{q}', \mathbf{w}' | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) p_{10}}{p(\mathbf{q}, \mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) p_{01} q_{01}(w'_k)}, \\ r_{10} &= \frac{p(\mathbf{q}', \mathbf{w}' | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) p_{01} q_{01}(w'_k)}{p(\mathbf{q}, \mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) p_{10}}, \\ r_{11}^{(1)} &= \frac{p(\mathbf{q}', \mathbf{w}' | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) q_{11}^{(1)}(w_k)}{p(\mathbf{q}, \mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) q_{11}^{(1)}(w'_k)}, \\ r_{11}^{(2)} &= \frac{p(\mathbf{w}' | \mathbf{q}', \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) \zeta(w_k)}{p(\mathbf{w} | \mathbf{q}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) \zeta(w'_k)} \end{aligned}$$

où \mathbf{q}' et \mathbf{w}' correspondent aux vecteurs \mathbf{q} et \mathbf{w} dont le k -ième élément a été modifié suivant l'état proposé u' , et⁵

$$\zeta(w) = 1 + \operatorname{erf} \left(\frac{w}{\sqrt{2}\rho_{rw}} \right).$$

Cette stratégie d'échantillonnage RJ-MCMC est résumée dans l'Algorithme 3.2.

⁵La fonction ζ résulte du choix de la loi de proposition $q_{11} \sim d_{\mathcal{N}^+(w_k, \rho_{rw}^2)}(w'_k)$.

Algorithme 3.2 Étape RJ-MCMC pour l'échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) .

Si $q_k = 0$: proposer une *Naissance* :

- (a) $q'_k = 1, w_k \sim q_{01}(w'_k)$ (proposition de w'_k à partir de la loi *a priori*),
- (b) Accepter la proposition avec la probabilité α_{01} .

Sinon

Avec une probabilité $p_{10} = 1/2$, proposer une *Mort* :

- (a) $q'_k = 0$ (proposition déterministe de w_k),
- (b) Accepter la proposition avec la probabilité α_{10} .

Avec une probabilité $p_{11} = 1/2$, proposer une *Mise à jour* :

- (a) avec une probabilité $p_{11}^{(1)} = 1/2$ proposer $q'_k = 1, w_k \sim q_{11}^{(1)}$ (loi *a priori* de w_k)
 - (b) avec une probabilité $p_{11}^{(2)} = 1 - p_{11}^{(1)}$ proposer $q'_k = 1, w_k \sim q_{11}^{(2)}$ (RWMH),
 - (c) Accepter la proposition avec la probabilité $\alpha_{11}^{(i)}$.
-

Expression des probabilités d'acceptation $\alpha_{uu'}$. Nous donnons ici les expressions explicites des probabilités d'acceptation associées à chaque proposition. Dans le but de simplifier les notations, on introduit les éléments suivants :

$$\psi(\mathbf{P}, \mathbf{Q}; \mathbf{y}) = \ln \left(\frac{|\mathbf{Q}|}{|\mathbf{P}|} \right) + \mathbf{y}^T (\mathbf{Q} - \mathbf{P}) \mathbf{y} \quad (3.17)$$

$$\phi_{(u)} = \boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \mathbf{C}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{D}_{(u)} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} \quad (3.18)$$

$$\chi_{uu'} = -2 \ln \left(\frac{P(q_k = u' | \lambda)}{P(q_k = u | \lambda)} \cdot \frac{p_{u'u}}{p_{uu'}} \right) \quad (3.19)$$

où pour une matrice (ou vecteur) \mathbf{A} quelconque, la notation $\mathbf{A}_{(0)}$ (resp. $\mathbf{A}_{(1)}$) correspond à la matrice \mathbf{A} où l'état $u = 0$ (resp. l'état $u = 1$). Rappelons l'expression de la loi *a posteriori* marginalisée de (\mathbf{q}, \mathbf{w}) conditionnelle en $\boldsymbol{\theta}$:

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{w} | \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) \propto |\mathbf{B}|^{-1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{y}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}_x^T \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\mu}_x - 2\mathbf{y}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\mu}_x) \right) p(\mathbf{w} | \mathbf{q}) P(\mathbf{q} | \lambda), \quad (3.20)$$

où les matrice \mathbf{B} , \mathbf{C} et \mathbf{D} sont définies en (3.10), (3.11) et (3.12) et le vecteur $\boldsymbol{\mu}$ en (3.6). Les expressions de $r_{uu'}$ s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} r_{01} &= \exp \left(-\frac{1}{2} (\chi_{01} + \psi(\mathbf{B}'_{(1)}, \mathbf{B}^{-1}_{(0)}; \mathbf{y}) + \phi'_1 - \phi_0) \right), \\ r_{10} &= \exp \left(-\frac{1}{2} (\chi_{10} + \psi(\mathbf{B}'_{(0)}, \mathbf{B}^{-1}_{(1)}; \mathbf{y}) + \phi'_0 - \phi_1) \right), \\ r_{11}^{(1)} &= \exp \left(-\frac{1}{2} (\psi(\mathbf{B}'_{(1)}, \mathbf{B}^{-1}_{(1)}; \mathbf{y}) + \phi'_1 - \phi_1) \right), \\ r_{11}^{(2)} &= \exp \left(-\frac{1}{2} (\psi(\mathbf{B}'_{(1)}, \mathbf{B}^{-1}_{(1)}; \mathbf{y}) + \phi'_1 - \phi_1) \right) \frac{p(w'_k) \zeta(w_k)}{p(w_k) \zeta(w'_k)}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

L'implémentation de l'étape RJMCMC directement à partir des expressions (3.21) est coûteuse en temps de calcul, car elle requiert l'inversion de plusieurs matrices, en particulier la matrice \mathbf{B} qui est de dimension $N \times N$. Pour résoudre ce problème, nous proposons une implémentation numérique efficace pour cette étape RJMCMC (Algorithme 3.2).

3.4 Implémentation efficace du PCGS

Afin d'obtenir à une implémentation efficace du PCGS (Algorithme 3.1), et en particulier de l'étape RJ-MCMC (Algorithme 3.2) pour l'échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) , nous présentons

des simplifications des expressions (3.21) inspirées des travaux de [GIL11, Bou19] développés dans le cadre du modèle Bernoulli-Gaussien, que nous avons adaptées et étendues au cas du modèle BMG.

Soulignons que les travaux de [Bou19] sont une extension de l'algorithme PCGS proposé par [GIL11] aux cas des atomes multidimensionnels *i.e.*, $\mathbf{h}_k \in \mathbb{R}^{N \times m}$ avec $m > 1$ qui n'est pas le cas des problèmes inverses parcimonieux traités dans ce manuscrit. Toutefois, certaines idées et conventions d'implémentation restent utilisables, ou facilement adaptables à nos problèmes.

3.4.1 Simplification de la fonction ψ

Dans le cas d'une *Naissance* ou d'une *Mort* l'expression de la fonction ψ apparaît sous la forme suivante⁶ (voir r_{01} et r_{10} de (3.21)) :

$$\psi(\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1}, \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}; \mathbf{y}) = \ln \left(\frac{|\mathbf{B}_{(1-q_k)}|}{|\mathbf{B}_{(q_k)}|} \right) + \mathbf{y}^T (\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1} - \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}) \mathbf{y}$$

avec

$$\mathbf{B}_{(u)}^{-1} = \Sigma^{-1} - \Sigma^{-1} \bar{\mathbf{H}}_{(u)} \Gamma_{(u)} \bar{\mathbf{H}}_{(u)}^T \Sigma^{-1}.$$

Afin de simplifier cette fonction ψ nous exploitons la proximité entre les matrices inverses $\mathbf{B}_{(1-q_k)}$ et $\mathbf{B}_{(q_k)}$. En effet, on peut montrer, en utilisant le lemme d'inversion matricielle (voir Annexe B.4.1 pour les détails des calculs) que

$$\mathbf{B}_{(1-q_k)} - \mathbf{B}_{(q_k)} = (-1)^{q_k} w_k \mathbf{h}_k \mathbf{h}_k^T. \quad (3.22)$$

En exploitant ce résultat nous montrons que (voir Annexe B.4.1) :

$$\mathbf{y}^T (\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1} - \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}) \mathbf{y} = -\gamma_{q_k}^2 / \rho_{q_k} \quad (3.23)$$

$$\frac{|\mathbf{B}_{(1-q_k)}|}{|\mathbf{B}_{(q_k)}|} = (-1)^{q_k} w_k \rho_{q_k} \quad (3.24)$$

où ρ_{q_k} et γ_{q_k} sont des scalaires définis par :

$$\begin{aligned} \rho_{q_k} &= (-1)^{q_k} w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k \\ \gamma_{q_k} &= \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{y} \end{aligned}$$

Nous déduisons que :

$$\psi(\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1}, \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}; \mathbf{y}) = \ln((-1)^{q_k} w_k \rho_{q_k}) - \gamma_{q_k}^2 / \rho_{q_k} \quad (3.25)$$

Notons que cette simplification est valide uniquement que dans le cas d'une *Naissance* ou d'une *Mort*. Toutefois, dans le cas d'une *Mise à jour*, on montre à partir de la définition de ϕ que :

$$\psi(\mathbf{B}'_{(1)}^{-1}, \mathbf{B}_{(1)}^{-1}; \mathbf{y}) = \psi(\mathbf{B}'_{(1)}^{-1}, \mathbf{B}_{(0)}^{-1}; \mathbf{y}) - \psi(\mathbf{B}_{(1)}^{-1}, \mathbf{B}_{(0)}^{-1}; \mathbf{y})$$

et donc,

$$\psi(\mathbf{B}'_{(1)}^{-1}, \mathbf{B}_{(1)}^{-1}; \mathbf{y}) = \ln(w'_k \rho'_0) - \gamma_0'^2 / \rho'_0 - (\ln(w_k \rho_0) - \gamma_0^2 / \rho_0). \quad (3.26)$$

Ainsi, l'évaluation de la fonction ψ se fait par le biais des entités scalaires ρ_{q_k} et γ_{q_k} , qui dépendent de la matrice $\mathbf{B}_{(q_k)}$ courante uniquement.

⁶ Afin de simplifier les notations, nous avons omis le prime qui indique la matrice associée à l'état proposé u' , car dans le cas d'une *Naissance* ou d'une *Mort* la distinction entre la matrice courante et la matrice associée à la proposition est évidente. La notation explicite $\mathbf{B}'_{(u)}$ sera utilisée uniquement quand nécessaire.

3.4.2 Factorisation de Cholesky

La manipulation de cette matrice \mathbf{B} (de dimension $N \times N$) reste une tâche coûteuse en termes de temps de calcul. Nous proposons de simplifier davantage l'évaluation de la fonction ψ grâce à la manipulation d'une matrice de facteur de Cholesky de dimension $L \times L$.

Soit la matrice \mathbf{G} de dimension $N \times L$ telle que $\mathbf{G} = \overline{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}$. Sachant que la matrice \mathbf{B} s'écrit (voir (B.13) p. 138 de l'Annexe B.3) :

$$\mathbf{B} = \Sigma + \overline{\mathbf{H}}\mathbf{W}\overline{\mathbf{H}}^T = \Sigma + \overline{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}(\overline{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}})^T,$$

alors

$$\mathbf{B} = \Sigma + \mathbf{G}\mathbf{G}^T \quad (3.27)$$

En appliquant le lemme d'inversion matricielle (voir Annexe B.4.2) nous avons :

$$\mathbf{B}^{-1} = \Sigma^{-1} - \Sigma^{-1}\mathbf{G}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{G}^T\Sigma^{-1}$$

où

$$\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{G}^T\Sigma^{-1}\mathbf{G} \quad (3.28)$$

est une matrice de taille $L \times L$. Par ailleurs, puisque \mathbf{S} est une matrice définie positive (la somme de \mathbf{I} une matrice définie positive et $\mathbf{G}^T\Sigma^{-1}\mathbf{G}$ une matrice semi-définie positive), \mathbf{S}^{-1} l'est également, on peut donc la décomposer en facteur de Cholesky :

$$\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{F}^T\mathbf{F} \quad (3.29)$$

avec \mathbf{F} une matrice triangulaire supérieure. On peut alors facilement montrer que les scalaires ρ_{q_k} et γ_{q_k} s'écrivent en fonction des matrices \mathbf{G} et \mathbf{F} comme suit :

$$\rho_{q_k} = (-1)^{q_k}w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T\Sigma^{-1}\mathbf{h}_k - (\mathbf{F}_{(q_k)}\mathbf{G}_{(q_k)}^T\Sigma^{-1}\mathbf{h}_k)^T(\mathbf{F}_{(q_k)}\mathbf{G}_{(q_k)}^T\Sigma^{-1}\mathbf{h}_k) \quad (3.30)$$

$$\gamma_{q_k} = \mathbf{h}_k^T\Sigma^{-1}\mathbf{y} - (\mathbf{F}_{(q_k)}\mathbf{G}_{(q_k)}^T\Sigma^{-1}\mathbf{h}_k)^T\mathbf{F}_{(q_k)}\mathbf{G}_{(q_k)}^T\Sigma^{-1}\mathbf{y} \quad (3.31)$$

Ainsi le calcul de ρ_{q_k} et γ_{q_k} et par conséquent l'évaluation de ψ se fait à travers les matrices \mathbf{F} et \mathbf{G} de dimension $L \times L$ et $N \times L$ respectivement au lieu de la matrice \mathbf{B}^{-1} dimension $N \times N$. Cependant, le calcul du facteur de Cholesky \mathbf{F} à partir de (3.29) nécessite de calculer et inverser la matrice \mathbf{S} . Une alternative intéressante consiste à mettre à jour directement les matrices \mathbf{G} et \mathbf{F} .

3.4.3 Mise à jour des matrices \mathbf{G} et \mathbf{F}

Nous allons voir dans cette section comment mettre à jour les matrices \mathbf{F} et \mathbf{G} de façon récursive ce qui permet d'éviter de calculer le facteur de Cholesky \mathbf{F} directement à partir de (3.29) à chaque fois qu'une proposition est acceptée.

Notons que comme on initialise l'échantillonneur PCGS avec $\mathbf{q}^{(0)} = \mathbf{0}_K$, les matrices \mathbf{F} et \mathbf{G} sont initialement des matrices vides.

Mise à jour de \mathbf{G} . La mise à jour de la matrice $\mathbf{G} = \overline{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}$ est directe quand une *Naissance* est acceptée : il suffit d'insérer l'atome $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$ dans la matrice \mathbf{G} . De façon similaire quand une *Mort* est acceptée l'atome $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$ doit être retiré de la matrice. L'ordre dans lequel sont empilés les atomes $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$ n'a aucun effet sur la valeur de la matrice \mathbf{B} et de ρ_{q_k} . Toutefois, il a une influence directe sur la matrice \mathbf{S} et donc sur \mathbf{F} . Il est donc nécessaire d'adopter une stratégie permettant de garder en mémoire l'ordre dans lequel les atomes sont stockés. Pour notre

échantillonneur PCGS nous avons fait le choix de travailler avec les conventions ci-dessous⁷, où \mathbf{G}_k représente la matrice $\mathbf{G}_{(1)}$ pour laquelle l'atome $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$ est dans la dernière colonne, c'est-à-dire $\mathbf{G}_k = [\mathbf{G}_{(0)} \quad \sqrt{w_k}\mathbf{h}_k]$.

- Si une *Naissance* est acceptée : l'atome est ajouté à la fin de la matrice \mathbf{G} :

$$\mathbf{G}_{(1)} = \mathbf{G}_k = [\mathbf{G}_{(0)} \quad \sqrt{w_k}\mathbf{h}_k]$$

Ceci implique, qu'il est nécessaire de garder en mémoire la position de chaque atome. Pour cela, on introduit le vecteur $\mathbf{o} = [o_1, \dots, o_K]$ tel que o_k est la position de l'atome $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$ dans la matrice \mathbf{G} . Alors, dans le cas d'une *Naissance* le vecteur \mathbf{o} est mis à jour comme suit : $o_k \leftarrow L + 1$, où L représente le nombre d'atomes déjà présents dans \mathbf{G} *i.e.*, le nombre de colonnes de \mathbf{G} .

- Si une *Mort* est acceptée : connaissant la position o_k de l'atome $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$, il peut être retiré de la matrice \mathbf{G} directement. Le vecteur \mathbf{o} doit être mis à jour en mettant $o_k = 0$ et pour tout i tel que $o_i > o_k$, $o_i \leftarrow o_i - 1$, c'est-à-dire tous les atomes positionnés après le k -ième atome sont décalés d'une position vers la gauche.

Mise à jour de \mathbf{F} dans le cas d'une *Naissance*. On note $\mathbf{S}_k = \mathbf{S}_{(1)}$ et $\mathbf{F}_k = \mathbf{F}_{(1)}$ si $\mathbf{G}_k = \mathbf{G}_{(0)}$ avec

$$\mathbf{F}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{11} & \mathbf{f}_{12} \\ \mathbf{0} & f_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.32)$$

où \mathbf{F}_{11} , \mathbf{f}_{12} et f_{22} sont une matrice triangulaire supérieure, un vecteur colonne et un scalaire respectivement. Lors d'une naissance, c'est-à-dire l'ajout d'un nouvel atome, on peut montrer que (voir Annexe B.4.3) :

$$\mathbf{F}_k^T \mathbf{F}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} \\ \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} + \rho_{(0)} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0^T & w_k^{-\frac{1}{2}} \mathbf{b}_0 \\ w_k^{-\frac{1}{2}} \mathbf{b}_0^T & w_k^{-1} / \rho_{(0)} \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

avec \mathbf{b}_0 un vecteur de dimension $L \times 1$ donnée par $\mathbf{b}_0 = -\mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)}^{-1} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \rho_0^{-1}$. À partir de (3.33) il est immédiat de montrer que (voir Annexe B.4.3) :

$$\mathbf{F}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)} = \bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} + \mathbf{v} \mathbf{v}^T \quad (3.34)$$

où

$$\bar{\mathbf{F}}_{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{(0)} & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & 0 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}} \\ w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}} \end{bmatrix}. \quad (3.35)$$

Ceci implique que la matrice $\mathbf{F}_{(1)}$ peut être calculée en utilisant une mise à jour de Cholesky d'ordre 1 que l'on symbolise par :

$$\mathbf{F}_{(1)} = \text{cholupdate}(\bar{\mathbf{F}}_{(0)}, \mathbf{v}, +). \quad (3.36)$$

Mise à jour de \mathbf{F} dans le cas d'une *Mort*. Dans le cas d'une *Mort* nous distinguons deux situations suivant que $\mathbf{G}_k = \mathbf{G}_{(1)}$ ou non, c'est-à-dire que l'atome traité est situé dans la dernière colonne de la matrice \mathbf{G} ou pas.

⁷Notons que nous avons utilisé les mêmes conventions que dans [Bou19].

Quand $\mathbf{G}_k = \mathbf{G}_{(1)}$ et donc $\mathbf{F}_k = \mathbf{F}_{(1)}$ la mise à jour est immédiate. À partir de (3.33) on déduit que :

$$\mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} = \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} - \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T.$$

On peut facilement montrer (voir Annexe B.4.4) que l'expression ci-dessus est équivalente à une mise à jour de Cholesky d'ordre 1 que l'on symbolise par :

$$\mathbf{F}_{(0)} = \text{cholupdate}(\mathbf{F}_{11}, \mathbf{v}_1, -) \quad (3.37)$$

où $\mathbf{v}_1 = \mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_0}$, avec ρ_0 et \mathbf{b}_0 calculés à partir de la matrice courante $\mathbf{F}_{(1)}$ ⁸ :

$$\rho_0 = w_k (\mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2) \quad (3.38)$$

$$\mathbf{b}_0 = \sqrt{w_k} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} \quad (3.39)$$

Dans le cas où $\mathbf{G}_k \neq \mathbf{G}_{(1)}$, avec $\mathbf{G}_{(1)} = [\mathbf{G}_l \quad \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k \quad \mathbf{G}_r]$, il est nécessaire d'introduire la matrice de permutation \mathbf{P} tel que :

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_r & \mathbf{0} \end{bmatrix} \text{ avec } \mathbf{G}_{(1)} \mathbf{P} = [\mathbf{G}_l \quad \mathbf{G}_r \quad \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k] = \mathbf{G}_k. \quad (3.40)$$

Il est ensuite immédiat de montrer (voir Annexe B.4.5) que :

$$\mathbf{F}_k^T \mathbf{F}_k = (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}). \quad (3.41)$$

Toutefois, $\mathbf{F}_k^T \neq \mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}$ car $\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}$ n'est pas une matrice triangulaire. Néanmoins, ceci nous permet d'extraire \mathbf{b}_0 et ρ_0 directement à partir de $\mathbf{F}_{(1)}$ et \mathbf{F}_{11} par le biais une mise à jour de Cholesky d'ordre 1 additionnelle.

En effet, si on pose⁹ :

$$\mathbf{F}_{(1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_l & \mathbf{f}_k & \mathbf{F}_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{f}_{lk} & \mathbf{F}_{lr} \\ \mathbf{0} & f_{kk} & \mathbf{f}_{kr} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{F}_{rr} \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

on peut montrer par identification (voir Annexe B.4.5) que :

$$\rho_0^{-1} = w_k \mathbf{f}_k^T \mathbf{f}_k \quad (3.43)$$

$$\mathbf{b}_0 = \sqrt{w_k} [\mathbf{F}_l \quad \mathbf{F}_r]^T \mathbf{f}_k \quad (3.44)$$

et

$$\mathbf{F}_{11} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{F}_{lr} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_* \end{bmatrix}, \text{ avec } \mathbf{F}_* = \text{cholupdate}(\mathbf{F}_{rr}, \mathbf{f}_{kr}^T, +) \quad (3.45)$$

Finalement, $\mathbf{F}_{(0)}$ est calculée en utilisant (3.37) où $\mathbf{v}_1 = \mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_0}$ est calculé à partir des expressions (3.43) et (3.44).

⁸Rappelons qu'on est dans le cas $\mathbf{F}_k = \mathbf{F}_{(1)}$ c'est-à-dire que la matrice courante est la matrice $\mathbf{F}_{(1)}$ et que $\mathbf{F}_{11}, \mathbf{f}_{12}$ et f_{22} sont données dans (3.32).

⁹Voir Annexe B.4.5 pour une définition détaillée des dimensions des sous-matrices.

Mise à jour de \mathbf{G} et \mathbf{F} dans le cas d'une *Mise à jour*. Dans le cas d'une *Mise à jour* (que ce soit avec la proposition $q_{11}^{(1)}$ ou $q_{11}^{(2)}$) les différentes matrices impliquées ne changent pas de dimension, seule la variable de mélange w_k est mise à jour. Alors que pour la matrice \mathbf{G} il suffit de remplacer l'atome $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$ par $\sqrt{w'_k}\mathbf{h}_k$, la mise à jour directe des matrices \mathbf{S} et \mathbf{F} n'est pas une tâche évidente. On propose alors, si l'étape de *mise à jour* est acceptée, de faire une *Mort* de l'atome concerné $\sqrt{w_k}\mathbf{h}_k$ puis une naissance avec le nouvel atome $\sqrt{w'_k}\mathbf{h}_k$.

3.4.4 Simplification de la fonction ϕ

Jusqu'à présent, la mise en œuvre récursive que nous avons vue n'implique que la matrice \mathbf{B} principalement à travers le facteur de Cholesky \mathbf{F} et la matrice \mathbf{G} . Le calcul de la fonction ϕ , qui dépend des matrices \mathbf{C}^{-1} et \mathbf{D} , peut également être simplifié en exploitant les résultats précédents.

Rappelons que l'expression de la fonction ϕ est donnée par :

$$\phi_{(u)} = \boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \mathbf{C}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{D}_{(u)} \boldsymbol{\mu}_{x(u)}$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{(u)}^{-1} &= \mathbf{W}_{(u)}^{-1} - \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\Gamma}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-1}, \\ \mathbf{D}_{(u)} &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_{(u)} \boldsymbol{\Gamma}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-1}, \\ \boldsymbol{\Gamma}_{(u)} &= \left(\bar{\mathbf{H}}_{(u)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_{(u)} + \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \right)^{-1}, \\ \boldsymbol{\mu}_{x(u)} &= \mu \sigma_x \mathbf{1} + \mathbf{w}_{(u)} \beta / \sigma_x. \end{aligned}$$

Remarque 5. Dans le cas d'un *a priori* avec $\beta = 0$ (i.e., *a priori* symétrique) et $\mu = 0$ (paramètre de décalage nul) nous avons directement $\phi = 0$ car $\boldsymbol{\mu}_x = 0$.

On montre (voir Annexe B.4.6) que la matrice de covariance $\boldsymbol{\Gamma}$ dépend de la matrice \mathbf{S} et peut donc se calculer à partir du facteur de Cholesky \mathbf{F} :

$$\boldsymbol{\Gamma}_{(u)} = \mathbf{W}_{(u)}^{\frac{1}{2}} \mathbf{S}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{W}_{(u)}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.46)$$

De ce fait, les matrices \mathbf{C}^{-1} et \mathbf{D} s'écrivent en fonction de \mathbf{F} :

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{(u)}^{-1} &= \mathbf{W}_{(u)}^{-1} - \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}}, \\ \mathbf{D}_{(u)} &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

et en exploitant la relation entre $\mathbf{F}_{(1)}$ et $\mathbf{F}_{(0)}$ on peut montrer (voir Annexe B.4.6) que¹⁰

$$\phi_{(1)} - \phi_{(0)} = \left(\mu \sigma_x w_k^{-\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{\sigma_x} w_k^{\frac{1}{2}} \right)^2 - \left(\mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right)^2 - 2\mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} \mathbf{v} \left(\mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right) \quad (3.47)$$

$$\text{où } \mathbf{v} = \left[\mathbf{b}_0 \sqrt{\rho(0)} \quad w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho(0)} \right]^T,$$

Dans le cas d'une *Mise à jour* nous utiliserons le fait que

$$\phi'_{(1)} - \phi_{(1)} = (\phi'_{(1)} - \phi_{(0)}) - (\phi_{(1)} - \phi_{(0)})$$

où $\phi'_{(1)} - \phi_{(0)}$ et $\phi_{(0)} - \phi_{(1)}$ sont calculés à partir de (3.47).

¹⁰ Afin de simplifier les notations, nous avons omis le prime qui indique la fonction ϕ associée à l'état proposé u' , car dans le cas d'une *Naissance* ou d'une *Mort* la distinction entre les deux est évidente : i.e., w'_k pour la *Naissance* et w_k pour la *Mort*.

3.4.5 Implémentation efficace avancées

Nous allons clôturer cette section sur l'implémentation efficace du PCGS par quelques possibilités d'implémentations avancées.

Échantillonnage efficace des amplitudes réduites $\bar{\mathbf{x}}$. Nous montrons ici que grâce à l'introduction du facteur de Cholesky \mathbf{F} l'échantillonnage des amplitudes réduites se fait de façon efficace. En effet, comme la matrice de covariance $\mathbf{\Gamma}$ s'écrit en fonction du facteur \mathbf{F} (à partir de (3.46) voir Annexe B.4.6) nous avons :

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F}^T \mathbf{F} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} = (\mathbf{F} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}})^T \mathbf{F} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}, \quad (3.48)$$

$$\boldsymbol{\eta} = (\mathbf{F} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}})^T \mathbf{F} \mathbf{G}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{\Gamma} \mathbf{W}^{-1} \boldsymbol{\mu}_x, \quad (3.49)$$

alors l'échantillonnage de $\bar{\mathbf{x}} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{\Gamma})$ est équivalent à

$$\bar{\mathbf{x}} = \boldsymbol{\eta} + (\mathbf{F} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}})^T \mathbf{b}, \text{ avec } \mathbf{b} \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{I}_L).$$

Mise à jour du facteur \mathbf{F} . Comme le facteur de Cholesky \mathbf{F} dépend de la matrice de covariance du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$ (voir (3.29) et (3.28)), il est nécessaire de mettre à jour le facteur \mathbf{F} si la matrice de covariance $\boldsymbol{\Sigma}$ est modifiée, par exemple dans le cadre non supervisé où $\boldsymbol{\Sigma}$ doit être échantillonnée avec le reste des hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta}$. Pour ce faire, nous proposons ici de recalculer \mathbf{F} à partir de sa définition en utilisant une décomposition de Cholesky, c'est-à-dire

$$\mathbf{F} = \text{Chol}(\mathbf{S}^{-1}) = \text{Chol}\left((\mathbf{I} + \mathbf{G}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G})^{-1}\right).$$

Par ailleurs, cette mise à jour du facteur de Cholesky permet d'éviter la propagation des erreurs numérique dues aux mises à jour de Cholesky d'ordre 1.

Forme scalaire de $\phi'_{(1)} - \phi_{(0)}$. Nous montrons ici que l'expression de $\phi'_{(1)} - \phi_{(0)}$ donnée dans (3.47) peut être simplifiée davantage pour une implémentation efficace¹¹. En particulier, on peut montrer $\mathbf{v}^T \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_x$ peut s'exprimer sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^T \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_x &= \mathbf{v}^T \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} (\mu \sigma_x \mathbf{1} + \mathbf{w} \beta / \sigma_x) \\ &= \mu \sigma_x \mathbf{v}^T \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{1} + \beta / \sigma_x \mathbf{v}^T \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{w} \\ &= \mu \sigma_x \sum_l \frac{v_l}{\sqrt{w_l}} + \beta / \sigma_x \sum_l v_l \sqrt{w_l} \end{aligned}$$

Notons que cette version scalaire permet de réduire le temps de calcul de $\mathbf{v}^T \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_x$ par deux dans le cas où μ ou β sont nuls, contrairement au calcul direct à partir de la forme matricielle.

3.5 Cas semi-aveugle ou aveugle

Dans la partie introductive de ce chapitre, nous avons fait le choix, afin de simplifier les notations, d'omettre la dépendance des atomes \mathbf{h}_k (et donc du dictionnaire \mathbf{H}) en les hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}_k$. Nous revenons dans cette section sur l'échantillonnage de ces hyper-paramètres dans le cadre semi-aveugle ou aveugle. Deux cas peuvent être distingués :

¹¹Notons que cela dépend fortement de l'environnement d'implémentation. En effet, certains environnements sont optimisés pour le calcul matriciel alors que pour d'autres il est préférable de passer par une expression scalaire simplifiée.

- (i) Le dictionnaire \mathbf{H} est une matrice Toeplitz, c'est-à-dire que les atomes \mathbf{h}_k sont des versions décalées d'un seul atome que l'on note \mathbf{h} . Cet atome \mathbf{h} peut dépendre de paramètre $\boldsymbol{\nu}$ (e.g., déconvolution semi-aveugle [MIB05]) ou bien l'atome \mathbf{h} est lui-même considéré comme un hyper-paramètre (e.g., déconvolution aveugle [CCL96]).
- (ii) Chaque atome \mathbf{h}_k du dictionnaire dépend de son propre jeu d'hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}_k$ (e.g., analyse spectrale haute résolution [BC06], problèmes inverses parcimonieux avec dictionnaires continus [Bou19]), ce qui est le cas général que nous avons considéré dans ce chapitre.

Le cas (i) est assez simple à implémenter. En effet, comme le dictionnaire ne change qu'une seule fois par itération, au moment de l'échantillonnage de $\boldsymbol{\nu}$ dans le cas semi-aveugle (ou \mathbf{h} dans le cas aveugle), il suffit d'intégrer cette étape d'échantillonnage avec le reste des hyper-paramètres et mettre à jour les matrices concernées par la modification : \mathbf{H} , \mathbf{G} et \mathbf{F} (voir Algorithme 3.3).

Algorithme 3.3 Échantillonnage des hyper-paramètres du dictionnaire : cas (i).

1. Échantillonnage de $\boldsymbol{\nu}$:
 - Tirer $\boldsymbol{\nu}|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}$ ou $\mathbf{h}|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}$ suivant leur loi *a posteriori*,
 2. Mise à jour des matrices \mathbf{H} et \mathbf{G} :
 - (a) $\mathbf{H} = \text{Toeplitz}(\mathbf{h}(\boldsymbol{\nu}))$ ou $\mathbf{H} = \text{Toeplitz}(\mathbf{h})$,
 - (b) $\mathbf{G} = \overline{\mathbf{H}} \text{diag}\{\sqrt{\mathbf{w}}\}$,
 3. Mise à jour de la matrice \mathbf{F} :
 - (a) $\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{G}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}$,
 - (b) $\mathbf{F} = \text{Chol}(\mathbf{S}^{-1})$.
-

Le cas (ii) est plus délicat. En effet, comme chaque atome \mathbf{h}_k dépend de son propre jeu d'hyper-paramètres $\boldsymbol{\nu}_k$, l'échantillonnage de ces hyper-paramètres doit se faire conjointement avec (q_k, w_k) . En d'autres termes, l'échantillonnage de $\boldsymbol{\nu}_k$ doit être pris en compte dans l'étape RJ-MCMC du PCGS. Dans ce cas, l'état $u = 1$ correspond à $q_k = 1$, $w_k \in \mathbb{R}_+$ et $\boldsymbol{\nu}_k \in \mathbb{D}_Q$ et l'état $u = 0$ reste identique au cas supervisé.

Cependant, sous l'hypothèse d'un *a priori* $p(\boldsymbol{\nu}) = \prod_k p(\boldsymbol{\nu}_k)$ indépendant du reste des paramètres, l'adaptation de l'étape RJ-MCMC au cas (ii) est immédiate. En effet, l'implémentation récursive que nous avons présentée reste valide dans ce cas. Seules les probabilités d'acceptation changent par un facteur qui dépend de l'*a priori* $p(\boldsymbol{\nu}_k)$ et des lois de propositions choisies pour $\boldsymbol{\nu}_k$. Par exemple, si on choisit de proposer $\boldsymbol{\nu}_k$ à partir de sa loi *a priori* dans le cas d'une *Naissance* alors la loi de proposition dans ce cas s'écrit $q_{01}(w_k, \boldsymbol{\nu}_k) = p(w_k)p(\boldsymbol{\nu}_k)$.

3.6 Bilan

Dans ce chapitre nous avons présenté deux contributions de ce manuscrit :

1. Le modèle Bernoulli mélange de gaussiennes (BMG) qui s'appuie sur les lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG étudiées dans le chapitre précédent. La formulation générique du BMG que nous avons présenté permet, de prendre en compte de façon systématique un grand nombre du modèle *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} . Il permet aussi d'approcher des *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} avec des lois à support réduit telles que les lois à support positif grâce aux approximations ELSA,
2. Un algorithme d'échantillonnage PCGS efficace pour ce modèle, grâce à la marginalisation des amplitudes, et une stratégie d'implémentation numérique efficace moyennant des simplifications mathématiques et algorithmiques permettant de réduire considérablement le coût de calculs par itération de l'échantillonneur et la charge mémoire nécessaire.

3.6. Bilan

Dans le chapitre suivant, l'efficacité du BMG et de son échantillonneur PCGS sera étudiée et quantifiée empiriquement sur des exemples de déconvolution de train d'impulsions.

Chapitre 4

Expériences et validations

Sommaire

4.1	Introduction	81
4.1.1	Diagnostic de convergence	82
4.1.2	Estimation des paramètres	83
4.2	Déconvolution impulsionnelle : <i>a priori</i> Bernoulli-Laplace	84
4.2.1	Données	85
4.2.2	Analyse des résultats	85
4.2.3	Mise à l'échelle	91
4.3	Déconvolution impulsionnelle semi-aveugle non négative	93
4.3.1	Données	94
4.3.2	Analyse des résultats	94
4.3.3	Analyse des résultats en fonction du paramètre d'approximation β .	98
4.4	Bilan	100

Nous présentons dans ce chapitre un certain nombre d'expériences permettant de valider et d'étudier empiriquement les performances du modèle BMG et son échantillonneur PCGS aussi bien en termes de qualité de restauration des signaux parcimonieux qu'en termes de propriétés de convergence. Nous avons fait le choix d'illustrer nos travaux sur une application particulièrement difficile des problèmes inverses parcimonieux à savoir la déconvolution de train d'impulsions pour laquelle les éléments du dictionnaire sont fortement corrélées, dans un cadre non supervisé.

4.1 Introduction

Afin de comparer empiriquement l'efficacité du modèle BMG et son échantillonneur PCGS, nous proposons ici deux cadres d'expériences :

1. Déconvolution non supervisée de train d'impulsions avec un *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} où \mathcal{D} est une densité symétrique et à longue queue. Plus précisément, nous allons étudier le modèle *a priori* Bernoulli-Laplace [CCK18, CBCT15] qui peut s'écrire comme un *a priori* BMG car la loi de Laplace est une loi de mélange de gaussiennes de la classe SMG (voir Table 3.1 p. 66).
2. Déconvolution semi-aveugle et non supervisée de train d'impulsions sous contrainte de non-négativité en se basant sur les approximations ELSA présentées dans le chapitre 2. Plus précisément, nous allons étudier l'approximation du modèle *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} permettant de prendre la non-négativité à savoir le modèle Bernoulli-Gaussien-Tronqué [MIB05].

Pour toutes nos expériences les simulations numériques sont exécutées avec le logiciel MATLAB sur un ordinateur avec un processeur Intel Xeon Gold 6226R, avec un CPU tournant à 2.9 GHz. Nous avons fait le choix de faire tourner nos simulations sur un seul cœur, afin d'avoir une comparaison objective des échantillonneurs en termes de temps de calcul. En effet, il est délicat d'évaluer exactement les temps de calcul en utilisant plusieurs cœurs, vu que le nombre de cœurs attribués à une tâche peut varier au cours du temps.

Avant d'entrer dans les détails de ces expériences, nous précisons la façon dont nous avons évalué la convergence des chaînes de Markov, la méthode d'estimation des paramètres à partir des échantillons et les critères utilisés pour évaluer la qualité de l'estimation.

4.1.1 Diagnostic de convergence

Afin de comparer les performances des différents échantillonneurs que nous allons étudier dans cette section, nous allons utiliser la méthode de diagnostic de convergence graphique de Brooks et Gelman [BG98]. Cette approche est basée sur une étude des matrices de covariance inter et intra-chaînes calculées empiriquement à partir de plusieurs chaînes de Markov indépendantes. Plus précisément, [BG98] propose de calculer le *Multivariate Potential Scale Reduction Factor* (MPSRF) comme suit :

$$R = \frac{T-1}{T} + \frac{J+1}{J} \operatorname{eig} \left(\mathbf{V}_{\text{intra}}^{-1} \mathbf{V}_{\text{inter}} \right),$$

où $\operatorname{eig}(\mathbf{A})$ représente la plus grande valeur propre de la matrice \mathbf{A} . $\mathbf{V}_{\text{intra}}$ et $\mathbf{V}_{\text{inter}}$ sont les matrices de covariance intra-chaîne et inter-chaîne respectivement, estimées empiriquement à partir de J chaînes de Markov indépendantes $\{\mathbf{X}^{j,t}; j = 1, \dots, J; t = 1, \dots, T\}$ de taille T :

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{\text{intra}} &= \frac{1}{J(T-1)} \sum_{t,j} \left(\mathbf{x}^{j,t} - \bar{\mathbf{x}}^j \right) \left(\mathbf{x}^{j,t} - \bar{\mathbf{x}}^j \right)^T, \\ \mathbf{V}_{\text{inter}} &= \frac{1}{J-1} \sum_j \left(\bar{\mathbf{x}}^j - \bar{\mathbf{x}} \right) \left(\bar{\mathbf{x}}^j - \bar{\mathbf{x}} \right)^T, \end{aligned}$$

où $\bar{\mathbf{x}}^j$ et $\bar{\mathbf{x}}$ représentent la moyenne de la chaîne j et la moyenne globale de toutes les chaînes respectivement.

Le MPSRF peut prendre des valeurs dans l'intervalle $[1, \infty[$, une faible valeur du MPSRF indique que les J chaînes de Markov ont le même comportement, qui est synonyme d'un échantillonnage efficace, le cas idéal étant $R = 1$. Comme suggéré dans [BG98] nous avons choisi de prendre un seuil de convergence à 1,2.

En pratique, nous avons généré $J = 10$ chaînes indépendantes, grâce à des initialisations différentes des graines aléatoires, pour un nombre fixé d'échantillons $T = 2 \times 10^4$ pour les échantillonneurs PCGS et $T = 10^5$ pour les échantillonneurs de Gibbs classique. Le MPSRF est évalué toutes les $\Delta_T = 1000$ itérations à partir des lots de taille croissante

$$\{\mathbf{X}^{j,t}\}_{t=1, \dots, m\Delta_T}, \text{ avec } m = \lceil 1; T/\Delta_T \rceil,$$

la première moitié de chaque lot étant supprimé pour prendre en compte la période de chauffe (soit $m\Delta_T/2$ échantillons conservés). Ce principe de calcul du MPSRF est illustré Figure 4.1.

Nous avons fait le choix de baser nos études expérimentales sur le MPSRF calculé à partir des chaînes des amplitudes. En effet, durant nos expériences préliminaires nous avons constaté qu'un diagnostic de convergence MPSRF à partir des chaînes des hyper-paramètres peut engendrer des diagnostics de convergence prématurés étant donné que l'échantillonnage de ces derniers est généralement simple et que leurs chaînes convergent rapidement vers la solution optimale. Par ailleurs, nous avons constaté que le caractère parcimonieux et binaire des séquences de

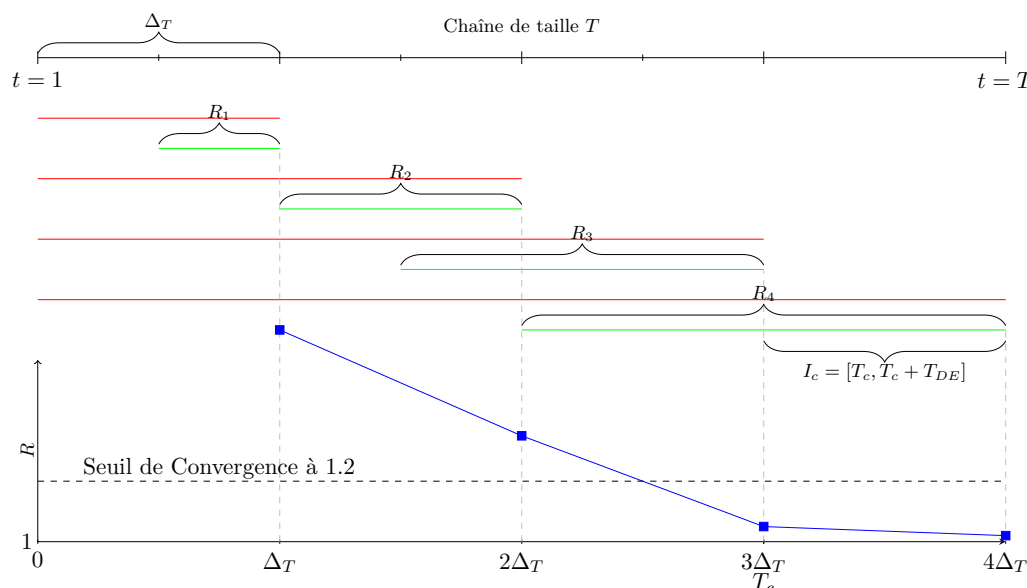


FIGURE 4.1 : Schéma illustrant le principe de calcul du MPSRF. Les lignes rouges représentent les lots de taille $m\Delta_T$ avec $m = \llbracket 1; T/\Delta_T \rrbracket$ et le MPSRF est calculé sur la seconde moitié de chaque lot représentée en vert. Un exemple d'évolution du MPSRF est donné par la courbe bleu où le seuil de convergence est atteint à T_c .

Bernoulli peut causer des instabilités numériques lors de l'inversion de la matrice $\mathbf{V}_{\text{intra}}$ ou le calcul des valeurs propres de la matrice $\mathbf{V}_{\text{intra}}^{-1}\mathbf{V}_{\text{inter}}$. En effet, comme la séquence de Bernoulli est binaire, on peut rencontrer des situations où une variable de la séquence q_k reste constante (soit $q_k = 1$ ou $q_k = 0$) $\forall j, t \in \llbracket m\Delta_T/2; m\Delta_T \rrbracket$ ce qui engendre une ligne et une colonne nulles dans les matrices $\mathbf{V}_{\text{intra}}$ et $\mathbf{V}_{\text{inter}}$. Le cas $q_k = 0$ est récurrent, étant donné le caractère parcimonieux de la séquence, plusieurs variables q_k (non pertinentes) sont définitivement mises à zéro par l'échantillonneur après la partie exploratoire de la période de chauffe. Par ailleurs, le cas $q_k = 1$ survient généralement quand l'échantillonneur est proche de la convergence et que la probabilité marginale $P(q_k = 1)$ est grande. Afin de contourner ce problème, une solution serait de supprimer les lignes et colonnes non pertinentes (*i.e.*, lignes et colonnes nulles) des matrices de covariance afin de les rendre inversibles. Toutefois, la convergence des chaînes des variables de Bernoulli \mathbf{q} n'implique pas la convergence des chaînes des amplitudes \mathbf{x} , car même si $q_k = 1$, $\forall j, t \in \llbracket m\Delta_T/2; m\Delta_T \rrbracket$, le x_k associé varie.

En revanche, l'évaluation du MPSRF à partir des chaînes des amplitudes implique nécessairement la convergence des chaînes des variables de Bernoulli de par la définition conditionnelle du modèle Bernoulli- \mathcal{D} . Notons que dans ce cas les lignes et colonnes nulles des matrices $\mathbf{V}_{\text{intra}}$ et $\mathbf{V}_{\text{inter}}$ sont uniquement engendrées par les variables $x_k = 0$ non pertinentes, et donc leur suppression des matrices ne cause aucune perte d'information.

4.1.2 Estimation des paramètres

Une fois le seuil de convergence atteint les amplitudes sont estimées par une approche « *détection-estimation* » [RBNC04, BC06, BCBB16] : à partir de $T_{DE} = 1000$ échantillons générés après convergence à partir d'une chaîne donnée¹ on effectue :

¹Le choix de la chaîne n'a aucune influence sur le résultat car elles ont toutes atteint le régime stationnaire.

1. une étape de détection des atomes les plus pertinents :

$$\hat{q}_k = \begin{cases} 1, & \text{si } \frac{1}{T_{DE}} \sum_{t \in I_c} q_k^{(t)} > 0.5 \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

où $I_c = [T_c, T_c + T_{DE}]$, et T_c est l'indice de l'itération à laquelle les chaînes ont atteint le seuil de convergence.

2. une étape d'estimation des amplitudes conditionnellement à \hat{q}_k :

$$\hat{x}_k = \frac{\hat{q}_k}{\sum_{t \in I_c} q_k^{(t)}} \sum_{t \in I_c} x_k^{(t)}$$

qui implique que $\hat{x}_k = 0$ quand $\hat{q}_k = 0$.

Si l'échantillonneur ne parvient pas à atteindre le seuil de convergence avant le nombre d'échantillons maximal T prédéfini alors l'estimation est considérée comme défailante et ne sera pas prise en compte pour évaluer la qualité d'estimation.

Évaluation de la qualité de l'estimation.

Pour quantifier la qualité des estimations produites par les différents échantillonneurs, nous allons nous intéresser essentiellement à la variable de Bernoulli $\hat{\mathbf{q}}$. En effet, nous avons vu dans les chapitres précédents que la variable de Bernoulli joue un rôle central dans le modèle Bernoulli- \mathcal{D} car elle représente le support des amplitudes non nulles. Pour mesurer la qualité de restitution du support, nous allons nous intéresser à deux quantités qui sont la *Précision* (PR) et le *Rappel* (ou *Recall* RC) [Tin10], définis par :

$$\text{PR} = \frac{\text{VP}}{\text{VP} + \text{FP}}, \quad \text{RC} = \frac{\text{VP}}{\text{VP} + \text{FN}}$$

où VP, FN et FP représentent le nombre de vrais positifs, le nombre de faux négatifs et le nombre de faux positifs respectivement. La précision permet de quantifier le nombre d'atomes correctement détectés par rapport au nombre total d'atomes détectés. Le rappel permet de quantifier le nombre d'atomes correctement détectés par rapport au vrai nombre d'atomes. Ces deux quantités peuvent prendre des valeurs dans l'intervalle $[0, 1]$. PR = 1 implique que tous les atomes détectés sont des vrais atomes, même si tous les vrais atomes n'ont pas été détectés. Par ailleurs, RC = 1 signifie que tous les vrais atomes ont été détectés, même si des atomes non pertinents ont également été détectés (faux positifs).

4.2 Déconvolution impulsionnelle : *a priori* Bernoulli-Laplace

Dans cette première expérience nous allons étudier le modèle *a priori* BMG dans le cas d'un *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} avec une loi \mathcal{D} à longue queue qui admet une décomposition en mélange de gaussiennes LSMG. Ici nous allons étudier le modèle Bernoulli-Laplace [CBCT15, CTB13] dont la représentation Bernoulli- \mathcal{D} est donnée par :

$$\forall k, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda) \text{ avec } \begin{cases} x_k | q_k = 1 & \sim \mathcal{L}(0, \sigma_x) \\ x_k | q_k = 0 & \sim \delta_0(x_k) \end{cases} \quad (4.1)$$

Par ailleurs, en exploitant le fait que la loi de Laplace est un mélange de gaussienne SMG, la représentation BMG du modèle *a priori* Bernoulli-Laplace est donnée par $\forall k, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda)$ avec

$$\begin{aligned} \text{quand } q_k = 1, & \begin{cases} w_k \sim \mathcal{E}(\frac{1}{2\sigma_x^2}) \\ x_k | w_k \sim \mathcal{N}(0, w_k), \end{cases} \\ \text{quand } q_k = 0, & \quad x_k = 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

Par rapport au modèle BMG défini par (3.2) et (3.3) (section 3.1 p. 3.1) on a $\beta = 0$ et $\mu = 0$ car la loi est symétrique et centrée.

Échantillonnage de l’hyper-paramètre d’échelle σ_x . Comme nous l’avons expliqué dans la section 3.2.3, nous proposons d’échantillonner l’hyper-paramètre d’échelle σ_x à partir de la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux variables de mélange w_k qui correspond tout simplement à la loi *a posteriori* conditionnelle du paramètre d’échelle obtenu à partir de la représentation Bernoulli- \mathcal{D} (4.1) donnée par :

$$\begin{aligned} p(\sigma_x | \mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y}) &\propto p(\mathbf{x} | \mathbf{q}, \sigma_x) p(\sigma_x) \\ &\propto \prod_{k|q_k=1} \frac{1}{\sigma_x} \exp\left(-\frac{|x_k|}{\sigma_x}\right) p(\sigma_x) \propto \frac{1}{\sigma_x^L} \exp\left(-\frac{\|\bar{\mathbf{x}}\|_1}{\sigma_x}\right) p(\sigma_x) \end{aligned}$$

Similairement à [CTB13] nous prenons en compte un *a priori* non informatif conjugué Inverse-Gamma $\sigma_x \sim \text{IG}(1, 1)$ telle que la loi *a posteriori* conditionnelle de σ_x est également une loi Inverse-Gamma :

$$\sigma_x | \mathbf{q}, \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y} \sim \text{IG}(L + 1, \|\bar{\mathbf{x}}\|_1 + 1)$$

Un échantillonnage direct de σ_x suivant cette loi est donc effectué.

4.2.1 Données

Nous avons généré une base de données de 300 trains d’impulsions de dimension $K = 300$ simulés à partir du modèle Bernoulli-Laplace. Le paramètre λ^* de la séquence de Bernoulli a été choisi aléatoirement dans l’intervalle [0.070.13], et le paramètre d’échelle des amplitudes a été fixé à $\sigma_x^* = 0.01$. Chaque train d’impulsion est ensuite convolué par la réponse impulsionnelle $\mathbf{h}(f_h)$ donnée par² :

$$h_n(f_h) = \cos\left(\frac{n-10}{10}\pi f_h\right) e^{-|0.225n-2|^{1.5}}, \quad (4.3)$$

avec $n = 0, \dots, 20$ et $f_h = 3.5$. La base de données est ensuite divisée en trois parties égales et chacune est perturbée par un bruit additif gaussien i.i.d. avec des rapports signal sur bruit (RSB) de 15, 12 et 9 dB respectivement. La réponse impulsionnelle $\mathbf{h}(f_h)$, un exemple de train d’impulsion \mathbf{x} ainsi que les données simulées \mathbf{y} correspondantes sont représentés Figure 4.2.

4.2.2 Analyse des résultats

Pour chaque signal de la base de données nous avons effectué une déconvolution non supervisée (c’est-à-dire en estimant les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta} = [\lambda, \sigma, \sigma_x]$) utilisant l’échantillonneur PCGS du modèle *a priori* BMG (4.2) ainsi que l’échantillonneur de Gibbs du modèle (4.1) (voir par exemple [CTB13]). Dans la Figure 4.3 sont donnés les résultats de déconvolution d’un exemple de la base de données (l’exemple illustré Figure 4.2-(d)) où les deux échantillonneurs donnent des résultats d’estimation similaires.

²Cette réponse impulsionnelle est similaire à celle utilisée dans [GIL11].

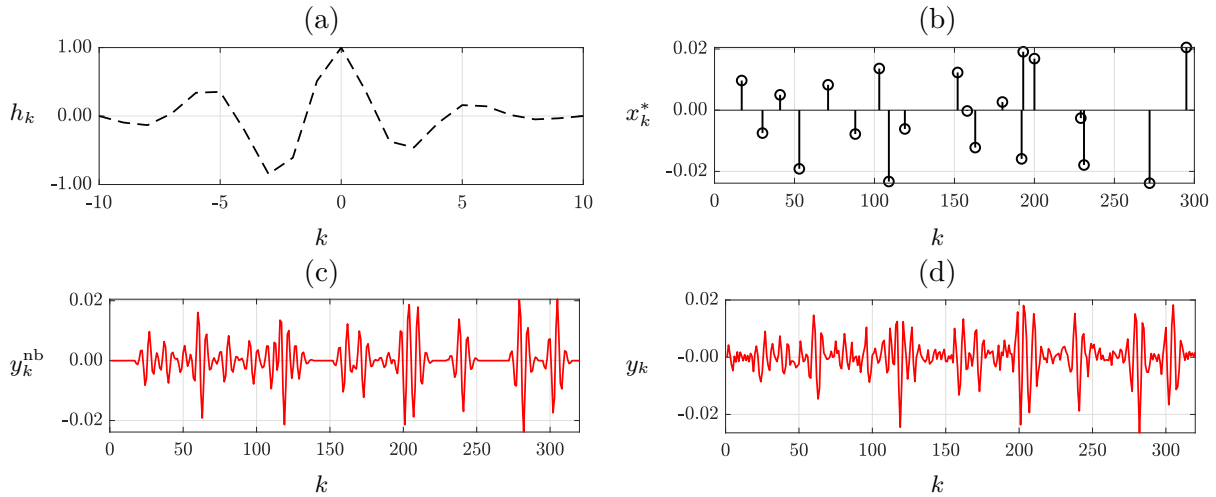


FIGURE 4.2 : (a) Réponse impulsionnelle $\mathbf{h}(f_h)$, (b) exemple de train d'impulsions (amplitudes) \mathbf{x} , (c) données simulées correspondantes non bruitées, (d) données simulées \mathbf{y} correspondantes bruitées dans le cas d'un RSB = 9 dB.

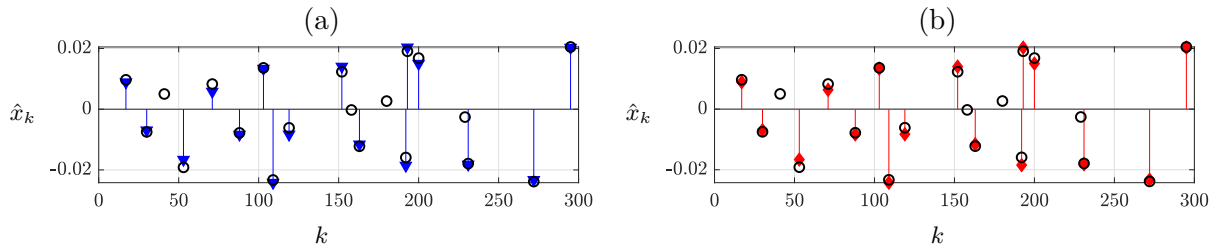


FIGURE 4.3 : Résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par : (a) PCGS (b) Gibbs, après convergence.

Pour cet exemple, les supports Ω restitués par les deux échantillonneurs sont identiques avec une précision PR = 1 et un rappel RC = 0.8. En effet, comme le montre la Figure 4.3 certaines amplitudes très faibles ne sont pas détectées car leur influence sur les données est noyée dans le bruit. Pour chacun des échantillonneurs, l'évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations (d'échantillons générés) est donné Figure 4.4. Nous constatons que l'échantillonneur PCGS franchit le seuil de convergence au bout de 2000 itérations alors que l'échantillonneur de Gibbs requiert 25000 itérations pour converger. En termes de coût de calcul, cela correspond à un facteur d'accélération de ≈ 5.4 , le temps de calcul nécessaire aux deux échantillonneurs pour atteindre le seuil de convergence étant de 26 et 141 secondes respectivement.

Analyse globale des résultats. Afin de résumer les résultats sur l'ensemble des expériences menées sur les 300 signaux de la base de données, nous allons faire une analyse statistique de la qualité de restauration (précision et rappel) et de l'efficacité d'échantillonnage (nombre d'itérations et temps de calcul nécessaire pour atteindre la convergence). Les résultats seront fournis en fonction du RSB sous la forme de boîtes à moustache (*Boxplot*) (*e.g.*, Figure 4.5) où la ligne verticale s'étend de la valeur minimale à la valeur maximale de la quantité analysée, les segments horizontaux représentent les premier, deuxième (médiane) et troisième quartiles et la moyenne est indiquée par un point.

Analysons dans un premier temps l'efficacité des échantillonneurs en termes de convergence.

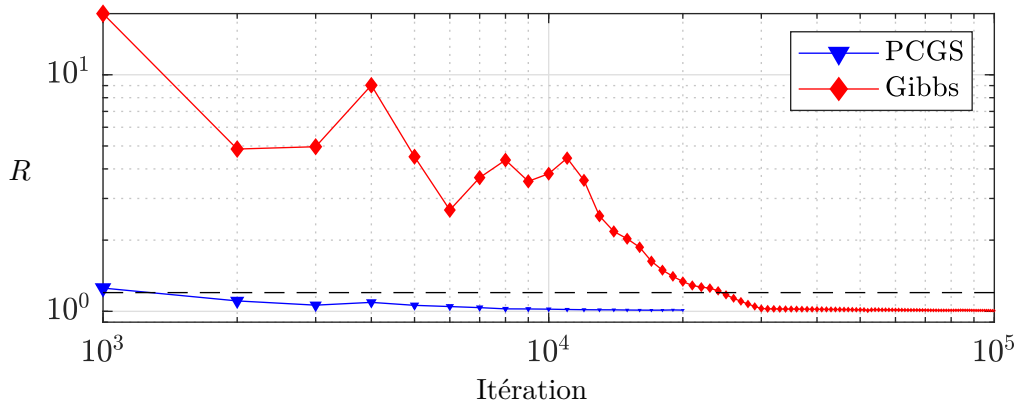


FIGURE 4.4 : Évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations des échantillonneurs PCGS et Gibbs. La ligne pointillée horizontale représente le seuil de convergence à 1.2.

La Figure 4.5 donne les *boxplots* du nombre d'itérations ainsi que le temps de calcul en secondes nécessaires pour atteindre le seuil de convergence. Clairement, le PCGS nécessite beaucoup moins d'itérations que le Gibbs pour converger. De plus, les variations du nombre d'itérations T_c du PCGS sont faibles et concentrées autour de la moyenne, contrairement à celles produites par l'échantillonneur de Gibbs. Ces résultats sont en adéquation avec les conclusions de [GIL11] qui soulignent que la stratégie PCGS permet d'améliorer les propriétés de l'échantillonnage.

Cette efficacité de la stratégie PCGS combinée à notre implémentation récursive efficace donne lieu à un échantillonneur nettement plus efficace, en termes de temps de calcul, que le Gibbs. En moyenne, le PCGS nécessite 3.4×10^3 itérations pour converger alors que le Gibbs requiert 4.5×10^4 itérations, soit un facteur d'efficacité de l'ordre de 13. En termes de coût de calcul, le PCGS converge en moyenne au bout de 45 seconde alors que le Gibbs a besoin de 145 secondes, ce qui correspond à un facteur d'accélération de l'ordre de 3.2.

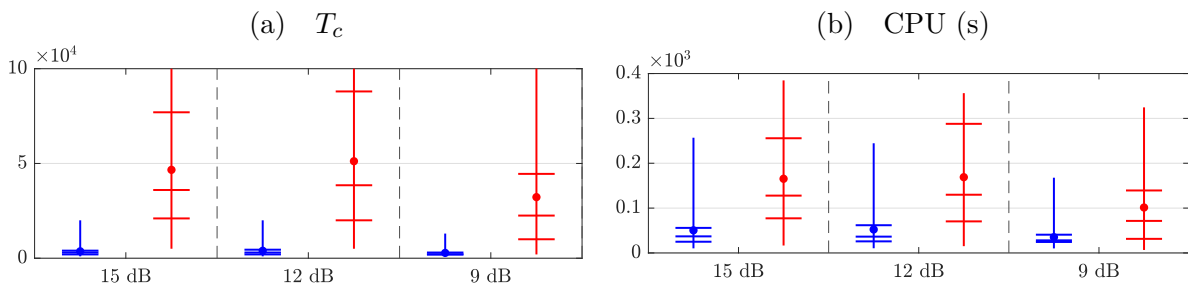


FIGURE 4.5 : Analyse de l'efficacité de convergence : (a) nombre d'itérations T_c et (b) temps de calcul nécessaires pour atteindre la convergence sur 100 signaux de la base de données. PCGS en bleu, Gibbs en rouge. La ligne verticale s'étend de la valeur minimale à la valeur maximale, les segments horizontaux représentent les premier, deuxième (médiane) et troisième quartiles et le point la moyenne.

Nous avons constaté que le PCGS a été moins rapide, en termes de temps de calcul, que le Gibbs sur 26 exemples parmi l'ensemble des 300 signaux de la base de données ($\approx 8.3\%$), cependant le nombre d'itérations du PCGS est toujours inférieur à celui du Gibbs. Ceci est dû au fait que le coût par itération du PCGS est élevé par rapport à celui du Gibbs, ce qui implique que dans certains cas, le gain apporté par le PCGS en terme d'itération n'est pas suffisant pour contrebalancer la charge de calcul de l'implémentation PCGS. D'autre part, sur 44 exemples

parmi l'ensemble des 300 signaux de la base de données ($\approx 14.6\%$) le Gibbs n'atteint pas le seuil de convergence avant les $T = 10^5$ itérations maximales prédéfinies³ (nous reviendrons sur ce point plus loin) alors que le PCGS converge toujours en moins de 2×10^4 .

En termes de qualité d'estimation et plus précisément de restitution du support, la Figure 4.6 montre que le PCGS donne en moyenne de meilleurs résultats que le Gibbs en particulier en termes de précision avec $\text{PR} \geq 0.8$ pour plus de 75% des cas. Cela implique que les atomes détectés par le PCGS sont pratiquement tous pertinents alors que le Gibbs présente des mauvaises détections (faux positifs).

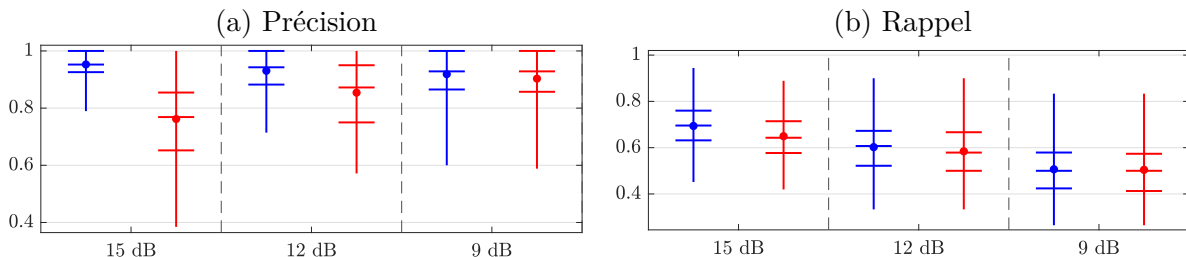


FIGURE 4.6 : Analyse de la qualité de l'estimation : (a) précision et (b) rappel des séquences de Bernoulli \mathbf{q} estimées. PCGS en bleu et Gibbs en rouge.

Notons que pour le Gibbs, la précision augmente avec le niveau du bruit, ce qui semble contre-intuitif. Cependant, il est bien connu que les propriétés de convergence des méthodes MCMC se dégradent pour des grandes valeurs de RSB, en particulier dans le cas des distributions multimodales [BSCI11]. Le fait que cette tendance ne s'applique pas au PCGS montre son efficacité y compris pour des grandes valeurs de RSB. En termes de rappel, les deux échantillonneurs ont des résultats similaires avec des valeurs en moyenne entre 0,5 et 0,7, cela implique que certains atomes ne sont pas détectés. Comme expliqué pour l'exemple de la Figure 4.3, ceci est dû à la présence du bruit qui noie certains atomes de faibles amplitudes. En effet, Figure 4.6-(b) nous constatons que la valeur moyenne du rappel décroît avec le RSB.

Il est important de souligner qu'en théorie, les deux échantillonneurs devraient donner des résultats d'estimation similaires, comme ils ciblent la même loi *a posteriori*. Toutefois, nous avons constaté certains cas pathologiques du Gibbs où toutes les $J = 10$ chaînes restent bloquées dans le même mode local, menant à un diagnostic de convergence erronée.

Analyse d'un cas pathologique pour le Gibbs. Dans la Figure 4.7 est donnée un exemple d'estimation où les $J = 10$ chaînes de l'échantillonneur de Gibbs sont restées bloquées dans un mode local. Si nous comparons l'estimée du PCGS (Figure 4.7-(a) et (c)) avec celle du Gibbs ((Figure 4.7-(b) et (d)) nous remarquons que les estimées sont pratiquement identiques sauf au niveau de l'atome d'indice 77 où le Gibbs ne parvient pas à estimer le vrai atome et le remplace par plusieurs atomes de part et d'autre. Ce même comportement de l'échantillonneur de Gibbs a été observé dans [BC05, GIL11] dans le cas du modèle *a priori* Bernoulli-Gaussien. En effet, comme l'échantillonneur de Gibbs procède de façon séquentielle pour échantillonner q_k et x_k , la transition de la configuration pathologique de la Figure 4.7-(d) vers la vraie configuration requiert de passer par des étapes intermédiaires de faible probabilité *a posteriori*. De plus, si l'on compare les données restituées $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\hat{\mathbf{x}}$ à partir de l'estimée $\hat{\mathbf{x}}$ obtenue avec le Gibbs avec les vraies données non bruitée \mathbf{y}^{nb} (Figure 4.7-(f)), nous constatons que les deux signaux sont assez similaires, ce qui montre que la valeur de la vraisemblance de la configuration pa-

³Les chaînes non convergentes ne seront pas prise en compte dans l'analyse de la qualité de l'estimation, car elles produisent des estimées non pertinentes.

thologique est particulièrement grande et donc la probabilité de transition de la configuration pathologique vers une configuration intermédiaire est considérablement faible, ce qui explique pourquoi l'échantillonneur de Gibbs reste bloqué dans cette configuration.

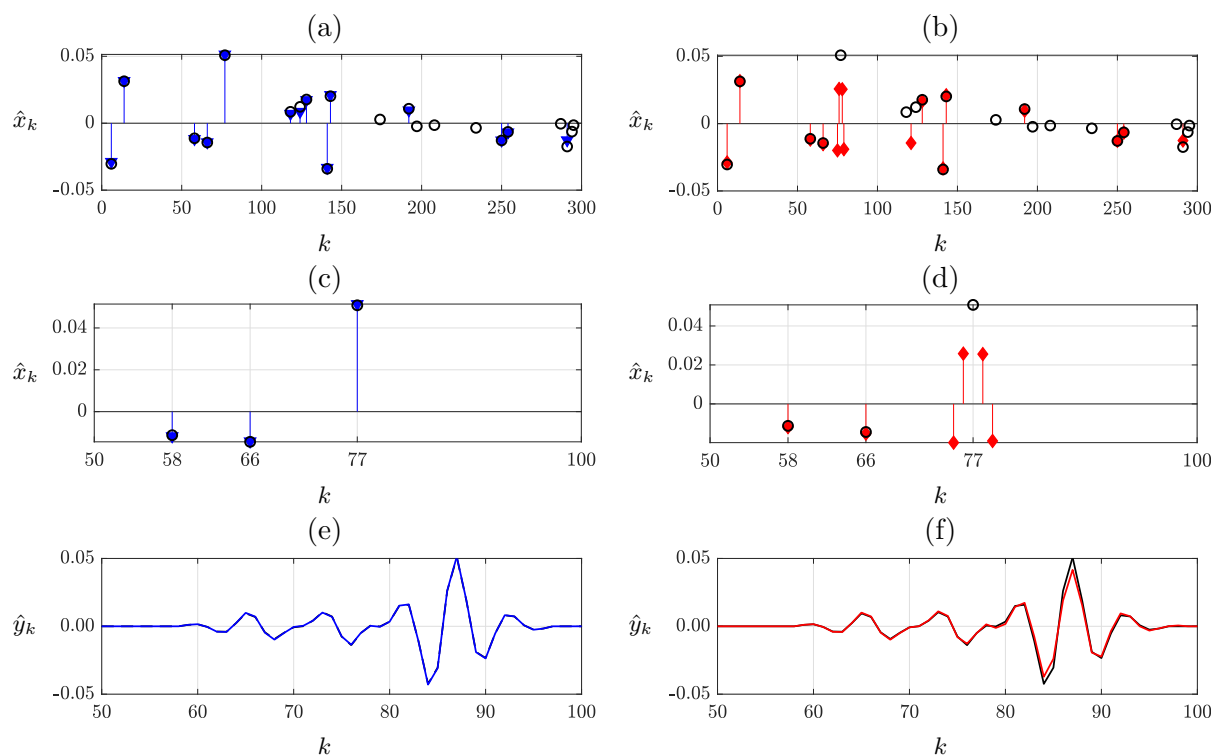


FIGURE 4.7 : Analyse d'un cas pathologique pour l'échantillonneur de Gibbs : (a)-(b) résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par l'échantillonneur PCGS (à gauche) et de Gibbs (à droite), (c)-(d) zoom sur le résultats d'estimation pour $k \in [50, 100]$ et (e)-(f) données restituées à partir de l'estimation $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\hat{\mathbf{x}}$.

Comme toutes les $J = 10$ chaînes de Markov utilisées pour établir le diagnostic de convergence restent bloquées dans le même mode local et n'arrivent pas à explorer d'autres configurations, le diagnostic par MRSRF indique que l'échantillonneur de Gibbs a convergé. Notons que le même cas pathologique est responsable des chaînes non convergentes discutées précédemment. Seulement, dans ce cas, c'est un sous-ensemble de J_b , ($0 < J_b < J$) chaînes de Markov qui restent bloquées dans une configuration pathologique, tel que le MPSRF reste toujours supérieur au seuil de convergence.

Afin d'éviter ces diagnostics de convergence erronés, une solution évidente est d'augmenter le nombre de chaînes J . En effet, la probabilité d'avoir J chaînes bloquées dans le même mode local est une fonction décroissante de J , alors que la probabilité d'avoir au moins une chaîne bloquée dans un mode local est une fonction croissante de J^4 .

Dans le cadre de cette expérience, en faisant augmenter J on s'attend à ce que la proportion de diagnostics erronés baisse alors que la proportion des chaînes non convergentes augmente avec J ce qui aura pour conséquence de creuser l'écart entre les deux échantillonneurs, en termes de coût de calcul, en faveur du PCGS. Par ailleurs, si nous souhaitions quantifier cet écart entre les deux échantillonneurs de façon exacte il faudrait augmenter le nombre d'itérations maximales T

⁴Si on suppose qu'une chaîne c_j peut rester bloquée dans un mode local avec une probabilité $P(c_j \text{ est bloquée}) = \alpha$, et sachant que les J chaînes sont indépendantes, alors $P(\forall j, c_j \text{ est bloquée}) = \alpha^J$ et $P(\exists j, c_j \text{ est bloquée}) = 1 - (1 - \alpha)^J$.

pour le Gibbs afin de s'assurer que tous les exemples convergent. Cependant, le temps de calcul, ainsi que la charge mémoire nécessaires pour le calcul du MPSRF augmentent considérablement avec T et J^5 . En prenant en compte les ressources numériques à disposition et afin d'avoir des temps de calcul raisonnables pour effectuer nos différentes expériences nous avons fait le choix de garder $J = 10$ chaînes de Markov avec $I = 10^5$ pour l'échantillonneur de Gibbs au prix d'avoir une sous-estimation du gain en nombre d'itérations et en temps de calcul du PCGS par rapport au Gibbs.

Estimation des hyper-paramètres. Analysons maintenant l'échantillonnage des hyper-paramètres du BGM. La Figure 4.8 représente, pour chacun des hyper-paramètres λ , σ_x et σ , les 150 premières itérations de trois chaînes de Markov générées par le PCGS pour un exemple de la base de données.

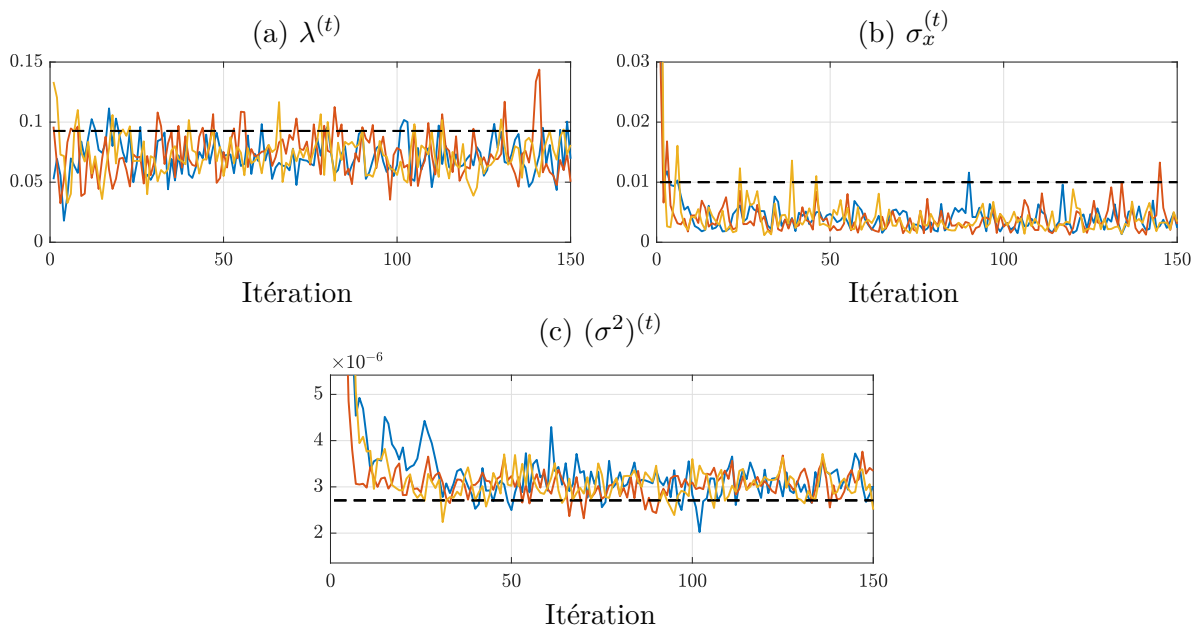


FIGURE 4.8 : Analyse de l'efficacité de l'échantillonnage des hyper-paramètres du modèle BMG. Représentation de trois chaînes de Markov pour les 150 premières itérations du PCGS : (a) paramètre de la séquence de Bernoulli λ , (b) paramètres d'échelle des amplitudes σ_x (c) variance du bruit σ . La ligne noire pointillée représente la vraie valeur de l'hyper-paramètre.

Premièrement, nous constatons que les chaînes des hyper-paramètres se stabilisent et convergent au bout de quelques itérations seulement⁶. Par ailleurs, les chaînes se stabilisent autour de la vraie valeur des hyper-paramètres. Ceci montre que l'estimation des hyper-paramètres du modèle BMG ne cause pas de problème particulier. Notons que les estimées des hyper-paramètres peuvent parfois être biaisées. Par exemple, dans l'exemple de la Figure 4.8-(b) on voit que les échantillons $\sigma_x^{(t)}$ sont inférieures à la vraie valeur du paramètre d'échelle. En effet, l'échantillonnage des hyper-paramètres dépend de $L = \|\mathbf{q}\|$ qui est parfois sous-estimé à cause des atomes noyés dans le bruit (non détectés).

⁵En effet, les matrices de covariance intra-chaînes $\mathbf{V}_{\text{intra}}$ et inter-chaînes $\mathbf{V}_{\text{inter}}$ sont de dimension $J \times J$ et l'évaluation du MPSRF nécessite de calculer $\text{eig}(\mathbf{V}_{\text{intra}}^{-1} \mathbf{V}_{\text{inter}})$ dont la complexité algorithmique est de $\mathcal{O}(J^3)$. Par ailleurs, à Δ_T fixé le nombre d'évaluations du MPSRF augmente avec I , sans oublier que le coût de l'estimation des matrices de covariance $\mathbf{V}_{\text{intra}}$ et $\mathbf{V}_{\text{inter}}$ augmente avec T et J .

⁶Cella explique les diagnostics de convergence prématurés de nos expériences préliminaires que nous avons discutées dans la section 4.1.1.

4.2.3 Mise à l'échelle

Dans l'expérience précédente, nous avons fait le choix de travailler avec des trains d'impulsions de taille $K = 300$. Dans cette section, nous allons étudier empiriquement le comportement du PCGS, en comparaison du Gibbs, en fonction de la taille des trains d'impulsions.

En effet, comme l'implémentation efficace du PCGS repose sur les mises à jour de Cholesky d'ordre 1 dont la complexité algorithmique est de l'ordre de $\mathcal{O}(L^2)$ (où $L = \|\mathbf{q}\|_0$ est le nombre d'atomes actifs dans le train d'impulsion), le coût par itération du PCGS est proportionnel à $LK \approx \lambda K^2$ (où λ est le paramètre de la séquence de Bernoulli). À l'inverse, la complexité algorithmique de l'échantillonneur de Gibbs ne dépend pas du nombre d'atomes actifs L , et le coût de calcul par itération est proportionnel à K . Il est donc intéressant de comparer les deux échantillonneurs, en termes de coût de calcul, pour différentes valeurs de K avec une valeur de λ fixée.

Pour chaque valeur de $K \in \{100, 300, 500, 700, 900\}$ nous avons généré une base de données de 50 trains d'impulsions avec le modèle Bernoulli-Laplace où le paramètre de la séquence de Bernoulli a été fixé à $\lambda^* = 0.07$ (*i.e.*, 7% des atomes sont actifs) et le paramètre d'échelle des amplitudes a été fixé à $\sigma_x^* = 0.01$. Ces trains d'impulsions sont ensuite convolués par la réponse impulsionnelle (4.3) et perturbés par un bruit additif gaussien *i.i.d.* tel que le rapport signal sur bruit est de $\text{RSB} = 12\text{dB}$. La Figure 4.9 donne le temps de calcul moyen par itération τ_{iter} en fonction de la taille du train d'impulsion K . On observe en effet que le coût de calcul par itération du Gibbs est inférieur à celui du PCGS. Par ailleurs, pour le PCGS τ_{iter} a un comportement quadratique en fonction de K , alors que pour le Gibbs τ_{iter} a un comportement linéaire, comme le montrent les fonctions d'interpolation polynomiale d'ordre 2 et 1 respectivement.

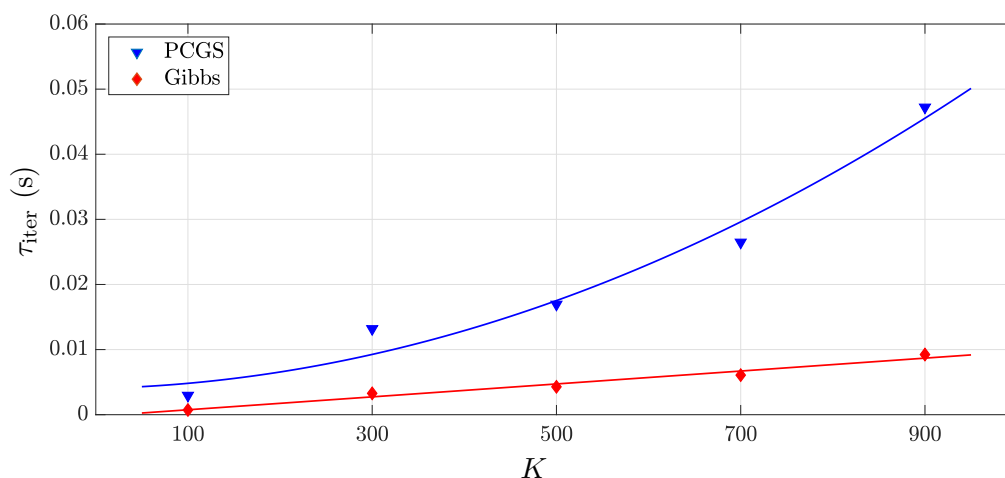


FIGURE 4.9 : Temps de calcul moyen par itération τ_{iter} en fonction de $K \in [100, 900]$. Le PCGS est représenté en bleu avec une fonction d'interpolation quadratique et le Gibbs en rouge avec une fonction d'interpolation linéaire.

Toutefois, en termes de temps de calcul nécessaire pour atteindre la convergence au sens du MPSRF, le PCGS reste toujours plus performant que le Gibbs quelle que soit la taille du train d'impulsion K , comme le montre la Figure 4.10. Ces résultats rejoignent les conclusions données dans [GIL11] qui comparent le PCGS au Gibbs dans le cas du modèle Bernoulli-Gaussien. En effet, en augmentant la taille du signal, la complexité du problème de déconvolution augmente car la loi *a posteriori* est définie dans un espace de dimension plus grande avec une plus grande probabilité d'avoir des configurations pathologiques. Ceci implique que l'échantillonneur de Gibbs nécessite plus d'itérations pour converger.

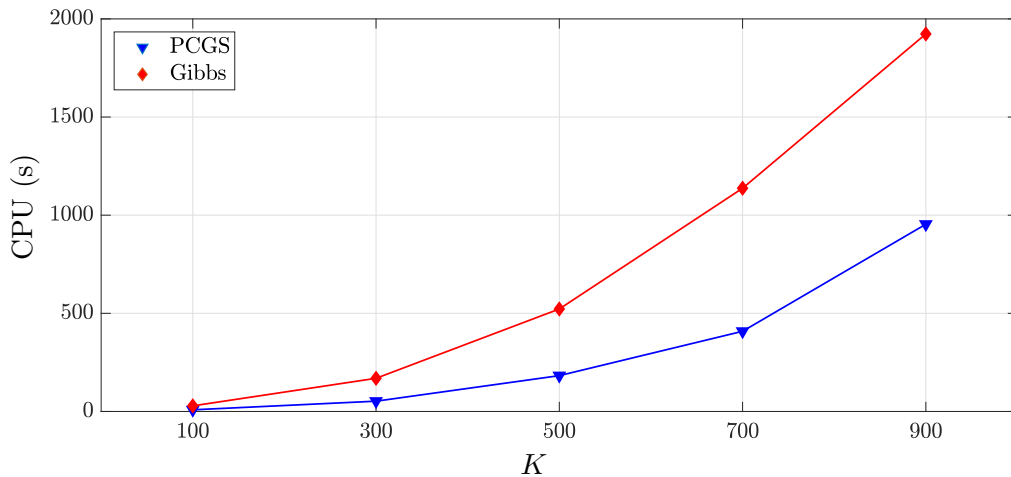


FIGURE 4.10 : Temps de calcul moyen (sur 50 signaux) nécessaire pour atteindre la convergence en fonction de $K \in [100, 900]$.

Notons que l'efficacité du PCGS peut être améliorée en réduisant le temps de calcul par itération τ_{iter} . En effet, le PCGS fait intervenir à chaque proposition sur les q_k des mises à jour de Cholesky et il existe des mises en œuvre informatique parallélisées exploitables sur des processeurs multi-cœur. Aussi, les temps de calculs mentionnés jusqu'à présent, évalués dans un cadre mono-cœur sont largement surévalués.

Bilan de l'expérience. Dans cette expérience nous avons montré empiriquement l'efficacité de l'échantillonneur PCGS du modèle BMG par rapport à l'échantillonneur de Gibbs. En particulier nous avons constaté que :

- + le PCGS nécessite toujours un nombre inférieur d'itérations pour atteindre le seuil de convergence, avec un facteur d'au moins 13 pour nos expériences.
- + grâce à notre implémentation récursive efficace, le PCGS est nettement plus efficace en termes de temps de calcul avec un facteur d'accélération moyen de 3,
- + contrairement au Gibbs, le PCGS atteint toujours le seuil de convergence avant d'atteindre le nombre maximal d'itérations prédéfini. Ceci permet de conclure que le PCGS est beaucoup moins susceptible de rester bloqué dans des modes locaux et permet une exploration efficace de la loi *a posteriori*,
- + le PCGS est moins sujet aux diagnostics de convergence erronés ce qui implique que les estimations obtenues par PCGS sont plus souvent pertinentes,
- + en termes de qualité de restitution du support Ω , le PCGS est particulièrement efficace avec en moyenne une précision de 0.9 et un rappel moyen entre 0.5 et 0.7 en fonction du RSB (contre une précision moyenne de 0.83 et un rappel moyen entre 0.5 et 0.6 pour le Gibbs),
- + l'estimation des hyper-paramètres du modèle BMG (paramètre de la séquence de Bernoulli λ et échelle des amplitudes σ_x) ainsi que la variance du bruit ne pose pas de problème permettant ainsi la résolution de problèmes inverses dans un cadre non supervisé.

4.3 Déconvolution impulsionnelle semi-aveugle non négative

Dans cette seconde expérience nous étudions le modèle BMG ainsi que son échantillonneur PCGS dans le cas d'un modèle Bernoulli- \mathcal{D} qui n'admet pas de représentation en mélange de gaussiennes LSMG en prenant en compte une approximation ELSA. Nous allons analyser le modèle Bernoulli-Gaussien-Tronqué [MIB05], qui est un exemple de modèle Bernoulli-D avec une loi \mathcal{D} à support positif, pour modéliser le fait que tous les éléments des trains d'impulsions possèdent des amplitudes non négatives.

De plus, nous considérons un cas semi-aveugle où la réponse impulsionnelle dépend d'un hyper-paramètre inconnu qu'il faut estimer conjointement au reste des hyper-paramètres. Plus précisément nous prenons en compte la réponse impulsionnelle $\mathbf{h}(f_h)$ (4.3) où le paramètre $f_h > 0$ sera considéré inconnu. En pratique, le domaine de f_h est restreint à \mathbb{R}_+ car la fonction $\mathbf{h}(f_h)$ est paire par rapport à f_h .

Échantillonnage dans le cadre semi-aveugle et mise à jour du dictionnaire. Comme le paramètre f_h est le même pour tous les atomes, le dictionnaire $\mathbf{H}(f_h)$ ⁷ est une matrice Toeplitz dont les colonnes sont des versions décalées de $\mathbf{h}(f_h)$. Ainsi, l'échantillonnage de f_h se fait comme le reste des autres hyper-paramètres comme expliqué dans le cas (i) de la section 3.5. À partir de la loi *a posteriori* non marginalisée, la loi *a posteriori* conditionnelle de l'hyper-paramètre f_h s'écrit :

$$p(f_h|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \overline{\mathbf{H}}(f_h)\overline{\mathbf{x}}\|_{\Sigma^{-1}}^2\right) p(f_h)$$

où $p(f_h)$ est l'*a priori* sur f_h . Similairement à la matrice de covariance du bruit Σ (voir section 3.2.3) l'hyper-paramètre f_h dépend uniquement de $\overline{\mathbf{x}}$ et \mathbf{q} à travers la vraisemblance. Ceci implique que son échantillonnage est indépendant du choix de la distribution des amplitudes du modèle *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} . Comme aucune information particulière sur le paramètre f_h n'est disponible, nous prenons en compte un *a priori* (dégénéré) non informatif uniforme sur \mathbb{R}_+ *i.e.*, $f_h \sim \mathcal{U}([0; \infty[)$. Ainsi la loi *a posteriori* conditionnelle de f_h s'écrit⁸ :

$$p(f_h|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \overline{\mathbf{H}}(f_h)\overline{\mathbf{x}}\|_{\Sigma^{-1}}^2\right) \mathbb{1}_{\mathbb{R}_+}(f_h) \quad (4.4)$$

Étant donné que la loi *a posteriori* (4.4) n'est pas une loi usuelle, nous proposons d'effectuer l'échantillonnage de f_h par une étape de Metropolis-Hastings à marche aléatoire RWMH avec une loi gaussienne tronquée comme loi de proposition (voir [Maz05, Section 3.4]).

Modèle *a priori* Bernoulli-Gaussien-Tronqué. Dans cette expérience nous allons considérer l'*a priori* Bernoulli- \mathcal{D} non négatif Bernoulli-Gaussien-Tronqué [MIB05] : la loi \mathcal{D} est une loi gaussienne tronquée $\mathcal{N}^+(0, \sigma_x^2)$. Sa représentation Bernoulli- \mathcal{D} est donnée par :

$$\forall k, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda) \text{ avec } \begin{cases} x_k|q_k = 1 & \sim \mathcal{N}^+(0, \sigma_x^2) \\ x_k|q_k = 0 & \sim \delta_0(x_k) \end{cases} \quad (4.5)$$

Comme la loi gaussienne tronquée n'admet pas de représentation exacte en mélange de gaussiennes nous exploitons l'approximation ELSA de cette dernière (voir Table 3.1 p. 66) pour

⁷Pour faire le lien avec les notations des chapitres précédents, ici le paramètre ν est un scalaire tel que $\nu = f_h$ avec $\forall k, \nu_k = \nu$.

⁸Malgré la prise en compte d'un *a priori* $p(f_h)$ dégénéré, [Maz05, Section 3.3.3.4] ont montré que la loi *a posteriori* $p(f_h|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y})$ est toujours intégrable par rapport à f_h quelle que soit la fonction $\mathbf{h}(f_h)$.

définir notre modèle BMG, soit $\forall k, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda)$ avec

$$\begin{aligned} \text{quand } q_k = 1, & \begin{cases} w_k \sim \mathcal{N}^+(0, \sigma_x^4/\beta^2) \\ x_k|w_k \sim \mathcal{N}(\beta/\sigma_x w_k, w_k), \end{cases} \\ \text{quand } q_k = 0, & \quad x_k = 0 \end{aligned} \quad (4.6)$$

où $\beta > 0$ est le paramètre de l'approximation ELSA. Par rapport au modèle BMG défini en (3.2) et (3.3) (section 3.1 p. 3.1) on a $\mu = 0$. Rappelons que la loi marginale de $x_k|q_k = 1$ est la loi *Normal Truncated Gaussien* (NTG) vue en section 2.3.2 du Chapitre 2.

Échantillonnage de l'hyper-paramètre d'échelle σ_x . Nous avons fait le choix d'échantillonner l'hyper-paramètre d'échelle σ_x à partir de la loi *a posteriori* jointe qui fait intervenir les variables de mélange \mathbf{w} . En effet, la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux variables de mélange fait intervenir la densité de la loi NTG qui est délicate à manipuler car elle fait intervenir une fonction non élémentaire (la fonction $M_\beta(\cdot)$ voir (2.13) p. 46) difficile à évaluer. La loi *a posteriori* conditionnelle du paramètre d'échelle est donnée par :

$$\begin{aligned} p(\sigma_x|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y}) &\propto p(\mathbf{x}, \mathbf{w}|\mathbf{q}, \sigma_x)p(\sigma_x) \\ &\propto \prod_{k|q_k=1} \exp\left(-\frac{(x_k - \beta/\sigma_x w_k)^2}{w_k}\right) (\sigma_x^{-2}) \exp\left(-\frac{\beta^2 w_k^2}{2\sigma_x^4}\right) p(\sigma_x) \\ &\propto (\sigma_x^{-2})^L \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\beta^2/\sigma_x^4 \|\mathbf{w}\|^2 + \beta^2/\sigma_x^2 \|\mathbf{w}\|_1 - 2\beta/\sigma_x \bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{1}\right)\right) p(\sigma_x) \end{aligned}$$

Comme dans l'expérience précédente nous considérons pour l'hyper-paramètre d'échelle σ_x un *a priori* Inverse-Gamma non informatif $\sigma_x \sim \text{IG}(1, 1)$. Cependant, comme $p(\sigma_x|\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}_{-\sigma_x}, \mathbf{y})$ n'est pas une loi usuelle, l'échantillonnage de σ_x est fait avec une étape de Metropolis-Hastings à marche aléatoire RWMH avec la loi gaussienne tronquée comme loi de proposition.

Choix du paramètre d'approximation β . Pour cette expérience nous avons fait le choix, dans un premier temps, de fixer le paramètre d'approximation de façon empirique afin d'étudier le comportement de l'échantillonneur PCGS dans un cadre général. Nous avons choisit $\beta = 30$ telle que la probabilité *a priori* d'avoir une amplitude négative est $P(x_k < 0|q_k = 1) \approx 0.013$ et une variation totale entre l'approximation ELSA *i.e.*, la loi NTG et la loi gaussienne tronquée de TV ≈ 0.037 . Nous reviendrons ensuite, dans la section 4.3.3, sur l'étude de l'échantillonneur PCGS en fonction de β .

4.3.1 Données

Similairement à l'expérience précédente, nous avons généré une base de données de 300 trains d'impulsions de dimension $K = 300$ simulés à partir du modèle Bernoulli-Gaussien-Tronqué. Le paramètre λ^* de la séquence de Bernoulli a été choisi aléatoirement dans l'intervalle $[0.070, 0.13]$, et le paramètre d'échelle des amplitudes a été fixé à $\sigma_x^* = 0.01$. Chaque train d'impulsion est ensuite convolué par la réponse impulsionnelle (4.3) avec $f_h = 3.5$. La base de données est ensuite divisée en trois parties égales et chacune est perturbée par un bruit additif gaussien et i.i.d. permettant d'avoir des rapports signal sur bruit (RSB) de 15, 12 et 9 dB respectivement. Un exemple de train d'impulsion \mathbf{x} ainsi que les données simulées \mathbf{y} correspondantes sont représentés Figure 4.11.

4.3.2 Analyse des résultats

Pour chaque signal de la base de données nous avons effectué une déconvolution non supervisée (c'est-à-dire en estimant les hyper-paramètres $\boldsymbol{\theta} = [\lambda, \sigma, \sigma_x]$) et semi-aveugle (c'est-à-dire

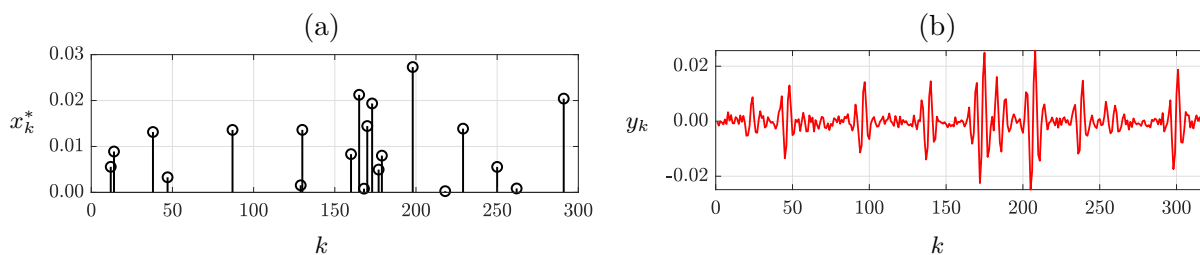


FIGURE 4.11 : (a) exemple de train d'impulsions (amplitudes) non négatives \mathbf{x} , (b) données simulées \mathbf{y} correspondantes bruitées dans le cas d'un RSB = 12 dB.

en estimant l'hyper-paramètre f_h de la réponse impulsionnelle) avec d'un côté l'échantillonneur PCGS du modèle BMG (4.6) et de l'autre l'échantillonneur Gibbs avec le modèle Bernoulli-Gaussien-Tronqué [MIB05]. Dans la Figure 4.12 sont donnés les résultats de déconvolution pour un exemple de la base de donnée (exemple illustrée Figure 4.11-(b)) où les deux échantillonneurs donnent des résultats d'estimation similaires, de plus le PCGS permet de restaurer une estimation non négative en dépit de l'approximation.

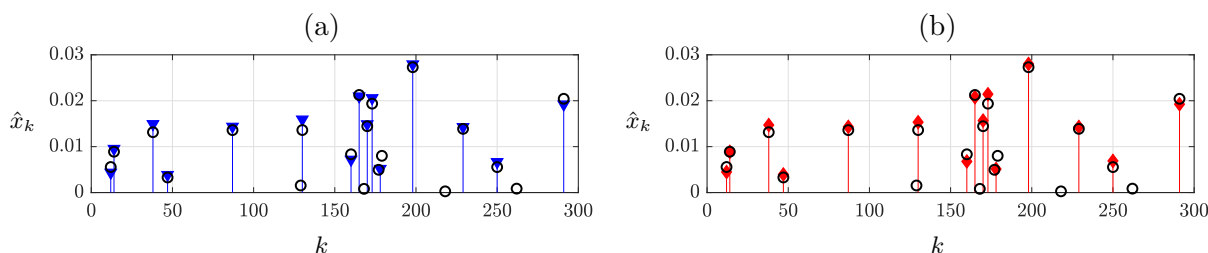


FIGURE 4.12 : Résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par : (a) PCGS et (b) Gibbs, après convergence.

Les supports Ω restitués par les deux échantillonneurs sont exactement identiques, avec une précision PR = 0.93 et un rappel RC = 0.7. Pour chacun des échantillonneurs, l'évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations est donnée dans la Figure 4.13 où le PCGS franchit le seuil de convergence au bout de 3000 itérations alors que le Gibbs a besoin de 36000 itérations pour converger. En termes de coût de calcul, cela représente un facteur d'accélération de ≈ 4 , le temps de calcul nécessaire aux deux échantillonneurs pour atteindre le seuil de convergence étant de 50 et 204 secondes respectivement.

Analyse globale des résultats. Dans la Figure 4.14 sont donnés les *boxplots* du nombre d'itérations ainsi que du temps de calcul en secondes nécessaires pour atteindre le seuil de convergence. Encore une fois, ces résultats montrent l'efficacité du PCGS à la fois en termes de nombre d'itérations et en temps de calcul. Plus précisément, le PCGS nécessite en moyenne 5.1×10^3 itérations pour converger alors que le Gibbs requiert 4×10^4 itérations, soit un facteur de l'ordre de ≈ 8.4 . En termes de coût de calcul, le PCGS converge en moyenne au bout de 90 secondes alors que le Gibbs a besoin de 147 secondes, ce qui correspond à un facteur d'accélération de l'ordre de 1.6. Rappelons qu'à cause de notre configuration du MPSRF ces facteurs d'accélération sont sous-estimés. En effet, pour l'échantillonneur Gibbs, 74 exemples parmi les 300 ($\approx 24\%$) n'ont pas atteint le seuil de convergence au bout des $T = 10^5$ itérations.

Remarque. Remarquons que les temps de calcul moyens pour atteindre la convergence du PCGS a augmenté par rapport à l'expérience précédente (cas du Bernoulli-Laplace), et la raison est

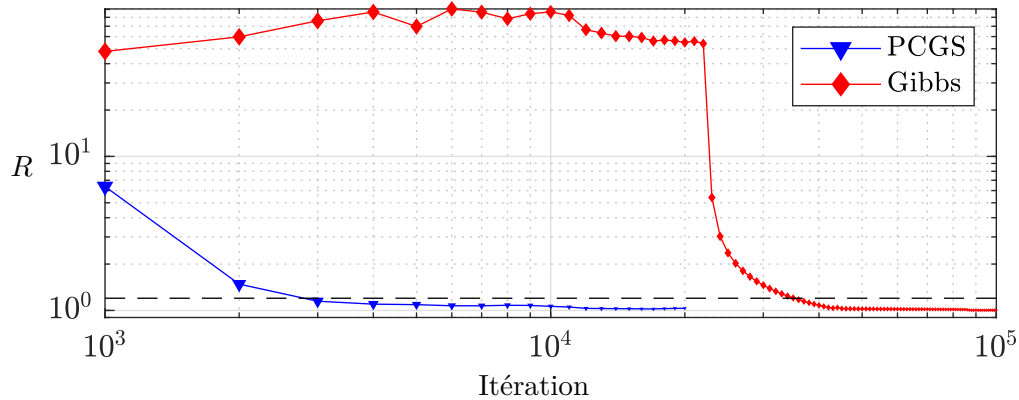


FIGURE 4.13 : Évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations des échantillonneurs PCGS et Gibbs. La ligne pointillée horizontale représente le seuil de convergence à 1.2.

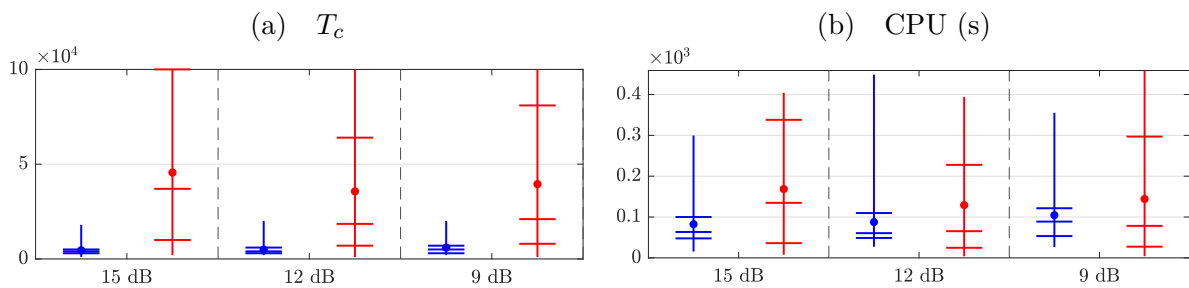


FIGURE 4.14 : Analyse de l'efficacité de convergence : (a) nombre d'itérations T_c et (b) temps de calcul nécessaire pour atteindre la convergence sur 100 signaux de la base de données. PCGS en bleu, Gibbs en rouge.

double :

1. nous avons vu dans le Chapitre 2 section 2.4.1 que l'efficacité des échantillonneurs utilisant les approximations ELSA se dégrade en augmentant la valeur de β or dans le cas Bernoulli-Laplace nous avons $\beta = 0$ et ici nous avons $\beta = 30$,
2. dans le cas d'un a priori BMG symétrique par rapport à l'origine (i.e., $\beta = \mu = 0$) le calcul des probabilités d'acceptations se simplifie, car ce dernier ne dépend plus des fonctions ϕ (voir Remarque 5 p. 77), ce qui implique que le coût par itération du BMG dans le cas Bernoulli-Laplace est inférieur au cas Bernoulli-Gaussien-Tronqué⁹

Pour les 300 signaux de la base de données, aucune détection négative n'a été produite par le PCGS grâce à la prise en compte d'un *a priori* asymétrique et en dépit de l'approximation effectuée par le modèle BMG. En termes de qualité de restitution du support, les résultats de l'expérience sont résumés dans la Figure 4.15. Globalement, nous constatons que les performances des deux échantillonneurs sont assez similaires, avec une précision supérieure à 0,9 pour 75% des cas (dont 25% avec une précision de 1) et des valeurs de rappel en moyenne entre 0,6 et 0,9.

Toutefois, nous constatons que la précision moyenne du PCGS est inférieure à celle du Gibbs ce qui implique que le PCGS présente parfois des faux positifs. *A contrario*, le rappel moyen

⁹Notons que grâce à notre implémentation efficace le coût de calcul de l'évaluation de la fonction ϕ est relativement faible. Cependant, celle-ci est évaluée au moins K fois par itération.

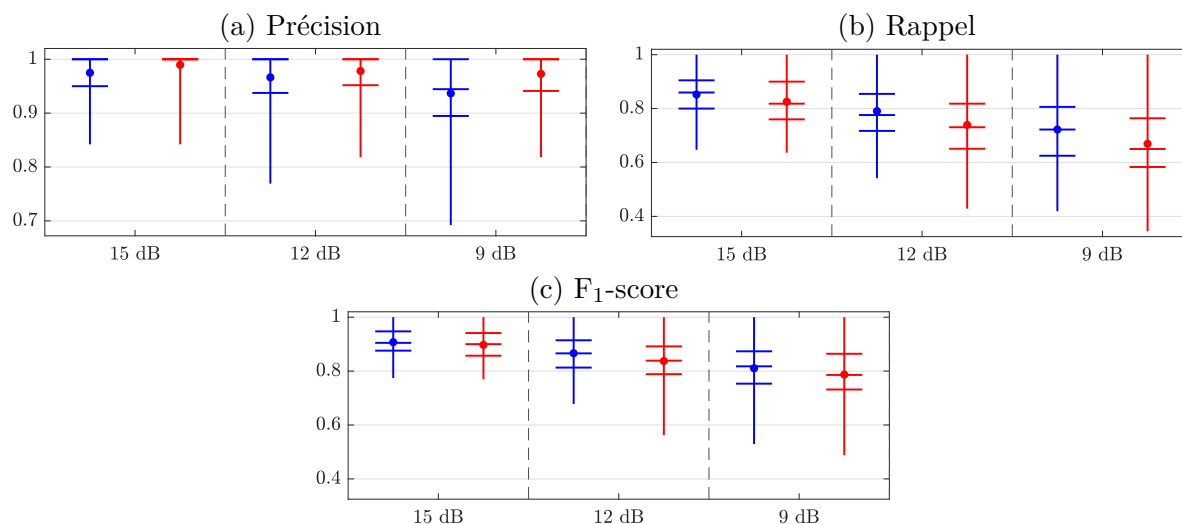


FIGURE 4.15 : Analyse de la qualité de l'estimation : (a) précision, (b) rappel et (c) F_1 -score des séquences de Bernoulli \mathbf{q} estimées. PCGS en bleu et Gibbs en rouge.

du PCGS est supérieur à celui du Gibbs, ce qui implique que le PCGS présente moins de faux négatifs que le Gibbs. Pour départager les deux échantillonneurs, nous avons également tracé dans la Figure 4.15-(c) les *boxplots* du F_1 -score¹⁰ qui montrent qu'en moyenne le PCGS donne des meilleures estimations (au sens du F_1 -score) que le Gibbs.

Estimation des hyper-paramètres. Comme pour l'expérience précédente, nous allons montrer l'efficacité de l'échantillonnage, et donc l'estimation, des hyper-paramètres en analysant les chaînes de Markov produites par l'échantillonneur. Cependant, l'échantillonnage de l'hyper-paramètre de la séquence de Bernoulli λ et de la variance du bruit σ sont identiques à l'expérience précédente. Donc, nous illustrons ici uniquement l'échantillonnage du paramètre d'échelle des amplitudes σ_x et du paramètre de la réponse impulsionnelle h_f . La Figure 4.16 représente, pour chacun des hyper-paramètres σ_x et f_h , les 800 premières itérations de trois chaînes de Markov générés par le PCGS pour un exemple de la base de données.

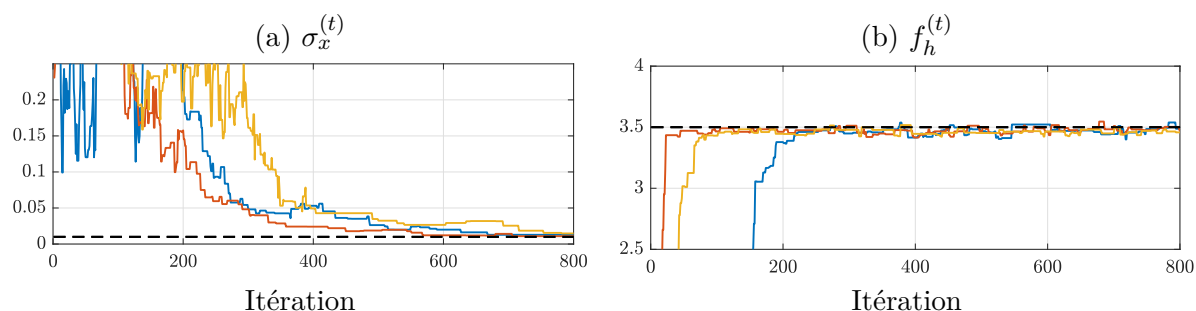


FIGURE 4.16 : Analyse de l'efficacité de l'échantillonnage des hyper-paramètres. Représentation de trois chaînes de Markov pour les 800 premières itérations du PCGS : (a) paramètres d'échelle des amplitudes σ_x . La ligne noire pointillée représente la vraie valeur de l'hyper-paramètre.

¹⁰Le F_1 -score est une mesure de l'exactitude d'une classification binaire calculée à partir de la précision et du rappel : $F_1 = 2 (\text{PR}^{-1} + \text{RC}^{-1})$. En d'autres termes, le F_1 -score est la moyenne harmonique de la précision et du rappel.

Encore une fois, nous constatons que les chaînes des hyper-paramètres se stabilisent et convergent rapidement autour de la vraie valeur de l'hyper-paramètre. Ceci montre que l'échantillonnage, et donc l'estimation du paramètre d'échelle des amplitudes σ_x et du paramètre de la réponse impulsionnelle ne causent aucun problème particulier. Notons que l'échantillonnage de ces deux hyper-paramètres est effectué par Metropolis-Hastings à marche aléatoire (RWMH) ce qui explique pourquoi les chaînes restent parfois dans le même état pour plusieurs itérations.

Bilan de l'expérience Cette expérience montre empiriquement l'efficacité de l'échantillonneur PCGS du modèle BMG dans le cas d'un *a priori* avec une loi à support réduit, grâce à la prise en compte des approximations ELSA. En particulier nous avons illustré que :

- + il permet l'estimation non négative des amplitudes malgré le fait que loi ne soit pas strictement à support positif,
- + la qualité de restauration du support est identique à celle du Gibbs en termes de précision, rappel et F_1 ,
- + le PCGS est plus performant en termes de nombre d'itérations et de temps de calcul que le Gibbs avec un facteur d'accélération moyen allant jusqu'à 2.7.
- + l'estimation non supervisée des hyper-paramètres du modèle BMG, de la variance du bruit ainsi que de l'hyper-paramètre de la réponse impulsionnelle (cas semi-aveugle) était possible pour une telle approche,
- néanmoins, cette approche nécessite de fixer le paramètre d'approximation β empiriquement.

4.3.3 Analyse des résultats en fonction du paramètre d'approximation β .

Dans l'expérience précédente, le paramètre β , qui permet de régler la qualité de l'approximation ELSA, a été fixé de façon arbitraire à $\beta = 30$. Ici, nous étudions l'échantillonneur PCGS du modèle *a priori* BMG (4.6) en fonction des valeurs que peut prendre ce paramètre. Rappelons que dans le contexte de cette expérience de déconvolution non négative, β permet de contrôler la probabilité *a priori* d'avoir une amplitude négative $P(x_k | q_k = 1)$ qui est une fonction décroissante de β .

Pour chaque valeur de $\beta \in S_\beta = \{1, 10, 20, \dots, 80\}$ nous avons effectué une déconvolution non supervisée et semi-aveugle sur 100 signaux de la base de données (de RSB = 12 dB). Dans la Figure 4.17 nous avons tracé un nuage de points qui représente le temps de calcul moyen nécessaire pour atteindre la convergence en fonction de la proportion moyenne N_x d'amplitudes négatives générées par le PCGS pour chaque valeur de $\beta \in S_\beta$, où N_x est estimé comme suit :

$$N_x = \frac{1}{J} \sum_j N_x^j \quad \text{avec} \quad N_x^j = \frac{\sum_{t \in I_c} \|\mathbf{x}_j^{(t)}\|_0^-}{\sum_{t \in I_c} \|\mathbf{x}_j^{(t)}\|_0}$$

où $\mathbf{x}_j^{(t)}$ est le vecteur \mathbf{x} généré par la chaîne j à l'itération t et $\|\mathbf{x}\|_0^-$ représente le nombre d'éléments strictement négatifs du vecteur \mathbf{x} .

Ce nuage de points montre clairement qu'une grande valeur de β permet de réduire la proportion d'échantillons négatifs (plus β est grand plus on se rapproche du cas non négatif) au prix d'un coût de calcul élevé (plus β est grand plus la corrélation entre x_k et w_k est grande). À l'opposé, une valeur faible de β permet d'augmenter l'efficacité du PCGS mais avec une proportion d'échantillons négatifs plus grande. La courbe de tendance qui relie les différents

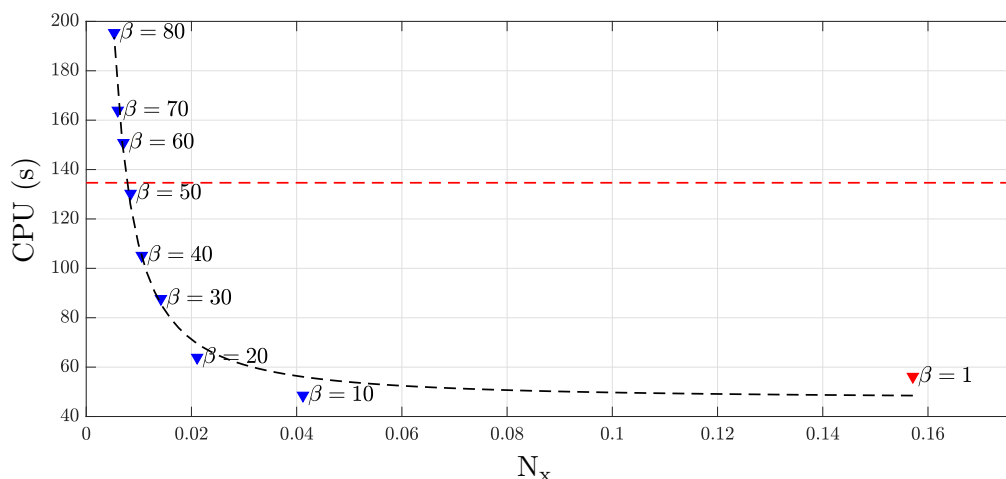


FIGURE 4.17 : Coût de calcul moyen sur 100 signaux en fonction de la proportion d’amplitudes négatives générées. La courbe noire pointillée représente une approximation de la forme $g(t) = at^b + c$ du nuage de points qui possède la forme d’une courbe en L.

points a la forme d’une courbe en L (*L-curve*) [Han92] qui se traduit comme un compromis entre le nombre d’échantillons non négatifs générés par le PCGS et son efficacité en termes de coût de calcul. La valeur de β qui donne le meilleur compromis se trouve dans le coude de cette courbe en L *i.e.*, $\beta \in [10, 30]$.

En termes de restauration du signal, à l’exception du cas $\beta = 1$ (qui correspond à $P(x_k < 0 | q_k = 1) = 0.219$) où 37% des signaux restaurés présentent des amplitudes négatives, toutes les autres valeurs de $\beta > 1$ ont permis de restaurer des signaux non négatifs. Les facteurs d’accélération (FA) en termes de temps calcul sont donnés dans la Table 4.1. Cela implique que le cas $\beta = 10$ permet de restaurer des amplitudes non négatives avec un facteur d’accélération de 2.7 par rapport à l’échantillonneur de Gibbs. Toutefois, pour des valeurs de $\beta > 50$ nous constatons que le PCGS est moins performant que le Gibbs.

TABLE 4.1 : Facteur d’accélération FA en termes de temps de calcul apporté par l’échantillonneur PCGS en comparaison de l’échantillonneur de Gibbs en fonction du paramètre β .

β	1	10	20	30	40	50	60	70	80
FA	—	2.7747	2.1080	1.5356	1.2806	1.0335	0.8927	0.8213	0.6892

Par ailleurs, la qualité de restitution du support en termes de précision, rappel et F_1 -score est comparable à celle du Gibbs $\forall \beta \in \{10, 20, \dots, 80\}$ (voir Figure 4.18), et l’interprétation des résultats est identique à celle que nous avons donnée pour le cas $\beta = 30$.

Finalement, notons que cette approche basée sur la méthode (*L-curve*) ne constitue pas une approche systématique pour l’estimation du paramètre β . En effet, elle requiert d’effectuer plusieurs déconvolutions pour différentes valeurs de β . Toutefois, les résultats de cette expérience montrent qu’il existe une valeur « optimale » de β permettant de régler le compromis entre coût de calcul et restauration de signaux non négatifs. Par ailleurs, cette conclusion encourage à étudier des approches non supervisées permettant de déterminer le paramètre β à partir de données.

Échantillonnage du paramètre d’approximation β . Une approche intuitive, s’inscrivant dans le cadre bayésien, serait de considérer le paramètre β comme un hyper-paramètre et de

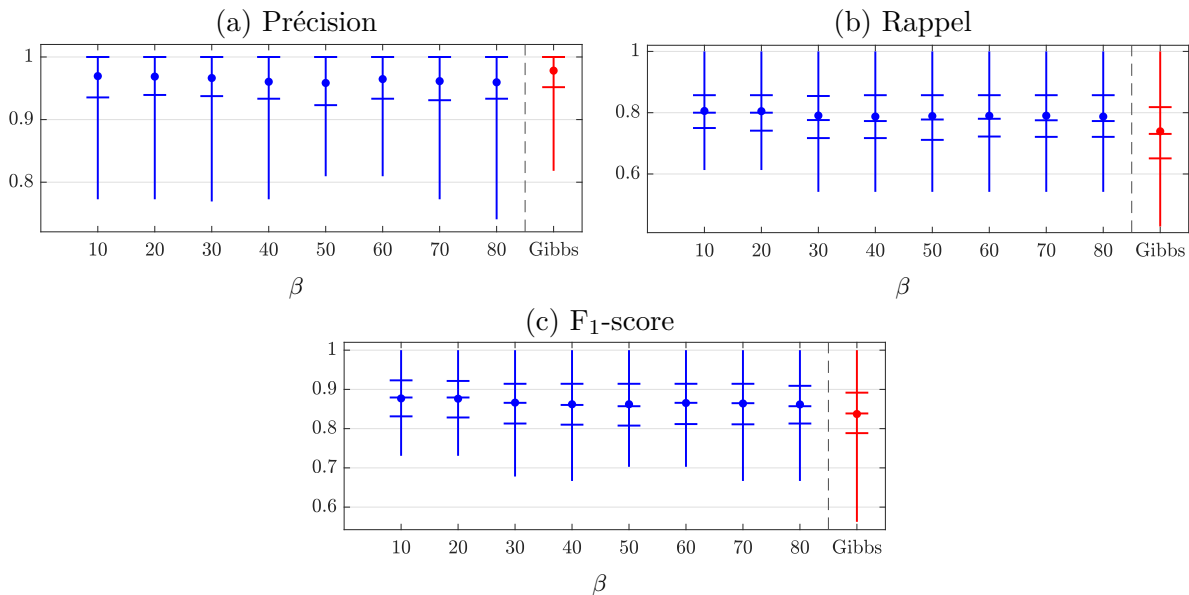


FIGURE 4.18 : Analyse de la qualité de l'estimation en fonction du paramètre β : (a) précision, (b) rappel et (c) F_1 -score des séquences de Bernoulli \mathbf{q} estimées. PCGS en bleu et Gibbs en rouge.

l'échantillonner conjointement au reste des paramètres. Toutefois, cette approche s'avère contre-productive car la loi *a posteriori* du paramètre β est dégénérée. En effet, la convergence en probabilité de l'approximation ELSA (voir Théorème 5 p. 44) implique la convergence en loi :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} p_{LS}(x, \beta) = p_{\mathcal{D}}(x)$$

où $p_{LS}(x, \beta)$ et $p_{\mathcal{D}}(x)$ sont les densités de l'approximation ELSA et de la loi cible à support positif \mathcal{D} respectivement. Alors,

$$\forall x_0 \in \mathbb{R}_+, \lim_{\beta \rightarrow \infty} p_{LS}(x_0, \beta) = p_{\mathcal{D}}(x_0) > 0,$$

ce qui implique que $p_{LS}(x_0, \beta)$ a une asymptote horizontale en $\beta \rightarrow \infty$. On conclut donc que

$$\forall x_0 \in \mathbb{R}_+, \int_{\mathbb{R}_+} p_{LS}(x_0, \beta) d\beta \text{ diverge.}$$

Pour éviter d'avoir une loi *a posteriori* dégénérée, il est possible de choisir un *a priori* adéquat pour le paramètre β . Cependant, le choix de cet *a priori* n'est pas une tâche évidente. Un *a priori* qui favorise les valeurs faibles (*e.g.*, *a priori* exponentiel) aura tendance à sous-estimer β , ce qui risque d'engendrer des détections négatives. À l'opposé, un *a priori* non informatif permettrait à β de prendre de grandes valeurs ce qui risque de compromettre l'efficacité de l'échantillonneur PCGS. Ce constat nous a donc mené à étudier d'autres approches pour le réglage automatique de l'approximation ELSA. Nous reviendrons sur la question en proposant quelques idées et résultats préliminaires dans le chapitre conclusif de ce manuscrit.

4.4 Bilan

Les expériences que nous avons présentées dans ce chapitre nous ont permis d'étudier et de valider le modèle BMG motivé par l'objectif principal de cette thèse à savoir concilier les modèles

Bernoulli- \mathcal{D} non gaussiens avec l'échantillonnage PCGS. Ci-dessous nous faisons le bilan de ces expériences :

- + Le modèle BMG permet de prendre en compte de façon systématique différents modèles de type Bernoulli- \mathcal{D} où la loi \mathcal{D} est une loi LSMG.
- + Grâce à la prise en compte des approximations ELSA, le champ d'application du modèle BMG a été étendu aux cas de lois à support réduit telle que les lois à support positif.
- + L'échantillonnage PCGS efficace comparé à l'échantillonneur Gibbs en termes de nombre d'itérations et en coût de calcul,
- + La qualité de restauration du signal est comparable, voire meilleure, que celle de l'échantillonneur de Gibbs, y compris dans le cas d'un *a priori* avec l'approximation ELSA,
- + Comme pour l'échantillonneur de Gibbs, le PCGS permet une estimation non supervisée et/ou semi-aveugle des hyper-paramètres.
- Cependant, dans le cas d'un *a priori* avec l'approximation ELSA, le paramètre d'approximation β doit être fixé empiriquement.

Chapitre 5

LSMG et méthodes d'optimisation semi-quadratiques asymétriques

Sommaire

5.1	Introduction	103
5.2	Approches semi-quadratiques GR asymétriques (AGR)	105
5.3	Interprétation bayésienne du schéma AGR	107
5.4	Bilan et perspectives	110

Les approches d'optimisation semi-quadratiques asymétriques proposées dans la littérature (e.g., [MCB⁺05]) se basent uniquement sur le schéma GY [GY95]. Nous proposons dans ce chapitre une nouvelle approche semi-quadratique inspirée de nos travaux sur les lois de la classe LSMG. Cette approche, dite AGR pour *Asymmetric Geman-Reynolds* est une généralisation du schéma semi-quadratique GR [GR92] au cas asymétrique.

En exploitant les propriétés des lois LSMG proposées dans le Chapitre 2, nous montrons que l'approche AGR est équivalente, sous certaines conditions, à un estimateur du maximum *a posteriori* (MAP) associé à un algorithme *Expectation-Maximization* (EM) [DLR77] impliquant des lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG.

Notons que ce chapitre présente quelques résultats théoriques préliminaires de l'approche AGR qui nécessiteraient une étude approfondie tant du point de vue algorithmique que de leur application pratique.

5.1 Introduction

Nous considérons dans ce chapitre le problème d'optimisation qui consiste à minimiser une fonction coût de la forme suivante :

$$\min_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}), \text{ avec } J(\mathbf{x}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_m^M \phi([\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}]_m) \quad (5.1)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^K$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^M$, $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times K}$, $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, est une fonction de régularisation non-quadratique, et $Q : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction quadratique

$$Q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^T \mathbf{\Omega} (\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})$$

qui représente le terme d'attache aux données \mathbf{y} sous le modèle linéaire $\mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \boldsymbol{\epsilon}$ où $\boldsymbol{\epsilon}$ est le bruit d'observation et de modélisation¹. Rappelons que les approches semi-quadratiques

¹Notons que le cas d'une fonction de régularisation quadratique (ou quelconque) et d'un terme d'attache aux données lié à la fonction ϕ peut également être considéré en échangeant les rôles de \mathbf{A} , \mathbf{b} et de \mathbf{H} , \mathbf{y} .

5.1. Introduction

reformulent le problème (5.1) en considérant un critère augmenté $K(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ grâce à l'introduction de variables latentes $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^K$ telles que :

$$\inf_{\mathbf{u}} K(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = J(\mathbf{x}) \implies \inf_{\mathbf{u}, \mathbf{x}} K(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \inf_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}).$$

Nous avons vu dans le Chapitre 1 qu'il existe deux méthodes semi-quadratiques introduites dans [GR92, GY95] dont les critères augmentés respectifs sont donnés par :

$$K_{\text{GR}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2} u_m (t_m)^2 + \psi_{\text{GR}}(u_m) \right), \text{ avec } u_m \in \mathbb{R}_+$$

$$K_{\text{GY}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2\alpha} (t_m - u_m)^2 + \psi_{\text{GY}}(u_m) \right), \text{ avec } u_m \in \mathbb{R}, \alpha \in \mathbb{R}_+$$

où $t_m = [\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}]_m$ et ψ_{GR} et ψ_{GY} sont des fonctions liées aux fonctions ϕ_{GR} et ϕ_{GY} respectivement [Idi01]. Les schémas de minimisation de ces deux critères par l'algorithme *Block Coordinate Descent* sont détaillés dans la Table 5.1.

TABLE 5.1 : Minimisation des critères semi-quadratiques K_{GR} et K_{GY} par l'algorithme de type *Block Coordinate Descent* où $\mathbf{U} = \text{diag}\{\mathbf{u}\}$.

Étape (1)	Étape (2)
GR : $[\mathbf{u}_{\text{GR}}^{(t+1)}]_m = \frac{\phi'(t_m^{(t)})}{t_m^{(t)}}$,	$\mathbf{x}_{\text{GR}}^{(t+1)} = \left(\mathbf{H}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{H} + \mathbf{A}^T \mathbf{U}^{(t+1)} \mathbf{A} \right)^{-1} \left(\mathbf{H}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{y} + \mathbf{A}^T \mathbf{U}^{(t+1)} \mathbf{b} \right)$
GY : $[\mathbf{u}_{\text{GY}}^{(t+1)}]_m = t_m^{(t)} - \phi'(t_m^{(t)})$,	$\mathbf{x}_{\text{GY}}^{(t+1)} = \left(\alpha \mathbf{H}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{H} + \mathbf{A}^T \mathbf{A} \right)^{-1} \left(\alpha \mathbf{H}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{y} + \mathbf{A}^T \left(\mathbf{b} + \mathbf{u}^{(t+1)} \right) \right)$

Les conditions nécessaires sur la fonction ϕ pour considérer ces deux schémas sont listées dans la Table 5.2.

TABLE 5.2 : Conditions nécessaires sur ϕ permettant de considérer les schémas semi-quadratiques GR et GY.

Schéma	GR	GY
Conditions	ϕ est paire, ϕ est \mathcal{C}^1 sur \mathbb{R}^* , $\phi(\sqrt{x})$ est concave sur \mathbb{R}_+ ,	$\exists \alpha > 0$, $\frac{x^2}{2} - \alpha \phi(x)$ est convexe,

Clairement, l'hypothèse de parité de ϕ empêche le schéma GR de traiter les cas asymétriques. À l'inverse, le schéma GY n'impose aucune condition sur la parité de ϕ . Dans [MCB⁺05], deux fonctions GY asymétriques (AGY) ont été étudiées pour l'estimation de la ligne de base de spectres de raies :

— Huber asymétrique :

$$\phi_{\text{GY}}(x) = \begin{cases} x^2 & \text{si } x < s, \\ 2sx - s^2 & \text{sinon.} \end{cases}$$

— Quadratique tronquée asymétrique :

$$\phi_{\text{GY}}(x) = \begin{cases} x^2 & \text{si } x < s, \\ s^2 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ces deux fonctions ont un comportement asymptotique différent à droite et à gauche de l'origine. En effet, quand $x \rightarrow -\infty$ les deux fonction ont un comportement asymptotique quadratique, alors que quand $x \rightarrow \infty$ la fonction Huber asymétrique a un comportement linéaire et la fonction quadratique tronquée asymétrique a un comportement constant (voir Figure 5.1).

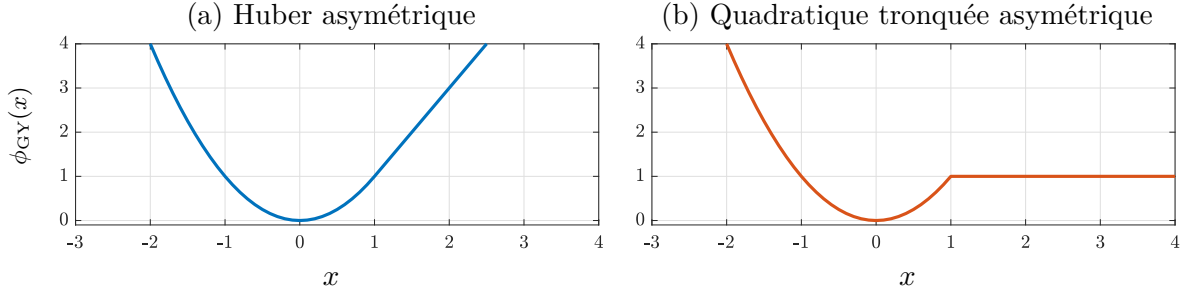


FIGURE 5.1 : Fonctions semi-quadratiques asymétriques GY (AGY) proposées par [MCB+05] avec $s = 1$.

Toutefois, la condition du schéma GY implique que les fonctions ϕ_{GY} sont nécessairement lisses à l'origine, contrairement au schéma GR qui permet de prendre en compte des fonctions non lisses à l'origine favorisant la parcimonie. Il est donc intéressant d'étudier la prise en compte des fonctions asymétriques dans le schéma GR.

5.2 Approches semi-quadratiques GR asymétriques (AGR)

Pour généraliser le schéma GR au cas asymétrique nous proposons de considérer les fonctions $\phi_\beta : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ qui s'écrivent comme suit :

$$\phi_\beta(x) = \phi_{\text{GR}}(x) - \beta x, \quad (5.2)$$

où ϕ_{GR} est une fonction qui satisfait les conditions du schéma GR données dans la Table 5.2 et β est un paramètre réel tel que $\lim_{|x| \rightarrow \infty} \phi_\beta(x) > 0$. Étant donné que ϕ_{GR} est paire ϕ_β est une fonction asymétrique $\forall \beta \neq 0$. Le paramètre β permet de gérer l'asymétrie de la fonction :

- si $\beta > 0$ alors $\forall x_0 \geq 0, \phi_\beta(-x_0) \geq \phi_\beta(x_0)$,
- si $\beta < 0$ alors $\forall x_0 \geq 0, \phi_\beta(-x_0) \leq \phi_\beta(x_0)$,
- le cas $\beta = 0$ est trivial car $\phi_\beta(x) = \phi_{\text{GR}}(x)$ et donc ϕ_β est symétrique.

En d'autres termes, si $\beta > 0$ la fonction ϕ_β impose un régularisation plus forte aux valeurs négatives, et inversement si $\beta < 0$.

Dans la Table 5.3 nous donnons quelques exemples de ce type de fonctions. Celles-ci peuvent être vues comme une généralisation des fonctions semi-quadratiques GR symétriques. En effet, les fonctions $\ell_1 - \ell_1$ et hyperbolique asymétrique sont des versions asymétriques de la fonction valeur absolue et de la fonction hyperbolique (e.g., [CBFAB94, CI10]). Ces deux fonctions ont une asymptote linéaire avec un coefficient directeur $\alpha - \beta$ (respectivement $-\alpha - \beta$) quand

5.2. Approches semi-quadratiques GR asymétriques (AGR)

$x \rightarrow \infty$ (respectivement $x \rightarrow -\infty$). La fonction $\ell_1 - \ell_0$ est une version asymétrique de la fonction Geman-McClure (e.g., [CJPT13, CI10]). Finalement, la fonction Huber-GR asymétrique est l'analogue GR de la fonction Huber asymétrique introduite dans [MCB⁺05], avec un comportement asymptotique linéaire quand $|x| \rightarrow \infty$.

TABLE 5.3 : Exemples de fonctions semi-quadratiques asymétriques. Le paramètre α permet d'attribuer un poids à la fonction symétrique ϕ_{GR} , β permet de contrôler l'asymétrie des fonctions, et s le comportement autour du minimum.

Fonction	ϕ_β	Domaines de définition	$\arg \min_x \phi_\beta(x)$
$\ell_1 - \ell_1$	$\alpha x - \beta x$	$\alpha \in \mathbb{R}_+, \beta < \alpha$	0
Hyperbolique asymétrique	$\alpha\sqrt{x^2 + s^2} - \beta x$	$\alpha, s \in \mathbb{R}_+, \beta < \alpha$	$\frac{\beta s}{\sqrt{\alpha^2 - \beta^2}}$
$\ell_1 - \ell_0$	$\frac{x^2}{x^2 + s^2} + \beta x - \beta x$	$s \in \mathbb{R}_+, \beta \in \mathbb{R}$	0
Huber-GR asymétrique	$\begin{cases} x^2 - \beta x, & x \leq s \\ 2s x - s^2 - \beta x, & \text{sinon} \end{cases}$	$s \in \mathbb{R}_+, \beta < 2s$	$\frac{\beta}{2}$

La Figure 5.2 donne une représentation graphique des fonctions semi-quadratiques asymétriques présentées dans la Table 5.3. Notons que les fonctions ont été décalées afin d'avoir $\arg \min_x \phi_\beta(x) = 0$ et $\inf_x \phi_\beta(x) = 0$.

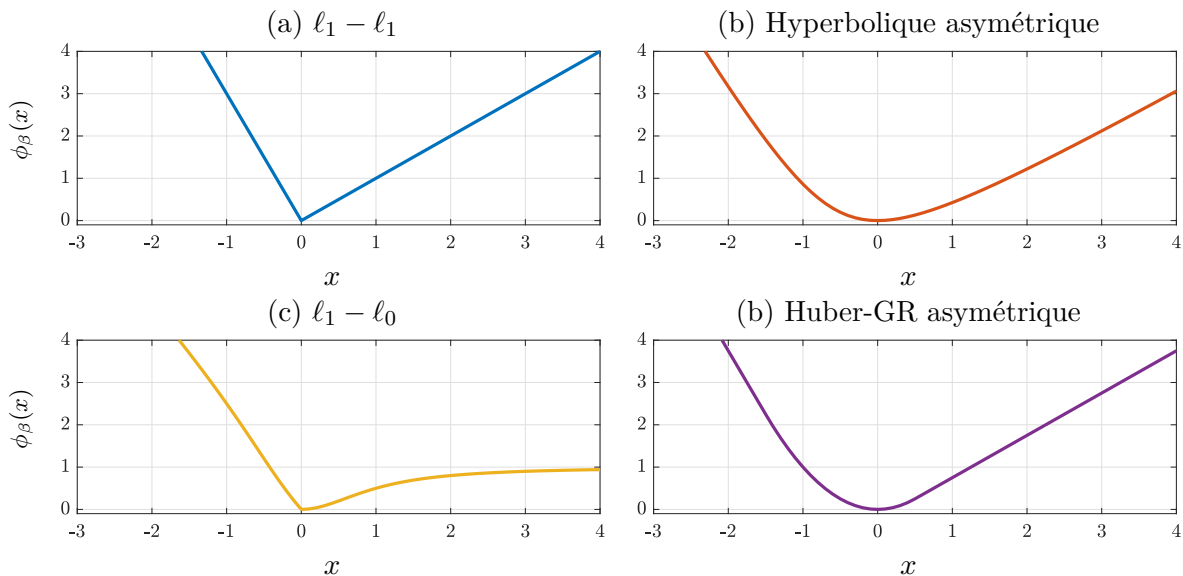


FIGURE 5.2 : Exemples de fonctions semi-quadratiques asymétriques. Les paramètres ont été fixés à $\alpha = 2$, $\beta = 1$ et $s = 1$. Les fonctions ont été décalées afin d'avoir $\arg \min_x \phi_\beta(x) = 0$ et $\inf_x \phi_\beta(x) = 0$.

Schéma de minimisation AGR En prenant en compte une fonction ϕ_β asymétrique dans le critère (5.1) celui-ci s'écrit :

$$J(\mathbf{x}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \phi_\beta(t_m) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \phi_{\text{GR}}(t_m) - \beta t_m$$

En exploitant les propriétés des fonctions semi-quadratiques ϕ_{GR} on peut écrire le critère augmenté en introduisant des variables latentes \mathbf{u} :

$$K_{\text{GR}}^\beta(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = Q(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M \left(\frac{1}{2} u_m (t_m)^2 - \beta t_m + \psi_{\text{GR}}(u_m) \right)$$

où ψ_{GR} est une fonction liée à la conjuguée convexe de ϕ_{GR} (voir [Idi01]).

Il est immédiat de constater que le critère augmenté $K_{\text{GR}}^\beta(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(t)})$ est quadratique en \mathbf{x} quand $\mathbf{u}^{(t)}$ est fixé. Par ailleurs, comme $\forall m, \beta t_m$ est indépendant de \mathbf{u} , le minimiseur en \mathbf{u} du critère augmenté $K_{\text{GR}}^\beta(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u})$ est identique au minimiseur en \mathbf{u} du critère $K_{\text{GR}}(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u})$, soit :

$$\forall m, \arg \min_{u_m} K_{\text{GR}}^\beta(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u}) = \frac{\phi'_{\text{GR}}(t_m^{(t)})}{t_m^{(t)}} = \frac{\phi'_\beta(t_m^{(t)}) + \beta}{t_m^{(t)}}$$

Ainsi le schéma de minimisation du critère $K_{\text{GR}}^\beta(\mathbf{x}^{(t)}, \mathbf{u})$ par l'algorithme *Block Coordinate Descent*, qui sera dénommé AGR pour *Asymmetric GR*, est donné par les deux étapes résumées dans la Table 5.4.

TABLE 5.4 : Schéma AGR pour la minimisation du critère semi-quadratique asymétrique $K_{\text{GR}}^\beta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ par algorithme de type *Block Coordinate Descent* où $\mathbf{U} = \text{diag}\{\mathbf{u}\}$

Étape (1) :	$[\mathbf{u}_{\text{AGR}}^{(t+1)}]_m = \frac{\phi'_{\text{GR}}(t_m^{(t)})}{t_m^{(t)}} = \frac{\phi'_\beta(t_m^{(t)}) + \beta}{t_m^{(t)}}$
Étape (2) :	$\mathbf{x}_{\text{AGR}}^{(t+1)} = \left(\mathbf{H}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{H} + \mathbf{A}^T \mathbf{U}^{(t+1)} \mathbf{A} \right)^{-1} \left(\mathbf{H}^T \mathbf{\Omega} \mathbf{y} + \mathbf{A}^T (\mathbf{U}^{(t+1)} \mathbf{b} + \beta \mathbf{1}) \right)$

Le schéma de minimisation AGR peut être vu comme une généralisation du schéma GR classique. En effet, le cas $\beta = 0$ est strictement équivalent au schéma de minimisation GR présenté dans la Table 5.1. Par ailleurs, la complexité algorithmique du schéma AGR est identique à celle du schéma GR classique, car la seule différence intervient dans l'étape (2) qui fait apparaître le vecteur $\beta \mathbf{1}$. Toutefois, le vecteur $\beta \mathbf{A}^T \mathbf{1}$ peut être calculé une fois pour toutes lors de l'initialisation de l'algorithme.

5.3 Interprétation bayésienne du schéma AGR

De façon similaire aux travaux de [CI04] nous donnons ici une interprétation bayésienne du schéma AGR et montrons que ce dernier peut être interprété comme un cas particulier de l'algorithme EM quand les variables cachées font intervenir des lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG.

Notons que le critère (5.1) est équivalent à la maximisation de la densité de probabilité *a posteriori* suivante :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x}) \tag{5.3}$$

où $p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{H}\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}^{-1})$ représente la vraisemblance des données \mathbf{y} , supposée gaussienne, et

$$p(\mathbf{x}) \propto \exp\left(-\sum_m^M \phi_\beta(t_m)\right) \text{ avec } t_m = [\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}]_m, \quad (5.4)$$

représente l'*a priori* sur \mathbf{x} . Par la suite nous supposons que la matrice \mathbf{A} est de rang K et que $\int_{\mathbb{R}} p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} < \infty$ tel que (5.4) définit bien une densité de probabilité.

Introduction des variables cachées. La maximisation de la densité *a posteriori* (5.3) par l'algorithme EM requiert l'augmentation des données \mathbf{y} par l'introduction de variables cachées. On considère ici une densité de probabilité $p_T(\cdot) \propto \exp(-\phi_\beta(\cdot))$ de la classe LSMG où les variables de mélange vont jouer le rôle des variables cachées. Toutefois, afin de rester en adéquation avec la définition du schéma AGR, nous considérons ici la définition suivante des lois LSMG² :

$$p_T(t) = \int_{\mathbb{R}_+} G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw \propto \exp(-\phi_\beta(t)) \quad (5.5)$$

Ainsi, la densité *a priori* de \mathbf{x} (5.4) s'écrit en fonction de p_T comme suit :

$$p(\mathbf{x}) \propto \prod_m^M p_T(t_m) = \prod_m^M \int_{\mathbb{R}_+} G(t_m; \beta w_m^{-1}, w_m^{-1}) p_W(w_m) dw_m.$$

À partir de cette expression, on montre que les lois de probabilité conditionnelles de \mathbf{x} et \mathbf{w} vérifient la Proposition 5.

Proposition 5. *Les lois de probabilité conditionnelles de \mathbf{x} et \mathbf{w} vérifient les propriétés suivantes :*

$$(i) \quad p_W(\mathbf{w}|\mathbf{x}) = \prod_m^M p_W(w_m|t_m),$$

$$(ii) \quad \mathbf{x}|\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\eta}, \mathbf{\Lambda}^{-1}) \text{ avec}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta} &= \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{W}\mathbf{b} + \beta \mathbf{1}), \\ \mathbf{\Lambda} &= \mathbf{A}^T \mathbf{W}\mathbf{A} \end{aligned}$$

où $\mathbf{W} = \text{diag}\{\mathbf{w}\}$,

$$(iii) \quad E[W_m|\mathbf{x}] = E[W_m|t_m] = \frac{\phi'_\beta(t_m^{(t)}) + \beta}{t_m^{(t)}}$$

Démonstration. Voir Annexe C.1.

Algorithme Expectation-Maximisation (EM) L'algorithme EM maximise la loi *a posteriori* (5.3) [DLR77] en alternant les deux étapes *Expectation* et *Maximisation* détaillées dans la Table 5.5, jusqu'à convergence.

²En effet, cette définition est équivalente à celle que nous avons vue au Chapitre 2 en considérant le changement de variable $z = w^{-1}$. Comme la fonction $1/w$ est injective sur \mathbb{R}_+ , $p_Z(z) = z^{-2} p_W(z^{-1})$ définit toujours une densité de probabilité sur \mathbb{R}_+ .

TABLE 5.5 : Algorithme *Expectation-Maximisation* pour la maximisation de la loi *a posteriori* (5.3)

Étape <i>Expectation</i> :	$R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)}) = \int_{\mathbb{R}_+^M} \ln(p(\mathbf{y}, \mathbf{x} \mathbf{w})) p_W(\mathbf{w} \mathbf{y}, \mathbf{x}^{(t)}) d\mathbf{w},$
Étape <i>Maximisation</i> :	$\mathbf{x}^{(t+1)} = \arg \max_{\mathbf{x}} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)}),$

Lien avec le schéma AGR. Comme les variables cachées \mathbf{w} sont indépendantes des données \mathbf{y} et que $p(\mathbf{y}, \mathbf{x}|\mathbf{w}) = p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x}|\mathbf{w})$, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)}) &= \int_{\mathbb{R}_+^M} (\ln p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) + \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{w})) p_W(\mathbf{w}|\mathbf{y}, \mathbf{x}^{(t)}) d\mathbf{w}, \\ &= \ln p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) + \int_{\mathbb{R}_+^M} \ln p(\mathbf{x}|\mathbf{w}) p_W(\mathbf{w}|\mathbf{x}^{(t)}) d\mathbf{w} \end{aligned}$$

D'après l'expression de la vraisemblance et en exploitant la Proposition 5-(ii), $R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)})$ s'écrit :

$$R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)}) = -Q(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}_+^M} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\eta})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\eta}) p_W(\mathbf{w}|\mathbf{x}^{(t)}) d\mathbf{w} + \text{cte.}$$

Il est immédiat de montrer que $(\mathbf{x} - \boldsymbol{\eta})^T \boldsymbol{\Lambda} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\eta}) = (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T \mathbf{W} (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) - 2\beta\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{1} + C$ où C est une constante indépendante de \mathbf{x} . Alors

$$R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)}) = -Q(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T \left(\int_{\mathbb{R}_+^M} \mathbf{W} p_W(\mathbf{w}|\mathbf{x}^{(t)}) d\mathbf{w} \right) (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) - 2\beta\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{1} + \text{cte.}$$

À partir des propriétés (i) et (iii) de la Proposition 5, nous avons donc

$$\begin{aligned} R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)}) &= -Q(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T \mathbf{U} (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}) - 2\beta\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{1}, \\ \text{avec } \mathbf{U} = \text{diag}\{\mathbb{E}[W_m|\mathbf{x}]\} &= \frac{\phi'_\beta(t_m^{(t)}) + \beta}{t_m^{(t)}} \end{aligned}$$

Ceci permet de conclure que $R(\mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t)}) = -K_{\text{GR}}^\beta(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(t)})$, et que l'algorithme EM (Table 5.5) s'identifie avec le schéma semi-quadratique AGR (Table 5.4).

Densités de probabilité LSMG et fonctions semi-quadratiques asymétriques. L'équivalence entre l'algorithme EM et le schéma AGR repose sur le fait que l'opposé du logarithme des densités de probabilité LSMG s'écrit sous la forme de la fonction ϕ_β (5.2). Cette condition est en effet vérifiée quelle que soit la densité LSMG, ce que montre la Proposition 6.

Proposition 6. *Si p est une densité de la classe LSMG alors,*

$$-\ln p(x) = \phi_{\text{GR}}(x) - \beta x + C$$

où ϕ_{GR} vérifie les conditions du schéma GR (voir Table 5.2), $\beta \in \mathbb{R}$ et C une constante.

Démonstration. Voir Annexe C.2

5.4 Bilan et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons introduit une nouvelle famille de fonctions de régularisation semi-quadratiques asymétriques dénommées AGR, formant une généralisation des fonctions GR [GR92]. Ci-dessous, nous présentons le bilan des résultats de ce court chapitre :

- Les fonctions AGR offrent plus de flexibilité de modélisation, en particulier autour de l'origine (*e.g.*, comportement quadratique ou linéaire). Par ailleurs, elles sont potentiellement non-différentiables à l'origine et peuvent donc favoriser la parcimonie, au contraire des fonctions GY.
- Le schéma AGR correspondant peut être vu comme une généralisation du schéma GR. De plus la complexité algorithmique des deux schémas est pratiquement identique.
- Nous avons démontré que le schéma AGR proposé peut s'interpréter, sous certaines conditions, comme un algorithme EM faisant intervenir des lois de mélange de gaussiennes de la classe LSMG. Le schéma AGR étend donc le champ d'application des approximations ELSA aux méthodes d'optimisation déterministe.

Ce chapitre ne fait que poser les bases de l'extension semi-quadratique AGR. Certaines questions mériteraient d'être traitées à l'avenir. À titre d'exemple, une étude de convergence du schéma AGR comparé au schéma AGY serait particulièrement intéressante. En effet, nous avons vu dans le Chapitre 2, Section 2.4.1, que les échantillonneurs utilisant les lois LSMG (approximations ELSA) étaient plus performants que ceux utilisant des lois LMG (approximations AXDA). Par ailleurs, nous savons qu'il existe un lien entre le schéma AGR (respectivement AGY) et les lois LSMG (respectivement LMG). Ce constat soulève naturellement deux questions :

- les fonctions asymétriques (AGR et AGY) peuvent-elles être utilisées pour approcher des fonctions de régularisations non semi-quadratiques (*e.g.*, pour relaxer une contrainte, ou une fonction log-barrière) ?
- Si oui, le schéma AGR est-il plus performant que le schéma AGY ?

Finalement, il serait intéressant de comparer les deux approches en termes d'estimation et de modélisation sur un exemple d'application tel que l'estimation de la ligne de base de spectres de raies [MCB⁺05].

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

6.1 Bilan des contributions

Les travaux de recherche de cette thèse visaient à résoudre des problèmes inverses parcimonieux dans le cadre bayésien exploitant des modèles *a priori* prenant en compte la parcimonie de façon explicite et utilisant des approches d'échantillonnage stochastique. L'objectif principal était de proposer et étudier une nouvelle stratégie ayant pour but la conciliation de l'échantillonneur PCGS avec les *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} . Cependant, les contributions de ces travaux, dont nous faisons le bilan ci-dessous, dépassent largement ce cadre.

Contributions d'ordre théorique.

- Caractérisation des lois LSMG : dans le Chapitre 2 nous avons étudié les lois de type de mélange continu de gaussiennes et avons analysé les caractéristiques et les disparités entre les trois différentes classes de mélanges les plus étudiées dans la littérature (LMG, SMG et LSMG). Nous nous sommes plus particulièrement intéressé à la classe LSMG que nous avons caractérisée en proposant des résultats fondamentaux sur la construction, la décomposition et les conditions de différentiabilité des densités de probabilité LSMG.
- Approximations asymptotiquement exactes ELSA : dans le Chapitre 2 nous avons proposé une nouvelle approche de construction d'approximations asymptotiquement exactes de lois de probabilités basée sur les lois de mélange continu de gaussiennes LSMG. Nous avons démontré certaines propriétés intéressantes de ces approximations en termes de modélisation. En particulier nous avons montré que l'approximation ELSA était plus adaptée que les approches existantes à l'approximation de lois à support semi-fermé grâce au caractère non différentiable de la classe LSMG.
- Schéma semi-quadratique asymétrique AGR : en s'inspirant de nos travaux sur les lois LSMG nous avons proposé dans le Chapitre 5 des résultats théoriques préliminaires d'une nouvelle approche d'optimisation pour des fonctions semi-quadratiques asymétriques. Nous avons démontré le lien entre cette nouvelle approche et les lois de mélange de la classe LSMG, permettant ainsi d'étendre le champ d'application de l'approximation ELSA au cadre de l'optimisation déterministe.
- Modèle *a priori* BMG : nous avons proposé dans le Chapitre 3 un nouveau modèle *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} basé sur les lois de mélange de gaussiennes LSMG pour la résolution des problèmes inverses parcimonieux. La formulation générique du BMG proposée permet de prendre en compte un grand nombre de modèles *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} étudiés dans la

littérature. Aussi, le modèle BMG permet d’approcher des modèles Bernoulli- \mathcal{D} avec des lois à support réduit telles que les lois à support positif grâce aux approximations ELSA.

Contributions d’ordre pratique et algorithmique.

- Échantillonnage stochastique et approximation de lois : grâce aux expériences préliminaires présentées dans le Chapitre 2, nous avons montré empiriquement que les échantillonneurs utilisant l’approximation ELSA étaient plus performants en termes de convergence que les approximations utilisant des lois de la classe LMG comme l’approximation AXDA ainsi que les approches Proximal Monte-Carlo comme l’algorithme MYULA.
- PCGS et implémentation efficace : nous avons proposé dans le Chapitre 3 un échantillonneur PCGS efficace pour le modèle BMG grâce à la marginalisation des amplitudes du modèle. Par ailleurs, nous avons pu adapter et étendre la stratégie d’implémentation proposée par [GIL11] dans le cadre du modèle Bernoulli-Gaussien au cadre du modèle BMG permettant de réduire le coût de calcul de calcul nécessaire par itération et la charge mémoire de l’échantillonneur PCGS.
- Expériences et validations : dans le Chapitre 4 nous avons présenté un certain nombre d’expériences de déconvolution impulsionnelle non supervisée avec,
 1. le modèle *a priori* Bernoulli-Laplace grâce à la représentation en mélange de gaussienne LSMG de la loi de Laplace,
 2. le modèle *a priori* Bernoulli-Gaussien-Tronqué (contrainte de non négativité) grâce à la prise en compte de l’approximation ELSA de la loi gaussienne tronquée.

Les résultats de nos expériences ont montré l’efficacité du modèle BMG ainsi que son échantillonneur PCGS tant en termes de la qualité de restauration des signaux qu’en termes de coût de calcul par rapport à un échantillonneur de Gibbs classique. Par ailleurs, ces résultats ont montré l’efficacité de l’approximation ELSA dans le cadre de la résolution des problèmes inverses parcimonieux non négatifs. Enfin, le caractère non supervisé et/ou semi-aveugle des expériences conduites a permis de montrer que le PCGS permet l’estimation non supervisée des hyper-paramètres du modèle et du dictionnaire.

6.2 Perspectives

Les contributions et résultats obtenus dans le cadre de cette thèse permettent d’envisager plusieurs perspectives.

Implémentation du PCGS sur un environnement multi-cœur. Les résultats des expériences du Chapitre 4 ont montré l’efficacité de l’échantillonneur PCGS proposé en termes de nombre d’itérations et en temps calcul. Toutefois, le facteur d’accélération en termes de coût de calcul est modéré par rapport au gain en nombre d’itérations, à cause du coût par itération élevé du PCGS. Une perspective intéressante serait donc d’implémenter l’échantillonneur PCGS sur un processeur multi-cœur afin de bénéficier d’une mise en œuvre parallélisable des mises à jour de Cholesky permettant de réduire le temps de calcul par itération du PCGS.

Adaptation de l’échantillonneur PCGS au cas des dictionnaires continus. L’algorithme PCGS que nous avons proposé pour le modèle BMG permet uniquement de considérer des problèmes avec dictionnaires discrets. Pour étendre le champ d’application du modèle BMG,

l'échantillonneur PCGS pourrait être étendu au cas des dictionnaires continus en s'inspirant du modèle Bernoulli-Gaussien-Étendu (BGE) [BC06] et de son implémentation PCGS [Bou19].

L'approximation ELSA pour des problèmes en grandes dimensions. Dans ce manuscrit, nous nous sommes intéressé à la résolution problèmes inverses parcimonieux de dimensions modérés par des modèles *a priori* de type Bernoulli- \mathcal{D} . Toutefois, il serait intéressant d'étudier les approximations ELSA en dehors du cadre des *a priori* Bernoulli- \mathcal{D} pour des problèmes en grandes dimensions, par exemple le dé-bruitage et la restauration d'images. Certes, dans ce cadre, la stratégie PCGS est contre productive et il faudra l'abandonner au profit des échantillonneurs de Gibbs classiques. Par ailleurs, les résultats de l'expérience préliminaire que nous avons étudiée dans la section 2.4.1 du Chapitre 2, montre l'efficacité de l'échantillonneur de Gibbs faisant intervenir l'approximation ELSA par rapport à ceux utilisant l'approximation AXDA et l'algorithme MYULA en particulier quand l'approximation est proche de la loi cible. Il serait donc intéressant d'étudier les approximations ELSA dans un contexte d'application concret afin de valider nos résultats.

Étude du schéma semi-quadratique AGR. Les travaux de ce manuscrit s'inscrivent dans le cadre des méthodes d'échantillonnage stochastique. Toutefois, les liens entre les lois de mélange de gaussiennes et les approches semi-quadratiques en optimisation nous ont amenés à proposer une nouvelle approche semi-quadratique asymétrique, dit AGR, en s'inspirant de nos travaux sur la classe LSMG. Toutefois, une étude détaillée du schéma et des fonctions semi-quadratiques asymétriques AGR est nécessaire. Par exemple, une étude théorique et empirique des propriétés de convergence de ce schéma en comparaison au schéma AGY classique.

Caractérisation des lois LSMG multidimensionnelles. Dans ce manuscrit, nous nous sommes particulièrement intéressé à l'étude et la caractérisation des lois LSMG monodimensionnelles. Une perspective intéressante serait d'étudier la possibilité de généralisation des résultats théoriques apportés dans le chapitre 2 au cas multidimensionnel.

6.3 Pistes de travail

Nous présentons dans cette section deux pistes de travail, directement inspirés de nos contributions, qui mériteraient d'après nous une étude plus approfondie.

6.3.1 Approximations ELSA avec paramètre de décalage

Nous avons vu dans la section 4.3.3, dans le cadre de la déconvolution impulsionnelle non négative par le modèle BMG, que le paramètre β de l'approximation ELSA permettait de régler le compromis entre la proportion d'échantillons négatifs et l'efficacité de l'échantillonnage. Nous proposons ici de réduire la proportion d'échantillons négatifs tout en conservant les performances le l'échantillonneur PCGS grâce à l'introduction d'un paramètre de décalage μ .

Rappelons que l'approximation ELSA (voir Définition 2 p. 44) vise à approcher une loi de probabilité définie sur le support $\mathbb{E} = [\mu, \infty[$, où μ est un paramètre de loi cible. Ainsi, dans le cas d'une loi à support positif, comme la loi exponentielle, $\mu = 0$. Nous proposons ici de jouer sur ce paramètre μ dans l'approximation ELSA, comme degré de liberté supplémentaire pour le réglage de l'approximation. En effet, si l'on reste dans le cadre des lois à support positif, faire varier le paramètre μ permet de régler la probabilité sur \mathbb{R}_- de l'approximation.

A titre d'exemple, nous avons représenté Figure 6.1 la densité de l'approximation ELSA de la loi exponentielle standardisée pour $\mu = 0$ et $\mu = 0.1$, avec $\beta = 3$. Il est évident que

l'introduction du paramètre de décalage $\mu = 0.1$ permet de réduire la probabilité d'avoir $X < 0$, au prix d'une potentielle dégradation de la qualité de l'approximation (étonnamment, pour l'exemple Figure 6.1, la variation totale entre l'approximation et la densité cible a diminué). Cependant, le mode de l'approximation n'est plus positionné à l'origine mais en μ .

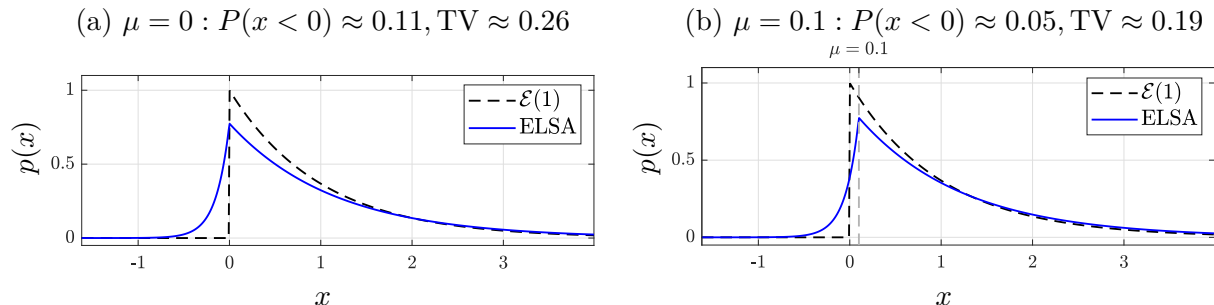


FIGURE 6.1 : Introduction du paramètre de décalage pour l'approximation ELSA (avec $\beta = 3$) de la loi exponentielle standardisée : (a) sans paramètre de décalage $\mu = 0$, (b) avec paramètre de décalage $\mu = 0.1$.

Remarque. Les propriétés de l'approximation ELSA (Proposition 3) ont été démontrées pour toute valeur de μ , donc celles-ci restent valides ici.

Le paramètre μ représente un intérêt particulier car, contrairement au paramètre β , il n'a aucune influence sur la corrélation entre la variable de mélange W et la variable X de l'approximation ELSA (voir Proposition 3-(ii)). Ceci implique que μ ne devrait pas avoir d'influence sur l'efficacité de l'échantillonnage. Ainsi, le paramètre μ permet de réduire (relaxer) la valeur de β , et donc d'améliorer l'efficacité de l'échantillonnage, tout en ayant la même probabilité du côté négatif que dans le cas $\mu = 0$.

Cette stratégie soulève tout de même une question importante à laquelle nous apportons quelques éléments de réponse : le fait que le mode de l'approximation ELSA se situe en μ plutôt qu'à l'origine est-il contraignant d'un point de vue modélisation et estimation ? La réponse est probablement négative. En effet, il est habituel, dans le cadre des modèles Bernoulli- \mathcal{D} , de prendre des lois \mathcal{D} maximales autour et en zéro, ce qui favorise des amplitudes faibles, voire nulles. Toutefois, les modèles Bernoulli- \mathcal{D} , dont le modèle BMG, prennent en compte la parcimonie de façon explicite grâce aux variables de Bernoulli. Il paraît donc redondant de prendre une loi \mathcal{D} favorisant la parcimonie. Par ailleurs, nous avons constaté, dans les diverses expériences illustrées dans ce manuscrit, que les amplitudes de faibles valeurs étaient rarement détectées, car noyées dans le bruit. On peut donc présager que ce décalage ne changera pas fondamentalement les résultats de ce point de vue.

Enfin, insistons sur le fait que le modèle BMG du Chapitre 3 prend déjà en compte le paramètre de décalage μ . Donc l'échantillonneur PCGS proposé au Chapitre 3 est directement exploitable dans ce cadre.

Modèle BMG et approximation ELSA avec paramètre de décalage pour le modèle Bernoulli-Exponentiel. Prenons l'exemple d'un modèle BMG visant à approcher le modèle Bernoulli-Exponentiel [DHT09]. Celui-ci est donné par $\forall k, q_k \sim \mathcal{B}(\lambda)$ avec

$$\begin{aligned} \text{quand } q_k = 1, & \begin{cases} w_k \sim \mathcal{E}(\frac{\beta}{\sigma_x}) \\ x_k | w_k \sim \mathcal{N}(\sigma_x \mu + \beta / \sigma_x w_k, w_k), \end{cases} \\ \text{quand } q_k = 0, & x_k = 0 \end{aligned} \quad (6.1)$$

où $\beta, \mu > 0$ sont les paramètres qui permettent de régler l'approximation ELSA. Notons que dans ce cas $x_k|q_k = 1$ est distribué suivant la loi Laplace asymétrique $AL(\sqrt{\beta^2 + 2\beta/s}, \beta/s, s\mu)$, et que quand $\beta \rightarrow \infty$ et $\mu \rightarrow 0$ ce modèle est équivalent au modèle Bernoulli-Exponentiel (voir Section 2.3.3). L'approche classique, telle que nous avons utilisée dans la section 4.3.3, consiste à prendre $\mu = 0$.

Remarque. Dans la définition du BMG (6.1), proposée Chapitre 3, le paramètre μ est couplé au paramètre d'échelle σ_x . Cela semble contre intuitif, car cela implique que la moyenne et le mode de l'approximation sont fonction de σ_x . Un tel couplage est nécessaire afin que la qualité de notre approximation ELSA, en termes de variation totale et de $P(X < \mu)$, soit invariante par changement d'échelle σ_x tel que démontré Proposition 3 p. 44, plus particulièrement Proposition 3-(iv) et Proposition 3-(v).

Expérience préliminaire : Nous avons effectué une expérience de déconvolution impulsionnelle non supervisée et semi-aveugle pour comparer le cas $\mu = 0$ (BMG) au cas d'un paramètre de décalage $\mu > 0$ (ici $\mu = 0.1$, dénommé BMG- μ par la suite), le paramètre β étant fixé à $\beta = 30$ dans les deux cas. Nous avons généré un train d'impulsions à partir du modèle Bernoulli-Exponentiel avec un paramètre de la séquence de Bernoulli $\lambda^* = 0.06$ et une échelle des amplitudes fixée à $\sigma_x^* = 0.01$. Le train d'impulsion est ensuite convolué par la réponse impulsionnelle de paramètre f_h utilisée dans les expériences du Chapitre 4 (voir (4.3) p. 85) et perturbé par un bruit additif gaussien i.i.d tel que le RSB = 9 dB. Le train d'impulsion et les données bruitées correspondantes sont représentés Figure 6.2.

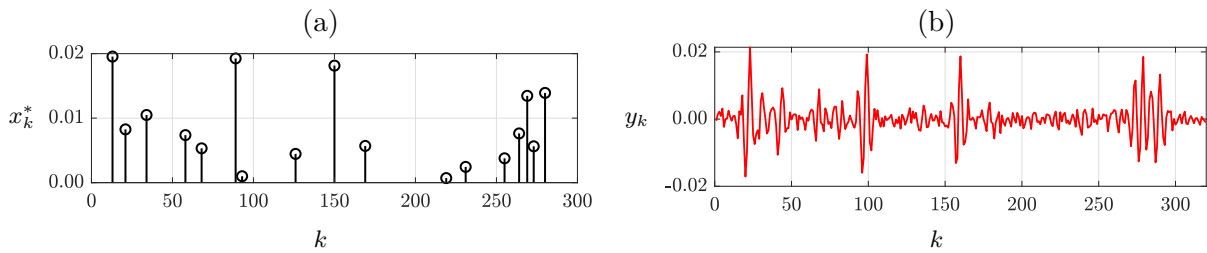


FIGURE 6.2 : Données simulées : (a) train d'impulsions (amplitudes) non négatives \mathbf{x} , (b) données bruitées \mathbf{y} correspondantes.

Dans la Figure 6.3 sont donnés les résultats de déconvolution estimés après convergence des échantillonneurs où le modèle BMG- μ permet de restituer un train d'impulsions non négatives contrairement au modèle BMG qui présente un atome négatif à l'indice $k = 71$. Par ailleurs, on constate que l'estimation des autres atomes n'a pas été affectée par l'introduction du paramètre de décalage.

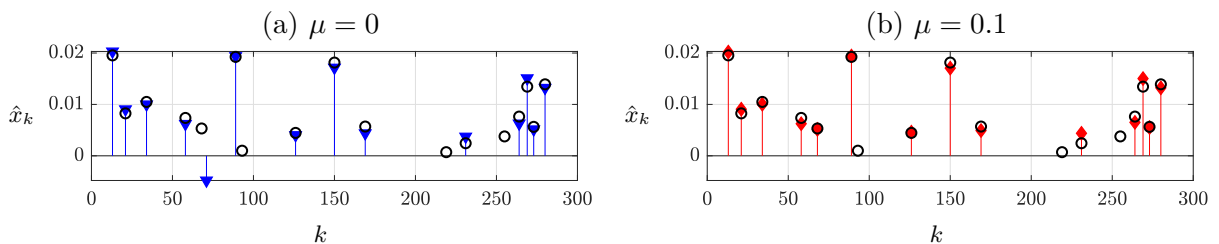


FIGURE 6.3 : Résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par : (a) modèle BMG sans décalage (b) modèle BMG avec décalage, après convergence.

En termes de convergence, la Figure 6.4 représentant les MPSRF des échantillonneurs PCGS des deux modèles, montre que l'introduction du paramètre de décalage μ ne dégrade pas l'efficacité du PCGS. En effet, les deux échantillonneurs nécessitent le même nombre d'itérations ($T_c = 2000$) pour atteindre le seuil de convergence avec un temps de calcul de 37 secondes pour le BMG et de 38 seconde pour le BMG- μ .

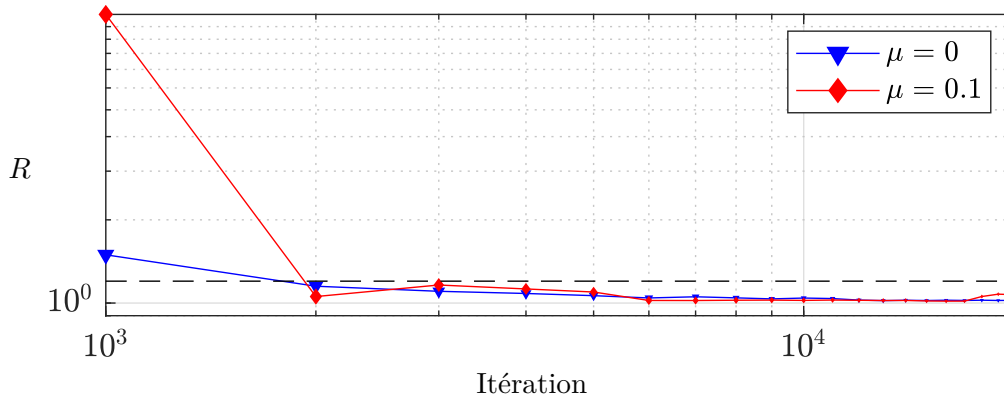


FIGURE 6.4 : Évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations des échantillonneurs PCGS démodèle BMG et BMG- μ . La ligne pointillée horizontale représente le seuil de convergence à 1.2.

Bilan de l'expérience. Les résultats de cette expérience préliminaire encouragent à étudier plus en détail cette piste. Dans un premier temps, une analyse statistique du modèle BMG- μ similaire aux expériences du Chapitre 4 permettrait de valider l'efficacité de cette approche tant en termes de restauration des signaux non négatifs qu'en termes de coût de calcul. Une telle analyse doit être effectuée pour différentes valeurs de μ et de β afin d'essayer de déterminer l'existence d'un couple $(\beta, \mu) \in \mathbb{R}_+^2$ qui permet de régler le compromis entre restauration des signaux non négatifs et coût de calcul.

Vers une approximation ELSA non supervisée Dans la section 4.3.3, du Chapitre 4 qui traitait des problèmes de déconvolution impulsionnelle non-négative avec le modèle BMG, nous avons vu que le réglage automatique du paramètre β dans un cadre bayésien n'est pas une tâche évidente. En particulier, nous avons vu que le choix de la loi *a priori* du paramètre β et une question tout aussi difficile que le choix du paramètre β lui-même.

Concernant μ , un réglage automatique dans le cadre bayésien doit être étudié (pour β fixé empiriquement). En effet, d'après les résultats de l'expérience que nous venons de voir, le paramètre μ , contrairement au paramètre β , n'a aucune influence sur l'efficacité de l'échantillonneur. Évidemment, la question du choix de l'*a priori* du paramètre μ reste ouverte. Toutefois, le rôle de l'*a priori* de μ est uniquement d'assurer la non-négativité de la solution, contrairement à l'*a priori* du paramètre β qui risque également de compromettre l'efficacité de l'échantillonnage.

Concernant le réglage de β , une approche classique de type *L-curve* peut être exploitée. En effet, le paramètre β optimal est celui qui donne le meilleur compromis entre faible proportion d'échantillons négatifs générés et faible corrélation entre variables de mélange et amplitudes (cette corrélation pouvant être calculée analytiquement grâce à la Proposition 3-(ii)). La recherche d'un β optimal peut donc se faire au coude de la *L-curve* entre ces deux quantités. Il est envisageable d'exploiter une telle approche dans le PCGS en laissant varier β lors de l'échantillonnage. En effet, on pourrait alors estimer la proportion d'échantillons négatifs générés et faire varier β au cours des itérations pour atteindre le coude souhaité. Bien sûr, pour conserver

les propriétés de convergence du PCGS, cela ne peut être fait que durant une période de chauffe, le paramètre β étant ensuite fixé pour atteindre la convergence. Un heuristique consistant à laisser varier β en dehors de la période de chauffe pourrait cependant être testée...

La même stratégie pourrait finalement également être envisagée pour le paramètre μ . Ainsi, μ pourrait être estimé en cours d'échantillonnage à partir de statistiques estimées sur les échantillons générés (*e.g.*, moyenne, valeur minimale ou proportion d'échantillons négatifs générés...).

6.3.2 Approximations de lois supportées sur un intervalle

Nous avons développé et étudié les approximations ELSA principalement pour approcher des lois à support semi-fermé telles que les lois à support positif. Nous avons souligné dans le Chapitre 2 (Remarque 3 p. 46) que de telles approximations pouvaient être utilisées pour approcher des lois supportées sur un intervalle fermé. Par exemple la densité de l'approximation ELSA de la loi uniforme sur $[0, 1]$ est donnée par

$$p_{\text{LS}}(x) = \int_0^{1/\beta} G(x; \beta w, w) \beta dw. \quad (6.2)$$

Cependant, dans ce type de situation, ELSA présente un défaut de symétrie au niveau de l'approximation (voir Figure 6.5-(a)) qui est dû à la définition même des densités LSMG comme mélange continu de gaussiennes $\mathcal{N}(\beta w, w)$. Comme il y a une relation linéaire entre la moyenne et la variance, il est clair que les gaussiennes de moyenne proche de l'origine ont une variance faible contrairement aux gaussiennes de moyenne éloignée de l'origine. Un tel phénomène est illustré Figure 6.5-(b) où sont représentées trois densités¹ gaussiennes de moyennes 0.02, 0.51 et 1 impliquées dans l'approximation ELSA de la loi uniforme.

En d'autres termes, les non-différentiabilités de la densité ELSA sont engendrées par des gaussiennes dégénérées (de variance nulle). En effet, il est clair, à partir de la densité (6.2), que la borne inférieure de l'intégrale est un point de « *singularité* » qui engendre une gaussienne dégénérée. Ceci résulte donc en une bonne approximation de la discontinuité à l'origine, mais pas de celle en 1.

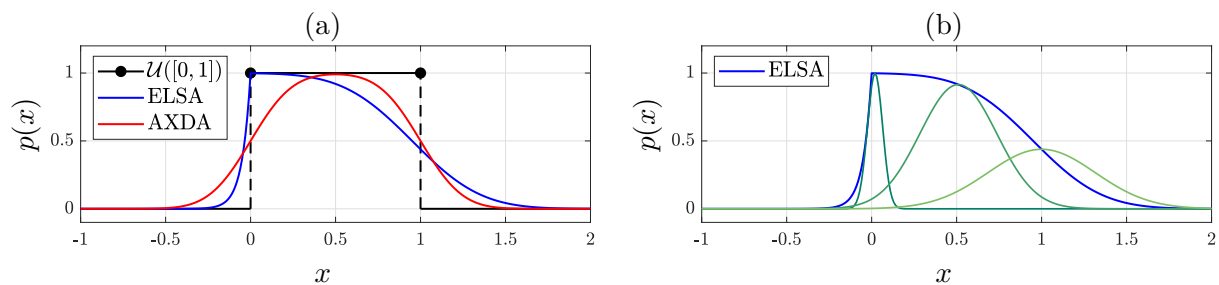


FIGURE 6.5 : Approximation en mélange de gaussiennes d'une loi uniforme sur $[0, 1]$: (a) Comparaison de la densité de probabilité de l'approximation ELSA (en bleu) à une approximation AXDA (en rouge). (b) Schéma illustrant trois densités gaussiennes impliquées dans l'approximation ELSA. Les paramètres des approximations ELSA et AXDA ont été fixés de sorte que les variations totales soient identiques.

Ce constat motive la question suivante : est-il possible de généraliser l'approximation ELSA afin de l'adapter à l'approximation des densités supportées sur un intervalle ? La réponse est négative, si l'on reste dans le cadre de l'approximation par des lois de mélange de gaussiennes

¹Les « densités » de ces gaussiennes sont données sous une forme non normalisée à titre illustratif.

LSMG étudiées et caractérisées au Chapitre 2, puisqu'on ne peut pas avoir plus d'un point de non-différentiabilité du fait de la relation linéaire entre la moyenne et la variance des gaussiennes. On peut cependant introduire une classe d'approximation plus générale basée sur une nouvelle classe de mélange de gaussiennes que l'on dénommera LSMG généralisée (*Generalised Location and Scale Mixture of Gaussians* G-LSMG) :

Définition 3. Une variable aléatoire X est dite G-LSMG si sa densité de probabilité p_X s'écrit :

$$p_X(x) = \int_{\mathbb{E}} G(x; \beta w, g(w)) p_W(w) dw$$

où $\beta \in \mathbb{R}$, p_W et la densité de la variable de mélange $W \in \mathbb{E} \subseteq \mathbb{R}$ et $g : \mathbb{E} \rightarrow \mathbb{R}_+$ une fonction quelconque.

Grâce à l'introduction de la fonction g la classe G-LSMG permet d'avoir plus de flexibilité en termes de modélisation, la relation entre la moyenne et la variance des gaussiennes pouvant être quelconque. De plus, la classe G-LSMG est une famille de lois de probabilité unificatrice puisque les classe LSMG, SMG et LMG sont des cas particuliers de cette famille. En effet :

- si $g(w) = w$ et $\mathbb{E} \subseteq \mathbb{R}_+$ alors p_X est une LSMG,
- si $\beta = 0$ et $\mathbb{E} \subseteq \mathbb{R}_+$ alors p_X est une SMG quelle que soit g ,
- si g est une fonction constante (*i.e.*, $g(w) = \rho$) et $\beta \neq 0$ alors p_X est une LMG².

Par ailleurs, cette classe G-LSMG permet d'avoir plusieurs points de non-différentiabilité en modulant la variance des gaussiennes à travers la fonction positive g . En effet, comme les non-différentiabilités sont engendrées par les gaussiennes dont la variance tend vers zéro, il suffit de moduler la variance telle que celle-ci tende vers zéro là où l'on souhaite avoir des non-différentiabilités. Ceci peut être fait en introduisant des points de singularité grâce à une fonction g dont les points d'annulation coïncident avec les points de singularité.

On peut alors construire une approximation asymptotiquement exacte de lois supportées sur un intervalle à partir de la classe G-LSMG. Cette nouvelle classe d'approximation sera dénommée EGLSA pour *asymptotically Exact Generalized-Location-Scale Approximations*.

Par exemple, dans le cas de la loi uniforme sur $[0, 1]$, on souhaite avoir une non-différentiabilité (en plus de celle à l'origine) en $x = 1$, *i.e.*, la gaussienne de moyenne $\beta w = 1$, qui correspond à un point de singularité en $w = 1/\beta$. On peut alors construire une approximation EGLSA de la loi uniforme sur $[0, 1]$ en prenant en compte la fonction $g(w) = w(1/\beta - w)$ qui est strictement positive sur $]0, 1/\beta[$ et nulle en 0 et $1/\beta$. Soit l'approximation donnée par :

$$p_{\text{GLS}}(x) = \int_0^{1/\beta} G(x; \beta w, g(w)) \beta dw, \text{ avec } g(w) = w(1/\beta - w). \quad (6.3)$$

Remarque. Le choix de la fonction g est arbitraire. En effet, il existe une infinité de fonctions positives dont les points d'annulation sont 0 et $1/\beta$. Toutefois, le choix de la fonction $g(w) = w(1/\beta - w)$, fournit une densité d'approximation p_{GLS} remarquablement uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$. Cette observation empirique reste à justifier mathématiquement.

Dans la Figure 6.6-(a) est représentée la densité de cette approximation EGLSA pour $\beta = 3$. La Figure 6.6-(b) illustre trois densités gaussiennes de moyenne 0.02, 0.5 et 0.99 impliquées dans l'approximation EGLSA qui montre clairement que les gaussiennes proches de l'origine et de 1 ont une variance plus faible que celles au centre de l'intervalle $[0, 1]$.

²Dans ce cas, la valeur du paramètre β n'a pas d'importance et peut être mis à $\beta = 1$ par défaut. Notons tout de même que dans la Définition 3 le paramètre β est nécessaire car il permet d'avoir des densités symétriques en le mettant à zéro.

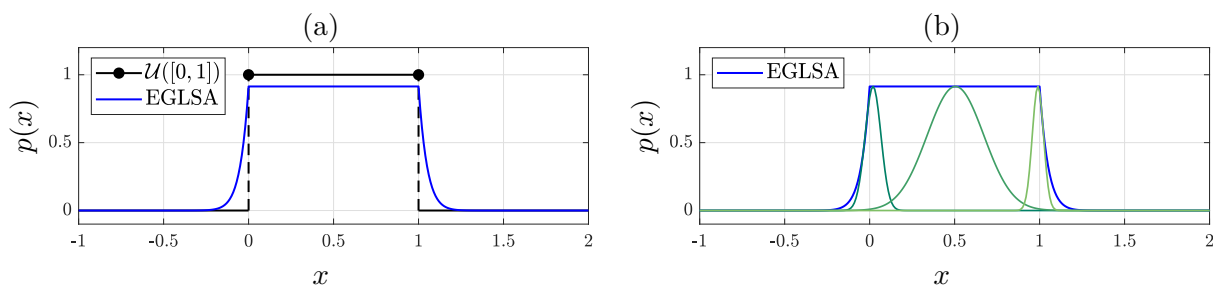


FIGURE 6.6 : Approximation en mélange de gaussiennes d'une loi uniforme sur $[0, 1]$: (a) comparaisons de la densité de probabilité de l'approximation EGLSA à celle de la loi uniforme sur $[0, 1]$. (b) Schéma illustrant trois densités gaussiennes impliquées dans l'approximation EGLSA.

L'approximation EGLSA (6.3) est une approximation asymptotiquement exacte de la loi uniforme. Les éléments de démonstration de cette proposition sont similaires à ceux de la démonstration du Théorème 5 sur la convergence en probabilité de l'approximation ELSA.

Une étude approfondie de cette nouvelle classe de lois G-LSMG ainsi que de l'approximation EGLSA serait intéressante, tant sur le plan théorique que pratique. Plusieurs questions mathématiques sur la caractérisation des lois G-LSMG se posent :

- Existe-t-il des lois de probabilités usuelles qui appartiennent à la classe G-LSMG ?
- Les propriétés caractérisant la classe LSMG proposées au Chapitre 2 se généralisent-elles à la classe G-LSMG ?

Sur le plan pratique, les algorithmes Gibbs et PCGS proposés Chapitres 2 et 3 dans le cadre des lois LSMG s'étendent sans difficulté aux lois G-LSMG. Il serait donc intéressant de comparer les approximations EGLSA et AXDA tant en termes de modélisation et de résultats d'estimation qu'en termes de convergence dans le cadre des méthodes d'échantillonnage stochastique. Enfin, l'extension au cas multivarié de ces approximations de lois supportées sur un intervalle mériterait d'être étudiée, en commençant par exemple par le cas du simplexe à K dimensions.

Annexes

Annexe A

Annexe du chapitre 2

Dans cette annexe, nous donnons les démonstrations de résultats du Chapitre 2.

A.1 Démonstration du Théorème 3 (p. 36) sur la différentiabilité des densités SMG

Démonstration. Rappelons qu'une densité SMG p admet la forme suivante :

$$p(x) = \int_{\mathbb{R}_+} G(x; 0, w) p_W(w) dw \quad (\text{A.1})$$

où p_W est une densité de probabilité continue sur \mathbb{R}_+ . À partir de cette expression et en utilisant la règle de Leibnitz nous calculons la dérivée de $p(x)$ en un point $x \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} D(x) &= \frac{d}{dx} p(x) = \frac{d}{dx} \int_{\mathbb{R}_+} G(x; 0, w) p_W(w) dw \\ &= \int_{\mathbb{R}_+} \frac{d}{dx} G(x; 0, w) p_W(w) dw \\ &= -x \int_{\mathbb{R}_+} w^{-1} G(x; 0, w) p_W(w) dw = -x I(x) \end{aligned}$$

avec $I(x) = \int_{\mathbb{R}_+} f_x(w) p_W(w) dw$, où $f_x(w) = w^{-1} G(x; 0, w)$.

Premièrement, remarquons que $f_x(w)$ est proportionnelle à une densité Inverse Gamma de paramètre d'échelle $x^2 > 0$, *i.e.*, $f_x(w)$ est intégrable sur \mathbb{R}_+ pour tout $x \neq 0$ donc

$$I(x) = \int_{\mathbb{R}_+} f_x(w) p_W(w) dw < \infty, \forall x \neq 0.$$

On en conclut que p est différentiable partout dans \mathbb{R}^* .

Deuxièmement, soit la fonction $g_x(w) = w^{-1} G(x; 0, w) p_W(w)$ telle que

$$I(x) = \int_{\mathbb{R}_+} g_x(w) dw$$

et

$$\lim_{x \rightarrow 0} g_x(w) = g_0(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} w^{-3/2} p_W(w)$$

L'hypothèse $\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} p_W(w) dw < \infty$ signifie que $\int_{\mathbb{R}_+} g_0(w) dw < \infty$. Sachant que $\forall w \geq 0$ et $\forall x \in \mathbb{R}$, $\exp\left(-\frac{x^2}{2w}\right)$ est une fonction de w à valeur dans $[0, 1]$, donc

$$|g_x(w)| = \left| \frac{1}{2\pi} w^{-3/2} p_W(w) \exp\left(-\frac{x^2}{2w}\right) \right| < g_0(w), \forall w \in \mathbb{R}_+.$$

Ainsi, par le théorème de convergence dominée nous avons que

$$L = \lim_{x \rightarrow 0} \int_{\mathbb{R}_+} g_x(w) dw = \int_{\mathbb{R}_+} \lim_{x \rightarrow 0} g_x(w) dw = \int_{\mathbb{R}_+} g_0(w) dw < \infty$$

et donc que $\lim_{x \rightarrow \infty} I(x) < \infty$. Finalement, $D(x)$ est le produit de deux fonctions (x et $I(x)$) dont la limite est convergente quand $x \rightarrow 0$, donc

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} D(x) = \lim_{x \rightarrow 0^-} D(x) = \left(\lim_{x \rightarrow 0} x \right) \left(\lim_{x \rightarrow 0} I(x) \right) = 0 \quad (\text{A.2})$$

qui permet de conclure que p est différentiable à l'origine.

Réciproquement, supposons que p est différentiable à l'origine, alors

$$p'(x) = \frac{d}{dx} p(x) = -x \int_{\mathbb{R}_+} w^{-1} G(x; 0, w) p_W(w) dw.$$

Comme p est paire (p est une densité SMG symétrique autour de l'origine), p' est une fonction impaire avec $p'(0) = 0$. Cela implique que la dérivée seconde p'' est paire avec $p''(0) < \infty$, avec

$$\begin{aligned} p''(x) &= \frac{d^2}{dx^2} p(x) \\ &= - \int_{\mathbb{R}_+} \left(1 - \frac{x^2}{w} \right) w^{-1} G(x; 0, w) p_W(w) dw \end{aligned}$$

Calculons maintenant la limite de $p''(x)$ quand $x \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} p''(0) &= \lim_{x \rightarrow \infty} - \int_{\mathbb{R}_+} \left(1 - \frac{x^2}{w} \right) G(x; 0, w) w^{-1} p_W(w) dw \\ &= - \lim_{x \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}_+} h_x(w) dw \end{aligned}$$

où $h_x(w) = \left(1 - \frac{x^2}{w} \right) G(x; 0, w) w^{-1} p_W(w)$ avec

$$\lim_{x \rightarrow \infty} h_x(w) = h_0(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} w^{-3/2} p_W(w)$$

Sachant que $\forall w \geq 0$ et $\forall x \in \mathbb{R}$, $\sqrt{2\pi w} \left(1 - \frac{x^2}{w} \right) G(x; 0, w)$ est une fonction de w à valeur dans $[0, 1]$, on en déduit

$$|h_x(w)| = \left| \left(1 - \frac{x^2}{w} \right) G(x; 0, w) w^{-1} p_W(w) \right| < h_0(w), \forall w \in \mathbb{R}_+$$

et d'après le théorème de convergence dominée,

$$\begin{aligned} p''(0) &= - \lim_{x \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}_+} h_x(w) dw = - \int_{\mathbb{R}_+} \lim_{x \rightarrow \infty} h_x(w) dw = \int_{\mathbb{R}_+} h_0(w) dw \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} p_W(w) dw. \end{aligned}$$

Comme $p''(0) < \infty$, nous concluons que $\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} p_W(w) dw < \infty$. ■

A.2 Démonstration du Corollaire 1 (p. 36) sur la non différentiabilité des densités SMG

Démonstration. D'après le Théorème 3 nous savons qu'une densité SMG p est différentiable à l'origine *si et seulement si* sa densité de mélange satisfait

$$\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} p_W(w) dw < \infty. \quad (\text{A.3})$$

Ceci implique que la fonction $w^{-3/2} p_W(w)$ est dominée par w^{-1} quand $w \rightarrow 0^+$. En d'autres termes nous avons

$$\lim_{w \rightarrow 0^+} \frac{w^{-3/2} p_W(w)}{w^{-1}} = \lim_{w \rightarrow 0^+} \frac{p_W(w)}{\sqrt{w}} = 0.$$

Par conséquent si p est différentiable, alors p_W doit tendre vers zéro moins rapidement que \sqrt{w} quand $w \rightarrow 0^+$.

Donc, si $\lim_{w \rightarrow 0^+} p_W(w) > 0$, la conditions donnée dans (A.7) n'est pas vérifiée et donc la densité SMG p n'est pas différentiable à l'origine. ■

A.3 Lemmes auxiliaires

Dans le but de démontrer les Propositions 1 et 2 et le Théorème 4, nous commençons ici par démontrer quelques résultats intermédiaires donnés sous forme de lemmes ci-dessous.

A.3.1 Lemme de symétrisation des densités de probabilité

Lemme 1. *Pour toute densité de probabilité p définie sur un intervalle \mathbb{E} symétrique par rapport à l'origine (possiblement \mathbb{R}), nous avons :*

$$K = \int_{\mathbb{E}} \sqrt{p(x)p(-x)} dx < \infty$$

et $p_S(x) = K^{-1} \sqrt{p(x)p(-x)}$ est une densité de probabilité symétrique

Démonstration. Comme $\sqrt{p(x)p(-x)}$ est la moyenne géométrique de $p(x)$ et $p(-x)$, alors

$$\sqrt{p(x)p(-x)} \leq \max(p(x), p(-x)), \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

Il s'ensuit donc que

$$\begin{aligned} K &= \int_{\mathbb{E}} \sqrt{p(x)p(-x)} dx \\ &\leq \int_{\mathbb{E}_+} p(x) dx + \int_{\mathbb{E}_-} p(-x) dx \\ &< \int_{\mathbb{E}} p(x) dx + \int_{\mathbb{E}} p(-x) dx = 2 \end{aligned}$$

où $\mathbb{E}_+ = \{x, p(x) \geq p(-x)\}$ et $\mathbb{E}_- = \{x, p(x) < p(-x)\}$. La symétrie de $\sqrt{p(x)p(-x)}$ est évidente. ■

A.3.2 Lemme de décomposition des densités de probabilité

Lemme 2. *Toute densité de probabilité p définie sur \mathbb{R} telle que $p(x) > 0 \forall x \in \mathbb{R}$ admet une représentation unique de la forme :*

$$p(x) = K p_S(x) \exp(\phi(x))$$

où $p_S(x) = K^{-1} \sqrt{p(x)p(-x)}$ est une densité de probabilité symétrique, $\phi(x) = \ln \sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}}$ est une fonction impaire et K une constante de normalisation.

Démonstration. Sachant que p prend des valeurs dans $]0, \infty[$ pour tout $x \in \mathbb{R}$, il est possible de réécrire p comme suit :

$$p(x) = \sqrt{p(x)p(-x)} \sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}}$$

En utilisant le résultat du Lemme 1 nous avons que

$$p(x) = K p_S(x) \sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}}$$

où p_S est une densité de probabilité symétrique donnée par :

$$p_S(x) = \frac{1}{K} \sqrt{p(x)p(-x)}, \quad \text{et} \quad K = \int_{\mathbb{R}} \sqrt{p(x)p(-x)} dx$$

Soit la fonction ϕ définie par :

$$\phi(x) = \ln \left(\sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}} \right) = \frac{1}{2} (\ln(p(x)) - \ln(p(-x)))$$

alors

$$p(x) = K p_S(x) \exp(\phi(x)) \tag{A.4}$$

et ϕ est une fonction impaire.

Il nous reste à montrer que cette représentation est unique. Supposons que p admet deux représentations de la forme (A.4) :

$$p(x) = K p_S(x) \exp(\phi(x)) = \bar{K} p_{\bar{S}}(x) \exp(\bar{\phi}(x)) \tag{A.5}$$

et soient les fonctions $S(x)$ et $\bar{S}(x)$ données par :

$$S(x) = \ln(K p_S(x)), \quad \text{et} \quad \bar{S}(x) = \ln(\bar{K} p_{\bar{S}}(x)).$$

Remarquons que ces deux fonctions sont paires car p_S et $p_{\bar{S}}$ sont symétriques autour de l'origine. En réarrangeant (A.5) nous obtenons :

$$\frac{K p_S(x)}{\bar{K} p_{\bar{S}}(x)} = \frac{\exp(\bar{\phi}(x))}{\exp(\phi(x))}$$

en prenant le logarithme à droite et à gauche cela donne

$$S(x) - \bar{S}(x) = \bar{\phi}(x) - \phi(x).$$

Sachant que la différence de deux fonctions paires (respectivement impaires) est une fonction paire (respectivement impaire) et que $f = 0$ est la seule fonction qui est simultanément paire et impaire nous déduisons que :

$$\begin{aligned}\bar{\phi}(x) &= \phi(x) \\ \bar{S}(x) &= S(x), \implies Kp_S(x) = \bar{K}p_{\bar{S}}(x)\end{aligned}$$

en intégrant $Kp_S(x) = \bar{K}p_{\bar{S}}(x)$ par rapport à x nous avons que $K = \bar{K}$ donc $p_S(x) = p_{\bar{S}}(x)$, ce qui permet de conclure que (A.4) est unique. ■

A.4 Démonstration de la Proposition 1 (p. 41) sur la construction des lois LSMG

Rappelons d'abord qu'une densité de probabilité LSMG est définie par :

$$p(x) = \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \beta w)^2}{w}\right) p_W(w) dw, \quad (\text{A.6})$$

où p_W est une densité de probabilité telle que $\forall t < 0, p_W(t) = 0$, et $\beta \in \mathbb{R}$.

Démonstration. Soit p_S une densité de probabilité symétrique telle que $p_S(\sqrt{x})$ est complètement monotone (i.e., $p_S(x)$ est une densité SMG) et $\forall \beta \in \mathbb{R}, K = \int_{\mathbb{R}} p_S(x) \exp(\beta x) dx < \infty$. Alors,

$$p(x) = \frac{1}{K} p_S(x) \exp(\beta x)$$

est une densité de probabilité. Par ailleurs, d'après [AM74, Section 3] nous savons que p_S est une SMG, donc admet la représentation suivante :

$$p_S(x) = \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{w}\right) p_W(w) dw,$$

et donc,

$$p(x) = \frac{1}{K} \exp(\beta x) \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{w}\right) p_W(w) dw$$

En introduisant le terme $\exp(\beta x)$ sous le signe d'intégration et après quelques réarrangements nous avons :

$$p(x) = \frac{1}{K} \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \beta w)^2}{w}\right) \exp\left(\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w) dw$$

Sachant que p est une densité de probabilité, alors par le théorème de Fubini nous savons que

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} p(x) dx &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{K} \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \beta w)^2}{w}\right) \exp\left(\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w) dw dx \\ 1 &= \frac{1}{K} \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \beta w)^2}{w}\right) dx \exp\left(\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w) dw \\ 1 &= \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{K} \exp\left(\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w) dw\end{aligned}$$

ce qui implique que $\bar{p}_W(w) = \frac{1}{K} \exp\left(\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w)$ est une densité de probabilité et donc

$$p(x) = \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \beta w)^2}{w}\right) \bar{p}_W(w) dw.$$

Par identification avec (A.6) nous concluons que $p(x)$ est une densité LSMG. ■

A.5 Démonstration de la Proposition 2 (p. 41) sur la décomposition des lois LSMG

Démonstration. soit p une densité de probabilité LSMG, alors

$$\begin{aligned} p(x) &= \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - \beta w)^2}{w}\right) p_W(w) dw \\ &= \exp(\beta x) \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{x^2}{w}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w) dw \end{aligned}$$

Sachant que $\forall w \geq 0$ et $\beta \in \mathbb{R}$, $\exp\left(-\frac{1}{2} \beta^2 w\right)$ est une fonction décroissante de w à valeur dans $[0, 1]$, donc

$$0 \leq \exp\left(-\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w) \leq p_W(w)$$

d'où

$$K = \int_{\mathbb{R}_+} \exp\left(-\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w) dw \leq 1 < \infty$$

et donc

$$\bar{p}_W(w) = \frac{1}{K} \exp\left(-\frac{1}{2} \beta^2 w\right) p_W(w)$$

définit une densité de probabilité. Donc, nous pouvons réécrire $p(x)$ comme suit :

$$\begin{aligned} p(x) &= K \exp(\beta x) \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{x^2}{2w}\right) \bar{p}_W(w) dw \\ p(x) &= K \exp(\beta x) p_S(x) \end{aligned}$$

où $p_S(x)$ est une densité de probabilité SMG (symétrique). D'après le Lemme 2 p. 126 cette représentation est unique car $\phi(x) = \beta x$ est impaire, et

$$\begin{aligned} p_S(x) &= K^{-1} \sqrt{p(x)p(-x)} \\ \phi(x) &= \beta x = \ln\left(\sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}}\right) \end{aligned}$$

d'où

$$\beta = \frac{1}{x} \ln\left(\sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}}\right), \forall x \neq 0$$

■

A.6 Démonstration du Corollaire 3 (p. 42)

Démonstration. À partir de la Proposition 2 et de sa démonstration nous savons que chaque densité LSMG p peut s'écrire comme suit :

$$p(x) = K \exp(\beta x) p_S(x)$$

où p_S est une densité SMG de densité de mélange donnée par :

$$\bar{p}_W(w) = \frac{1}{K} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w)$$

Clairement, p est différentiable à l'origine *si et seulement si* p_S l'est également. À partir du Théorème 3, nous savons que p_S est différentiable à l'origine *si et seulement si*

$$\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} \bar{p}_W(w) dw < \infty$$

ce qui permet de conclure que p est différentiable à l'origine *si et seulement si*

$$\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w) dw < \infty$$

■

A.7 Démonstration du Corollaire 4 (p. 42)

Démonstration. À partir du Corollaire 3 nous savons qu'une densité LSMG p est différentiable à l'origine *si et seulement si* sa densité de mélange satisfait

$$\int_{\mathbb{R}_+} w^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w) dw < \infty, \quad (\text{A.7})$$

ceci implique que la fonction $w^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w)$ est dominée par w^{-1} quand $w \rightarrow 0^+$. En d'autres termes nous avons

$$\lim_{w \rightarrow 0^+} \frac{w^{-3/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w)}{w^{-1}} = \lim_{w \rightarrow 0^+} \frac{\exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w)}{\sqrt{w}} = 0.$$

Ainsi, nous savons que si p est différentiable alors $\exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) p_W(w)$ doit tendre vers zéro moins rapidement que \sqrt{w} quand $w \rightarrow 0^+$.

Sachant que $\lim_{w \rightarrow 0^+} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta^2 w\right) = 1$, on peut conclure que si $\lim_{w \rightarrow 0^+} p_W(w) > 0$, la conditions donnée dans (A.7) n'est pas vérifiée et donc la densité LSMG $p(x)$ n'est pas différentiable à l'origine. ■

A.8 Démonstration du Corollaire 5 (p. 42)

Démonstration. À partir de la Proposition 2 nous savons que chaque densité LSMG p peut s'écrire sous la forme :

$$p(x) = \frac{1}{K} \exp(\beta x) p_S(x) \quad (\text{A.8})$$

où $p_S(x) = K^{-1}\sqrt{p(x)p(-x)}$ est une densité SMG avec $K = \int_{\mathbb{R}} \sqrt{p(x)p(-x)} dx$. Nous avons vu également que toute densité SMG admet un représentation variationnelle (voir section 2.1.1 p. 35) :

$$p_S(x) = \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} G(x; 0, \xi^{-1})\psi_S(\xi) \quad (\text{A.9})$$

avec

$$\psi_S(\xi) = \sqrt{2\pi\xi^{-1}} \exp(\phi_S^*(\xi/2)),$$

où ϕ_S^* est la conjuguée concave de ϕ_S

En remplaçant (A.9) dans (A.8) nous obtenons :

$$p(x) = \frac{1}{K} \exp(\beta x) \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} G(x; 0, \xi^{-1})\psi_S(\xi)$$

et sachant que β et x sont indépendants de ξ alors :

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{1}{K} \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} \exp(\beta x) G(x; 0, \xi^{-1})\psi_S(\xi) \\ &= \frac{1}{K} \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi\xi^{-1}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{\xi^{-1}} - 2\beta x\right)\right) \psi_S(\xi) \end{aligned}$$

en utilisant la méthode de complétion du carré sur $\frac{x^2}{\xi^{-1}} - 2\beta x$ nous obtenons :

$$\begin{aligned} p(x) &= \frac{1}{K} \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi\xi^{-1}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(x - \beta\xi^{-1})^2}{\xi^{-1}} + \frac{1}{2}\beta^2\xi^{-1}\right) \psi_S(\xi) \\ &= \frac{1}{K} \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi\xi^{-1}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(x - \beta\xi^{-1})^2}{\xi^{-1}}\right) \psi_S(\xi) \exp\left(\frac{1}{2}\beta^2\xi^{-1}\right) \end{aligned}$$

Par conséquent,

$$p(x) = \frac{1}{K} \sup_{\xi \in \mathbb{R}_+} G(x; \beta\xi^{-1}, \xi^{-1})\psi(\xi)$$

■

où $\psi(\xi) = \psi_S(\xi) \exp\left(\frac{1}{2}\beta^2\xi^{-1}\right) = \sqrt{2\pi\xi^{-1}} \exp(\phi^*(\xi/2) + \beta^2\xi^{-1})$.

A.9 Démonstration du Théorème 4 (p. 43) sur la caractérisation des lois LSMG

Démonstration. Remarquons d'abord que pour toute densité de probabilité p à valeurs dans \mathbb{R}_+^* , $\sqrt{p(x)p(-x)}$ est une fonction paire de x alors que $\phi(x) = \ln\left(\sqrt{\frac{p(x)}{p(-x)}}\right)$ est impaire, et que

$$p(x) = \sqrt{p(x)p(-x)} \exp(\phi(x)).$$

Par le résultat du Lemme 2 nous savons que cette représentation est unique *i.e.*,

$$p(x) = \sqrt{p(x)p(-x)} \exp(\phi(x)) = K p_S(x) \exp(\phi(x))$$

avec $p_S(x) = K^{-1}\sqrt{p(x)p(-x)}$. Donc, si $p_S(\sqrt{x})$ est complètement monotone et ϕ est linéaire (donc $\exists\beta \in \mathbb{R}$ tel que $\phi(x) = \beta x$), alors par la Proposition 1 nous pouvons conclure que p une densité LSMG.

Réciproquement, soit p une densité de probabilité LSMG, alors par la Proposition 2 nous avons :

$$p(x) = \frac{1}{K} \exp(\beta x) p_S(x)$$

où p_S est une densité de probabilité symétrique SMG. D'après le Théorème 2 p. 35 [AM74] $p_S(\sqrt{x})$ est complètement monotone. Par ailleurs, βx est une fonction linéaire. Par le résultat du Lemme 2 et par identification nous avons que

$$\begin{aligned} \sqrt{p(x)p(-x)} &= K p_S(x), \text{ et donc } \sqrt{p(\sqrt{x})p(-\sqrt{x})} \text{ est complètement monotone,} \\ \phi(x) &= \beta x \text{ est linéaire,} \end{aligned}$$

ce qui permet de conclure la démonstration. ■

A.10 Démonstration du Théorème 5 (p. 44) sur la convergence en probabilité de ELSA

Démonstration. À partir de la Définition 2 p. 44 de l'approximation ELSA et par identification avec la définition des LSMG donnée dans la Table 2.1 p. 33 il est facile de déduire que la représentation stochastique de $X \sim \mathcal{D}_{LS}(\nu)$ s'écrit :

$$X = \mu + \beta W + \sqrt{W} Z \tag{A.10}$$

avec W indépendant de $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$, et $W - \mu \sim \mathcal{D}(T_{\frac{1}{\beta}}(\theta))$. Soit $X^* \sim \mathcal{D}(\theta)$ tel que $W = \frac{X^* - \mu}{\beta}$ alors,

$$X = X^* + \sqrt{\frac{X^* - \mu}{\beta}} Z$$

et

$$X - X^* = \sqrt{\frac{X^* - \mu}{\beta}} Z = \frac{V}{\sqrt{\beta}} \tag{A.11}$$

où $V = Z\sqrt{X^* - \mu}$ est une variable aléatoire SMG¹, de densité p_V symétrique par rapport à l'origine et $\forall \epsilon > 0$

$$P\left(\frac{|V|}{\sqrt{\beta}} \geq \epsilon\right) = P(|V| \geq \epsilon\sqrt{\beta}) = 1 - \int_{-\epsilon\sqrt{\beta}}^{\epsilon\sqrt{\beta}} p_V(v) dv \tag{A.12}$$

Finalement, à partir de (A.11) et (A.12) nous concluons que

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} P(|X - X^*|) = 1 - \lim_{\beta \rightarrow \infty} \int_{-\epsilon\sqrt{\beta}}^{\epsilon\sqrt{\beta}} p_V(v) dv = 0.$$

■

¹Rappelons que $X^* \sim \mathcal{D}(\theta)$ donc $X^* \in [\mu, \infty[$ et donc $X^* - \mu \geq 0$.

A.11 Démonstration de la Proposition 3 (p. 44) sur les propriétés de ELSA

Démonstration.

(i) Voir Annexe A.10 (A.10).

(ii) Espérance et variance : à partir de (A.10) il est facile de déduire que

$$X = X^* + \sqrt{\frac{X^* - \mu}{\beta}} Z$$

où $X^* \sim \mathcal{D}(\theta)$ est indépendante de Z . Alors,

$$\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}\left[X^* + \sqrt{\frac{X^* - \mu}{\beta}} Z\right] = \mathbb{E}[X^*],$$

et

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X^2] &= \mathbb{E}\left[(X^*)^2 + \frac{X^* - \mu}{\beta} Z^2 + 2\sqrt{\frac{X^* - \mu}{\beta}} Z\right] \\ &= \mathbb{E}[(X^*)^2] + \frac{\mathbb{E}[X^*] - \mu}{\beta} \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} \text{var}(X) &= \mathbb{E}[X^2] - (\mathbb{E}[X])^2 = \mathbb{E}[(X^*)^2] + \frac{\mathbb{E}[X^*] - \mu}{\beta} - (\mathbb{E}[X^*])^2 \\ &= \text{var}(X^*) + \frac{\mathbb{E}[X^*] - \mu}{\beta} \end{aligned}$$

Par ailleurs sachant qu'il y a une relation affine entre W et X^* alors

$$\begin{aligned} \text{Corr}(X, W) &= \text{Corr}(X, X^*) = \frac{\mathbb{E}[X X^*] - \mathbb{E}[X] \mathbb{E}[X^*]}{\sqrt{\text{var}(X) \text{var}(X^*)}} \\ &= \frac{\mathbb{E}[(X^*)^2 + X^* \sqrt{\frac{X^* - \mu}{\beta}} Z] - (\mathbb{E}[X^*])^2}{\sqrt{\text{var}(X) \text{var}(X^*)}} \\ &= \frac{\text{var}(X^*)}{\sqrt{\text{var}(X) \text{var}(X^*)}} = \left(\frac{\text{var}(X^*)}{\text{var}(X)}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

(iii) Stabilité par transformation linéaire : soit $X \sim \mathcal{D}_{\text{LS}}(\nu)$ et $Y = sX$ avec $s > 0$, par changement de variable, la densité de Y s'écrit

$$\begin{aligned} p_Y(y) &= \frac{1}{s} p_X(y/s) \\ &= \frac{1}{s} \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y/s - \beta w - \mu)^2}{w}\right) \beta p_{\mathcal{D}}(\beta w + \mu) dw \\ &= \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2 w}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y - s\beta w - s\mu)^2}{s^2 w}\right) \beta p_{\mathcal{D}}(\beta w + \mu) dw \end{aligned}$$

En posant $u = s^2 w$, on obtient

$$\begin{aligned} p_Y(y) &= \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi u}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y - \frac{\beta}{s}u - s\mu)^2}{u}\right) \beta p_{\mathcal{D}}(\beta u/s^2 + \mu) \frac{1}{s^2} du \\ &= \int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{\sqrt{2\pi u}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(y - \frac{\beta}{s}u - s\mu)^2}{u}\right) \beta p_{\mathcal{D}}(\beta u/s^2 + \mu) \frac{1}{s^2} du \\ &= \int_{\mathbb{R}_+} \mathbf{G}(x; \beta u/s + a\mu, u) \beta p_{\mathcal{D}}(\beta u/s^2 + \mu) \frac{1}{s^2} du \end{aligned}$$

Remarquons que $\beta p_{\mathcal{D}}(\beta u/s^2 + \mu) \frac{1}{s^2}$ correspond à la densité d'une variable aléatoire $W_{s^2} = s^2 W$, donc par identification avec (2.12) nous concluons que $Y \sim \mathcal{D}_{\text{LS}}(H_s(\boldsymbol{\nu}))$ où

$$H_s(\boldsymbol{\nu}) = H_s\left(\begin{bmatrix} \mu \\ \beta \\ \boldsymbol{\theta} \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} s\mu \\ s^{-1}\beta \\ T_{s^2}(\boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix}$$

- (iv) Invariance de la variation totale par transformation linéaire : soit $X \sim \mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$ une approximation ELSA de $X^* \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$, $X_s = sX$ et $X_s^* = sX^*$, tel que $X_s \sim \mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}_s)$ et $X_s^* \sim \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_s)$, où $\boldsymbol{\nu}_s = H_s(\boldsymbol{\nu})$ et $\boldsymbol{\theta}_s = T_s(\boldsymbol{\theta})$. La variation totale entre les distributions $\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}_s)$ et $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_s)$ s'écrit :

$$\text{TV}[\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}_s), \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_s)] = \int_{\mathbb{R}} |p_{\text{LS}}(t) - p_{\mathcal{D}}(t)| dt$$

En posant $u = t/s$, on obtient

$$\begin{aligned} \text{TV}[\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}_s), \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_s)] &= \int_{\mathbb{R}} |p_{\text{LS}}(su) - p_{\mathcal{D}}(su)| s du \\ &= \int_{\mathbb{R}} |sp_{\text{LS}}(su) - sp_{\mathcal{D}}(su)| du \end{aligned}$$

où $sp_{\text{LS}}(su)$ et $sp_{\mathcal{D}}(su)$ correspondent aux densités de probabilité des distributions $\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$ et $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})$ respectivement, ce qui permet de conclure que

$$\text{TV}[\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}_s), \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}_s)] = \text{TV}[\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu}), \mathcal{D}(\boldsymbol{\theta})]$$

- (v) La probabilité $P(X_s \leq s\mu)$ est donnée par :

$$P(X_s \leq s\mu) = \int_{-\infty}^{s\mu} p_{\text{LS}}(t) dt$$

En posant $u = t/s$, on obtient

$$P(X_s \leq s\mu) = \int_{-\infty}^{\mu} p_{\text{LS}}(su) s du$$

où $sp_{\text{LS}}(su)$ correspond à densité de probabilité de la distribution $\mathcal{D}_{\text{LS}}(\boldsymbol{\nu})$, ce qui permet de conclure que

$$P(X_s \leq s\mu) = P(X \leq \mu)$$

■

A.12 Démonstration de la Proposition 4 (p. 49)

Démonstration. Rappelons l'expression de la densité de probabilité de la loi Laplace asymétrique $\text{AL}(\alpha, \beta, \mu)$:

$$d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha} \exp(-\alpha|t - \mu| + \beta(t - \mu)),$$

avec $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$, $|\beta| < \alpha$ et $\mu \in \mathbb{R}$, et de la loi exponentielle $\mathcal{E}(s^{-1})$:

$$d_{\mathcal{E}(s^{-1})}(t) = \begin{cases} \frac{1}{s} \exp(-\frac{t}{s}), & t \geq 0 \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

avec $s \in \mathbb{R}_+^*$. Nous avons donc

$$d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) = \frac{2\beta + 1}{2(\beta + 1)s} \exp\left(-\frac{\beta + 1}{s}|t| + \frac{\beta}{s}t\right),$$

Et pour $t < 0$:

$$d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) = \frac{2\beta + 1}{2(\beta + 1)s} \exp\left(-\frac{2\beta + 1}{s}t\right),$$

donc

$$\begin{aligned} P(X \leq 0) &= \int_{\mathbb{R}_-} d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) dt = \frac{2\beta + 1}{2(\beta + 1)s} \int_{\mathbb{R}_-} \exp\left(-\frac{2\beta + 1}{s}t\right) dt \\ &= \frac{1}{2(\beta + 1)} \end{aligned}$$

D'autre part, pour $t \geq 0$

$$d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) = \frac{2\beta + 1}{2(\beta + 1)s} d_{\mathcal{E}(s^{-1})}(t) \leq d_{\mathcal{E}(s^{-1})}(t) \quad (\text{A.13})$$

et donc

$$\text{TV}_\beta = \text{TV} \left[\text{AL}((\beta + 1)/s, \beta/s, 0), \mathcal{E}(s^{-1}) \right] = \int_{\mathbb{R}} |d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) - d_{\mathcal{E}(s^{-1})}(t)| dt$$

Sachant que la densité de la distribution exponentielle est nulle pour toute valeur négative, TV_β peut être décomposée comme suit :

$$\begin{aligned} \text{TV}_\beta &= \int_{\mathbb{R}_-} d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) dt + \int_{\mathbb{R}_+} |d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) - d_{\mathcal{E}(s^{-1})}(t)| dt \\ &= P(X \leq 0) + \int_{\mathbb{R}_+} |d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) - d_{\mathcal{E}(s^{-1})}(t)| dt \end{aligned}$$

À partir de (A.13) nous avons

$$\begin{aligned} \text{TV}_\beta &= P(X \leq 0) + \int_{\mathbb{R}_+} d_{\mathcal{E}(s^{-1})}(t) dt - \int_{\mathbb{R}_+} d_{\text{AL}((\beta+1)/s, \beta/s, 0)}(t) dt \\ &= P(X \leq 0) + 1 - (1 - P(X \leq 0)) \\ &= 2P(X \leq 0) \\ &= \frac{1}{\beta + 1}, \end{aligned}$$

ce qui permet de conclure que $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \text{TV}_\beta = 0$ ■

Annexe B

Annexe du chapitre 3

Dans cette annexe, nous donnons les démonstrations de résultats du Chapitre 3 sur le modèle BMG.

B.1 Rappel de quelques théorèmes sur les matrices

B.1.1 Lemme d'inversion matricielle.

Soient \mathbf{P} , \mathbf{Q} , \mathbf{U} et \mathbf{V} des matrices de dimensions telles que les multiplications matricielles considérées sont possibles.

$$\begin{aligned} \text{Si } \mathbf{P} \text{ et } \mathbf{Q} \text{ sont inversibles, alors :} \\ (\mathbf{P} - \mathbf{U}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{V}) \text{ inversible} &\Leftrightarrow (\mathbf{Q} - \mathbf{V}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{U}) \text{ inversible} \\ (\mathbf{P} - \mathbf{U}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{V})^{-1} &= \mathbf{P}^{-1} + \mathbf{P}^{-1}\mathbf{U}(\mathbf{Q} - \mathbf{V}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{U})^{-1}\mathbf{V}\mathbf{P}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

B.1.2 Lemme d'inversion matricielle par blocs.

Soient \mathbf{P} , \mathbf{Q} , \mathbf{U} et \mathbf{V} des matrices de dimensions telles que les multiplications matricielles considérées sont possibles.

$$\begin{aligned} \text{Si } \mathbf{A} \text{ et } \mathbf{C} \text{ sont inversibles, alors :} \\ \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{D} & \mathbf{C} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B} \\ \mathbf{I} \end{pmatrix} (\mathbf{C} - \mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})^{-1} \begin{pmatrix} -\mathbf{D}\mathbf{A}^{-1} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

B.1.3 Généralisation du lemme du déterminant matriciel.

Soit \mathbf{P} une matrice carrée inversible, et \mathbf{U} , \mathbf{V} des matrices possiblement rectangulaires, de dimensions telles que les opérations considérées sont possibles. Alors :

$$|\mathbf{P} + \mathbf{U}\mathbf{V}^T| = |\mathbf{P}| \cdot |\mathbf{I} + \mathbf{V}^T\mathbf{P}^{-1}\mathbf{U}| \quad (\text{B.3})$$

où $|\cdot|$ représente ici le déterminant de la matrice considérée.

B.1.4 Identité pour la mise à jour de Cholesky de rang 1

Soit \mathbf{A} une matrice de dimension $N \times N$ et \mathbf{b} un vecteur de dimension $N \times 1$ avec

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & 0 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

où \mathbf{A}_{11} est une matrice de dimension $(N-1) \times (N-1)$ et v_2 est un scalaire. Alors

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \mathbf{b}\mathbf{b}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} + \mathbf{b}_1 \mathbf{b}_1^T & \mathbf{b}_1 \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_1^T \mathbf{b}_2 & \mathbf{b}_2^2 \end{bmatrix} \quad (\text{B.4})$$

B.2 Calcul de la loi *a posteriori* conditionnelle des amplitudes (Section 3.2.1 p. 67)

D'après (3.5) et (3.8) la loi *a posteriori* s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) &= (2\pi)^{-N/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) p(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mathbf{q} | \boldsymbol{\theta}) p(\boldsymbol{\theta}) \\ &= (2\pi)^{-N/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \\ &\quad \times \underbrace{\mathbf{G}(\bar{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\mu}_x, \mathbf{W})}_{p(\bar{\mathbf{x}} | \mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta})} \underbrace{\delta_0(\bar{\mathbf{x}}^C)}_{p(\bar{\mathbf{x}}^C | \mathbf{q})} \underbrace{p_W(\mathbf{w})}_{p(\mathbf{w} | \mathbf{q})} \underbrace{\lambda^L (1-\lambda)^{K-L}}_{P(\mathbf{q} | \lambda)} p(\boldsymbol{\theta}) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Premièrement, il est immédiat de constater que

$$p(\bar{\mathbf{x}}^C | \mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) \propto p(\bar{\mathbf{x}}^C | \mathbf{q}, \mathbf{y}) \propto \delta_0(\bar{\mathbf{x}}^C)$$

ce qui implique que $\bar{\mathbf{x}}^C = \mathbf{0}$.

Par ailleurs, la loi *a posteriori* conditionnelles des amplitudes réduites est obtenue en gardant que les quantités qui dépendent des amplitudes réduites $\bar{\mathbf{x}}$,

$$\begin{aligned} p(\bar{\mathbf{x}} | \mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) &\propto \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \mathbf{G}(\bar{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\mu}_x, \mathbf{W}) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \mathbf{y} - \bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \left\| \bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_x \right\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{1}{2} \underbrace{\left(\left\| \mathbf{y} - \bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \left\| \bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_x \right\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2 \right)}_{f(\bar{\mathbf{x}})}\right) \end{aligned}$$

On cherche maintenant à simplifier l'expression de $A(\bar{\mathbf{x}})$:

$$\begin{aligned} f(\bar{\mathbf{x}}) &= \left\| \mathbf{y} - \bar{\mathbf{H}}\bar{\mathbf{x}} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \left\| \bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_x \right\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2 \\ &= \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} - 2\bar{\mathbf{x}}^T \bar{\mathbf{H}}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \bar{\mathbf{x}}^T \bar{\mathbf{H}}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}} \bar{\mathbf{x}} + \bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{W}^{-1} \bar{\mathbf{x}} - 2\bar{\mathbf{x}}^T \mathbf{W}^{-1} \boldsymbol{\mu}_x + \boldsymbol{\mu}_x^T \mathbf{W}^{-1} \boldsymbol{\mu}_x \\ &= \bar{\mathbf{x}}^T \left(\bar{\mathbf{H}}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}} + \mathbf{W}^{-1} \right) \bar{\mathbf{x}} - 2\bar{\mathbf{x}}^T \left(\bar{\mathbf{H}}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{W}^{-1} \boldsymbol{\mu}_x \right) + \left\| \mathbf{y} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \left\| \boldsymbol{\mu}_x \right\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2 \end{aligned}$$

Soient le vecteur $\boldsymbol{\eta}$ et la matrice $\boldsymbol{\Gamma}$ tel que :

$$\boxed{\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{\Gamma} \bar{\mathbf{H}}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} + \boldsymbol{\Gamma} \mathbf{W}^{-1} \boldsymbol{\mu}_x,} \quad (\text{B.6})$$

$$\boxed{\boldsymbol{\Gamma} = \left(\bar{\mathbf{H}}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}} + \mathbf{W}^{-1} \right)^{-1},} \quad (\text{B.7})$$

alors

$$\begin{aligned} f(\bar{\mathbf{x}}) &= \bar{\mathbf{x}}^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \bar{\mathbf{x}} - 2\bar{\mathbf{x}}^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \boldsymbol{\eta} + \left\| \mathbf{y} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \left\| \boldsymbol{\mu}_x \right\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2 \\ &= \left\| \bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\eta} \right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 - \underbrace{\left(\left\| \boldsymbol{\eta} \right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 + \left\| \mathbf{y} \right\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \left\| \boldsymbol{\mu}_x \right\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2 \right)}_{\text{indépendant de } \bar{\mathbf{x}}} \end{aligned}$$

Ainsi l'expression de la loi *a posteriori* conditionnelle des amplitudes réduites devient simplement :

$$p(\bar{\mathbf{x}}|\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\|\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2\right),$$

qui permet de conclure que la loi conditionnelle des amplitudes réduites $\bar{\mathbf{x}}$ et une loi gaussienne de moyenne $\boldsymbol{\eta}$ et de matrice de covariance $\boldsymbol{\Gamma}$:

$$\boxed{\bar{\mathbf{x}}|\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Gamma})} \quad (\text{B.8})$$

B.3 Calcul de la loi *a posteriori* marginalisée par rapport aux amplitudes (Section 3.2.2 p. 67)

On peut écrire la loi *a posteriori* (B.5) sous la forme :

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = \underbrace{\exp\left(-\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\bar{\mathbf{x}}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \text{G}(\bar{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\mu}_x, \mathbf{W}) \delta_0(\bar{\mathbf{x}}^C)}_{=g(\mathbf{x})} \underbrace{\frac{|\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{N/2}} p(\mathbf{w}|\mathbf{q}) P(\mathbf{q}|\lambda) p(\boldsymbol{\theta})}_{=C_1 \text{ indépendant de } \bar{\mathbf{x}}}$$

On cherche à intégrer cette loi par rapport à \mathbf{x} , soit :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) &= \int p(\mathbf{q}, \mathbf{x}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) d\mathbf{x} = C_1 \int g(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &= C_1 \int \exp\left(-\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\bar{\mathbf{x}}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \text{G}(\bar{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\mu}_x, \mathbf{W}) d\bar{\mathbf{x}} \int \delta_0(\bar{\mathbf{x}}^C) d\bar{\mathbf{x}}^C \\ p(\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) &= C_1 \int \exp\left(-\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{H}\bar{\mathbf{x}}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2\right) \text{G}(\bar{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\mu}_x, \mathbf{W}) d\bar{\mathbf{x}} \\ &= C_1 \frac{|\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{L/2}} \int \exp\left(-\frac{1}{2}f(\bar{\mathbf{x}})\right) d\bar{\mathbf{x}} \end{aligned}$$

où (voir Annexe B.2)

$$\begin{aligned} f(\bar{\mathbf{x}}) &= \|\mathbf{y} - \mathbf{H}\bar{\mathbf{x}}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \|\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\mu}_x\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2 \\ &= \|\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 + \underbrace{-\|\boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 + \|\mathbf{y}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \|\boldsymbol{\mu}_x\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2}_{=C_2 \text{ indépendant de } \bar{\mathbf{x}}} \end{aligned}$$

Alors,

$$\begin{aligned} p(\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) &= C_1 \frac{|\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{L/2}} \int \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\|\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 - \|\boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 + \|\mathbf{y}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \|\boldsymbol{\mu}_x\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2\right)\right) d\bar{\mathbf{x}} \\ &= C_1 \exp\left(\frac{1}{2}\left(\|\boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 - \|\mathbf{y}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 - \|\boldsymbol{\mu}_x\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2\right)\right) \frac{|\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{L/2}} \int \exp\left(-\frac{1}{2}\|\bar{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2\right) d\bar{\mathbf{x}} \\ &= C_1 \exp\left(-\frac{1}{2}C_2\right) \frac{|\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{L/2}} \times (2\pi)^{L/2} |\boldsymbol{\Gamma}|^{\frac{1}{2}} = C_3 \exp\left(-\frac{1}{2}C_2\right) \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

avec

$$\boxed{\begin{aligned} C_1 &= \frac{|\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{N/2}} p(\mathbf{w}|\mathbf{q}) P(\mathbf{q}|\lambda) p(\boldsymbol{\theta}) \\ C_2 &= -\|\boldsymbol{\eta}\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2 + \|\mathbf{y}\|_{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}^2 + \|\boldsymbol{\mu}_x\|_{\mathbf{W}^{-1}}^2 \\ C_3 &= C_1 |\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}} |\boldsymbol{\Gamma}|^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}} \quad (\text{B.10})$$

Simplification de C_2 . En introduisant l'expression de ν (B.6) dans l'expression de C_2 (B.10), on obtient :

$$\begin{aligned}
 C_2 &= \mathbf{y}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{y} - \boldsymbol{\eta}^T\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\mu}_x^T\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x \\
 &= \mathbf{y}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{y} - (\boldsymbol{\Gamma}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{y} + \boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x)^T\boldsymbol{\Gamma}^{-1}(\boldsymbol{\Gamma}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{y} + \boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x) + \boldsymbol{\mu}_x^T\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x \\
 &= \mathbf{y}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{y} - \left(\mathbf{y}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{y} + 2\mathbf{y}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x + \boldsymbol{\mu}_x^T\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x \right) \\
 &\quad + \boldsymbol{\mu}_x^T\mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x \\
 &= \mathbf{y}^T \underbrace{\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right)}_{=\mathbf{B}^{-1}} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}_x^T \underbrace{\left(\mathbf{W}^{-1} - \mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1} \right)}_{=\mathbf{C}^{-1}} \boldsymbol{\mu}_x - 2\mathbf{y}^T \underbrace{\left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1} \right)}_{\mathbf{D}} \boldsymbol{\mu}_x
 \end{aligned}$$

Donc

$$\boxed{C_2 = \mathbf{y}^T\mathbf{B}^{-1}\mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}_x^T\mathbf{C}^{-1}\boldsymbol{\mu}_x - 2\mathbf{y}^T\mathbf{D}\boldsymbol{\mu}_x} \quad (\text{B.11})$$

avec

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 \mathbf{B}^{-1} &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}, & (N \times N) \\
 \mathbf{C}^{-1} &= \mathbf{W}^{-1} - \mathbf{W}^{-1}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1}, & (L \times L) \\
 \mathbf{D} &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\boldsymbol{\Gamma}\mathbf{W}^{-1} & (N \times L)
 \end{aligned}
 } \quad (\text{B.12})$$

Déterminant de la matrice \mathbf{B} . Afin de simplifier d'avantage l'expression de la loi *a posteriori* marginalisée $p(\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$, et en particulier l'expression de C_3 donnée dans (B.10), nous commençons par calculer la matrice inverse \mathbf{B} et son déterminant. La matrice \mathbf{B} s'écrit :

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}^{-1} = \left(\underbrace{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}_{\mathbf{P}} - \underbrace{\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}}_{\mathbf{U}} \underbrace{\boldsymbol{\Gamma}}_{\mathbf{Q}^{-1}} \underbrace{\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}_{\mathbf{V}} \right)^{-1}$$

où $\mathbf{P} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ et $\mathbf{Q}^{-1} = \boldsymbol{\Gamma}$ sont des matrices définies positives donc inversibles. En utilisant le lemme d'inversion matricielle (B.1) nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B} &= \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}} \left(\boldsymbol{\Gamma}^{-1} - \bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}} \right)^{-1} \bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\Sigma} \\
 &= \boldsymbol{\Sigma} + \bar{\mathbf{H}} \left(\boldsymbol{\Gamma}^{-1} - \bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}} \right)^{-1} \bar{\mathbf{H}}^T
 \end{aligned}$$

En remplaçant l'expression de $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ (B.7) nous obtenons :

$$\boxed{\mathbf{B} = \boldsymbol{\Sigma} + \bar{\mathbf{H}}\mathbf{W}\bar{\mathbf{H}}^T, \quad (N \times N)} \quad (\text{B.13})$$

En utilisant la généralisation du déterminant matriciel (B.3) nous obtenons le déterminant de la matrice \mathbf{B} comme suit :

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{B}| &= \left| \boldsymbol{\Sigma} + \bar{\mathbf{H}}\mathbf{W}\bar{\mathbf{H}}^T \right| = \left| \underbrace{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{P}} + \underbrace{\left(\bar{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \right)}_{\mathbf{U}} \underbrace{\left(\bar{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \right)^T}_{\mathbf{V}^T} \right| \\
 &= |\boldsymbol{\Sigma}| \left| \mathbf{I} + \left(\bar{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \right)^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \right| \\
 &= |\boldsymbol{\Sigma}| \left| \mathbf{I} + \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \right| \\
 &= |\boldsymbol{\Sigma}| \left| \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \underbrace{\left(\mathbf{W}^{-1} + \bar{\mathbf{H}}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\bar{\mathbf{H}} \right)}_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \right| \\
 &= |\boldsymbol{\Sigma}| \left| \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \right|
 \end{aligned}$$

en utilisant les propriétés du déterminant matriciel et quelques réarrangement nous avons :

$$\boxed{|\mathbf{B}| = |\boldsymbol{\Sigma}| |\boldsymbol{\Gamma}^{-1}| |\mathbf{W}|} \quad (\text{B.14})$$

Simplification de C_3 . On peut alors simplifier l'expression de C_3 (B.10) :

$$\begin{aligned} C_3 &= \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-\frac{1}{2}} |\mathbf{W}|^{-\frac{1}{2}} |\boldsymbol{\Gamma}|^{\frac{1}{2}} p(\mathbf{w}|\mathbf{q}) p(\mathbf{q}|\lambda) p(\boldsymbol{\theta}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \left(\underbrace{|\boldsymbol{\Sigma}| |\mathbf{W}| |\boldsymbol{\Gamma}^{-1}|}_{|\mathbf{B}|} \right)^{-\frac{1}{2}} p(\mathbf{w}|\mathbf{q}) p(\mathbf{q}|\lambda) p(\boldsymbol{\theta}) \end{aligned}$$

Et donc,

$$\boxed{C_3 = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} |\mathbf{B}|^{-\frac{1}{2}} p(\mathbf{w}|\mathbf{q}) p(\mathbf{q}|\lambda) p(\boldsymbol{\theta})} \quad (\text{B.15})$$

Par conséquent, à partir de (B.9), (B.11) et (B.15) on obtient l'équation (3.9) :

$$\boxed{p(\mathbf{q}, \mathbf{w}, \boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = \frac{|\mathbf{B}|^{-\frac{1}{2}}}{(2\pi)^{N/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{y}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{y} + \boldsymbol{\mu}_x^T \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\mu}_x - 2 \mathbf{y}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\mu}_x\right) p(\mathbf{w}|\mathbf{q}) P(\mathbf{q}|\lambda) p(\boldsymbol{\theta})} \quad (\text{B.16})$$

B.4 Implémentation efficace du PCGS

Dans cette sections nous donnons les détails des calculs de la section 3.4 pour l'implémentation efficace de l'échantillonneur PCGS.

B.4.1 Simplification de la fonction ψ (3.17) p. 72)

Rappelons que dans le cas d'une *Naissance* ou une *Mort* l'expression de la fonction ψ prend la forme suivante (voir (3.17) p. 72 et (3.21) p. 72) :

$$\psi(\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1}, \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}; \mathbf{y}) = \ln\left(\frac{|\mathbf{B}_{(1-q_k)}|}{|\mathbf{B}_{(q_k)}|}\right) + \mathbf{y}^T (\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1} - \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}) \mathbf{y} \quad (\text{B.17})$$

avec,

$$\mathbf{B}_{(u)}^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_{(u)} \boldsymbol{\Gamma}_{(u)} \bar{\mathbf{H}}_{(u)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}.$$

L'inverse de cette matrice s'écrit (en utilisant le lemme d'inversion matricielle, voir (B.13))

$$\mathbf{B}_{(u)} = \left(\mathbf{B}_{(u)}^{-1}\right)^{-1} = \boldsymbol{\Sigma} + \bar{\mathbf{H}}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)} \bar{\mathbf{H}}_{(u)}^T \quad (\text{B.18})$$

et donc

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{(q_k)} &= \boldsymbol{\Sigma} + \sum_{l \neq k | q_l=1} \mathbf{w}_l \mathbf{h}_l \mathbf{h}_l^T + q_k \mathbf{w}_k \mathbf{h}_k \mathbf{h}_k^T \\ \mathbf{B}_{(1-q_k)} &= \boldsymbol{\Sigma} + \sum_{l \neq k | q_l=1} \mathbf{w}_l \mathbf{h}_l \mathbf{h}_l^T + (1 - q_k) \mathbf{w}_k \mathbf{h}_k \mathbf{h}_k^T \end{aligned}$$

la différence des deux expressions ci-dessous donne l'équation (3.22) :

$$\mathbf{B}_{(1-q_k)} - \mathbf{B}_{(q_k)} = (-1)^{q_k} \mathbf{w}_k \mathbf{h}_k \mathbf{h}_k^T. \quad (\text{B.19})$$

et

$$\mathbf{B}_{(1-q_k)} = \mathbf{B}_{(q_k)} + (-1)^{q_k} w_k \mathbf{h}_k \mathbf{h}_k^T. \quad (\text{B.20})$$

En appliquant le lemme d'inversion matricielle une seconde fois nous obtenons :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1} &= \left(\mathbf{B}_{(q_k)} + (-1)^{q_k} w_k \mathbf{h}_k \mathbf{h}_k^T \right)^{-1} \\ &= \left(\underbrace{\mathbf{B}_{(q_k)}}_{\mathbf{P}} - \underbrace{(-\mathbf{h}_k)}_{\mathbf{U}} \underbrace{(-1)^{q_k} w_k}_{\mathbf{Q}^{-1}} \underbrace{\mathbf{h}_k^T}_{\mathbf{V}} \right)^{-1} \\ &= \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} + \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k \underbrace{\left((-1)^{q_k} w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k \right)}_{=\rho_{q_k}}^{-1} \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \end{aligned}$$

avec le scalaire $\rho_{q_k} = (-1)^{q_k} w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k$. Alors

$$\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1} - \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} = -\mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k \rho_{q_k}^{-1} \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}$$

Ce qui implique que :

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^T (\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1} - \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}) \mathbf{y} &= \mathbf{y}^T (-\mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k \rho_{q_k}^{-1} \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}) \mathbf{y} \\ &= -(\mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{y})^T \rho_{q_k}^{-1} (\mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{y}) \\ &= -\gamma_{q_k}^2 / \rho_{q_k} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

où γ_{q_k} est un scalaire tel que $\gamma_{q_k} = \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{y}$.

Par ailleurs, à partir de (B.20) nous avons que

$$|\mathbf{B}_{(1-q_k)}| = \left| \underbrace{\mathbf{B}_{(q_k)}}_{\mathbf{P}} + \underbrace{(-1)^{q_k} w_k \mathbf{h}_k}_{\mathbf{U}} \underbrace{\mathbf{h}_k^T}_{\mathbf{V}^T} \right|$$

En appliquant la généralisation du déterminant matriciel (B.3) nous obtenons (notons que $\mathbf{V}^T \mathbf{U}$ est un scalaire) :

$$\begin{aligned} |\mathbf{B}_{(1-q_k)}| &= |\mathbf{P}| \left| \mathbf{I} + \mathbf{V}^T \mathbf{P}^{-1} \mathbf{U} \right| \\ &= |\mathbf{B}_{(q_k)}| (1 + \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} (-1)^{q_k} w_k \mathbf{h}_k) \\ &= |\mathbf{B}_{(q_k)}| (-1)^{q_k} w_k ((-1)^{q_k} w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k) \\ &= |\mathbf{B}_{(q_k)}| (-1)^{q_k} w_k \rho_{q_k} \end{aligned}$$

donc

$$\frac{|\mathbf{B}_{(1-q_k)}|}{|\mathbf{B}_{(q_k)}|} = (-1)^{q_k} w_k \rho_{q_k} \quad (\text{B.22})$$

À partir de (B.17), (B.21) et (B.22) nous obtenons bien (3.25) :

$$\boxed{\psi(\mathbf{B}_{(1-q_k)}^{-1}, \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1}; \mathbf{y}) = \ln((-1)^{q_k} w_k \rho_{q_k}) - \gamma_{q_k}^2 / \rho_{q_k}} \quad (\text{B.23})$$

avec

$$\boxed{\rho_{q_k} = (-1)^{q_k} w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{h}_k} \quad (\text{B.24})$$

$$\boxed{\gamma_{q_k} = \mathbf{h}_k^T \mathbf{B}_{(q_k)}^{-1} \mathbf{y}} \quad (\text{B.25})$$

B.4.2 Factorisation de Cholesky (Section 3.4.2 p. 74)

Rappelons que l'expression de la matrice \mathbf{B} s'écrit comme suit :

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{G}\mathbf{G}^T$$

avec $\mathbf{G} = \overline{\mathbf{H}}\mathbf{W}^{\frac{1}{2}}$.

En appliquant le lemme d'inversion matricielle (B.1) nous avons que :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{-1} &= (\boldsymbol{\Sigma} + \mathbf{G}\mathbf{G}^T)^{-1} = \left(\underbrace{\boldsymbol{\Sigma}}_{\mathbf{P}} + \underbrace{\mathbf{G}}_{\mathbf{U}} \underbrace{\mathbf{I}}_{\mathbf{Q}^{-1}} \underbrace{\mathbf{G}^T}_{\mathbf{V}} \right)^{-1} \\ &= \mathbf{P}^{-1} + \mathbf{P}^{-1}\mathbf{U} \left(\mathbf{Q} - \mathbf{V}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{U} \right)^{-1} \mathbf{V}\mathbf{P}^{-1} \\ &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{G} \underbrace{(\mathbf{I} + \mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{G})^{-1}}_{=\mathbf{S}} \mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}. \end{aligned}$$

Soit

$$\boxed{\mathbf{B}^{-1} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}} \quad (\text{B.26})$$

avec

$$\boxed{\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{G}} \quad (\text{B.27})$$

où \mathbf{S} est une matrice définie positive de taille $L \times L$. On peut alors décomposer \mathbf{S}^{-1} (qui est également définie positive) en facteur de Cholesky :

$$\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{F}^T\mathbf{F}$$

on obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{-1} &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\ &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{G}\mathbf{F}^T\mathbf{F}\mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\ &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \left(\mathbf{F}\mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right)^T \mathbf{F}\mathbf{G}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

En remplaçant cette expression dans les expressions de ρ_{q_k} et γ_{q_k} (B.24) et (B.25) respectivement nous obtenons les expressions (3.30) et (3.31) :

$$\boxed{\rho_{q_k} = (-1)^{q_k} w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k - (\mathbf{F}_{(q_k)} \mathbf{G}_{(q_k)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k)^T (\mathbf{F}_{(q_k)} \mathbf{G}_{(q_k)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k)} \quad (\text{B.29})$$

$$\boxed{\gamma_{q_k} = \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} - (\mathbf{F}_{(q_k)} \mathbf{G}_{(q_k)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k)^T \mathbf{F}_{(q_k)} \mathbf{G}_{(q_k)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}} \quad (\text{B.30})$$

B.4.3 Mise à jour de la matrice \mathbf{F} dans le cas d'une *Naissance* (Section 3.4.3 p. 74)

Rappelons que l'expression de la matrice \mathbf{S} s'écrit :

$$\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{G}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}$$

Notons par $\mathbf{S}_{(0)}$ la matrice \mathbf{S} quand la matrice \mathbf{G} courante est $\mathbf{G}_{(0)}$ et par \mathbf{S}_k quand la matrice $\mathbf{G}_k = \mathbf{G}_{(1)} = [\mathbf{G}_{(0)} \quad \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k]$, tel que

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{(0)} &= \mathbf{I}_{(0)} + \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(0)} \\ \mathbf{S}_k &= \mathbf{I}_k + \mathbf{G}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_k \end{aligned}$$

où $\mathbf{I}_{(0)}$ et \mathbf{I}_k sont des matrices identités de dimension $L \times L$ et $(L+1) \times (L+1)$ respectivement. À partir de la définition de la matrice \mathbf{G}_k , on peut redéfinir la matrice \mathbf{S}_k par blocs comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_k &= \mathbf{I}_k + \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{(0)}^T \\ \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k \end{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{(0)} & \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(0)} + \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(0)} & \sqrt{w_k} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \\ \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(0)} & 1 + w_k \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{(0)} & \sqrt{w_k} \mathbf{u}_{12} \\ \sqrt{w_k} \mathbf{u}_{12}^T & u_{22} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

avec $\mathbf{u}_{12} = \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k$ et $u_{22} = 1 + w_k \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k$. En appliquant le lemme d'inversion matricielle par blocs (B.2) nous avons :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_k^{-1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{(0)} & \sqrt{w_k} \mathbf{u}_{12} \\ \sqrt{w_k} \mathbf{u}_{12}^T & u_{22} \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{(0)}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^T & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\sqrt{w_k} \mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{u}_{12} \\ \mathbf{I} \end{bmatrix} \left(u_{22} - w_k \mathbf{u}_{12}^T \mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{u}_{12} \right)^{-1} \begin{bmatrix} -\sqrt{w_k} \mathbf{u}_{12}^T \mathbf{S}_{(0)}^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Notons que,

$$\begin{aligned} u_{22} - w_k \mathbf{u}_{12}^T \mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{u}_{12} &= 1 + w_k \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k - w_k \left(\mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \right)^T \mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \\ &= w_k \left(w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k - \left(\mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \right)^T \mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \right) \\ &= w_k \left(w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k - \left(\mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \right)^T \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \right) \\ &= w_k \underbrace{\left(w_k^{-1} + \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k - \left(\mathbf{F}_{(0)} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \right)^T \mathbf{F}_{(0)} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \right)}_{=\rho_{(0)} \text{ d'après (B.29)}} \\ &= w_k \rho_{(0)} \end{aligned}$$

D'autre part, si l'on note $\tilde{\mathbf{u}} = -\mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{u}_{12} = -\mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k$ telle que :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_k^{-1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{(0)}^{-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^T & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \sqrt{w_k} \tilde{\mathbf{u}} \\ \mathbf{I} \end{bmatrix} \left(w_k \rho_{(0)} \right)^{-1} \begin{bmatrix} \sqrt{w_k} \tilde{\mathbf{u}}^T & \mathbf{I} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{(0)} + \rho_{(0)}^{-1} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}^T & w_k^{-\frac{1}{2}} \rho_{(0)}^{-1} \tilde{\mathbf{u}} \\ w_k^{-\frac{1}{2}} \rho_{(0)}^{-1} \tilde{\mathbf{u}}^T & w_k^{-1} \rho_{(0)}^{-1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Soit le vecteur $\mathbf{b}_0 = \rho_{(0)}^{-1} \tilde{\mathbf{u}} = -\rho_{(0)}^{-1} \mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k$ alors :

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{(0)}^{-1} + \rho_{(0)} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0^T & w_k^{-\frac{1}{2}} \mathbf{b}_0 \\ w_k^{-\frac{1}{2}} \mathbf{b}_0^T & w_k^{-1} \rho_{(0)}^{-1} \end{bmatrix}$$

Finalement, comme $\mathbf{S}_{(0)}^{-1} = \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)}$, si l'on pose

$$\mathbf{F}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{11} & \mathbf{f}_{12} \\ \mathbf{0} & f_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.31})$$

où \mathbf{F}_{11} , \mathbf{f}_{12} et f_{22} sont une matrice triangulaire, un vecteur colonne et un scalaire respectivement, nous obtenons bien (3.33) :

$$\mathbf{F}_k^T \mathbf{F}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} \\ \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} + \rho_{(0)} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0^T & w_k^{-\frac{1}{2}} \mathbf{b}_0 \\ w_k^{-\frac{1}{2}} \mathbf{b}_0^T & w_k^{-1} / \rho_{(0)} \end{bmatrix} \quad (\text{B.32})$$

$$\text{où } \mathbf{b}_0 = -\mathbf{S}_{(0)}^{-1} \mathbf{G}_{(0)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k \rho_{(0)}^{-1} \quad (\text{B.33})$$

Par identification de (B.32) et (B.33) avec l'identité donnée dans (B.4) on obtient (3.34) :

$$\mathbf{F}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)} = \bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} + \mathbf{v} \mathbf{v}^T \quad (\text{B.34})$$

$$\text{où } \bar{\mathbf{F}}_{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{(0)} & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & 0 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}} \\ w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.35})$$

B.4.4 Mise à jour de la matrice \mathbf{F} dans le cas d'une *Mort* - Cas 1 (Section 3.4.3 p. 74)

Par identification des deux matrices données dans (B.32) il facile de déduire que

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} &= \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} - \rho_{(0)} \mathbf{b}_0 \mathbf{b}_0^T \\ \text{avec } \rho_{(0)} &= w_k \left(\mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2 \right) \\ \text{et } \mathbf{b}_0 &= w_k^{\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} \end{aligned}$$

Par ailleurs, connaissant la définition du vecteur \mathbf{v}_1 donnée dans (B.33) on conclut que \mathbf{F}_0 correspond une mise à jour de Cholesky (3.37) :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} &= \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} - \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T \implies \mathbf{F}_{(0)} = \text{cholupdate}(\mathbf{F}_{11}, \mathbf{v}_1, -) \\ \mathbf{v}_1 &= \mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}} \\ \rho_0 &= w_k (\mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2) \\ \mathbf{b}_0 &= \sqrt{w_k} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

$$(\text{B.37})$$

B.4.5 Mise à jour de la matrice \mathbf{F} dans le cas d'une *Mort* - Cas 2 (Section 3.4.3 p. 74)

Rappelons que dans ce cas la matrice $\mathbf{G}_{(1)}$ s'écrit $\mathbf{G}_{(1)} = [\mathbf{G}_l \quad w_k \mathbf{h}_k \quad \mathbf{G}_r]$. Nous avons introduit la matrice de permutation \mathbf{P} telle que

$$\mathbf{G}_{(1)} \mathbf{P} = [\mathbf{G}_l \quad \mathbf{G}_r \quad \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k] = \mathbf{G}_k$$

avec

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_l & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_r & \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

où \mathbf{I}_l et \mathbf{I}_r sont deux matrice identités de dimensions $l \times l$ et $r \times r$ respectivement. Rappelons qu'une matrice de permutation \mathbf{P} est orthogonale : $\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^T$. Par ailleurs, la multiplication

d'une matrice quelconque \mathbf{A} par \mathbf{P} à droite permute les colonnes de \mathbf{A} , alors que la multiplication à gauche permute les lignes de \mathbf{A} .

À partir de l'expression de la matrice \mathbf{S} donnée par :

$$\mathbf{S}_k = \mathbf{I} + \mathbf{G}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_k$$

on déduit que

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_k &= \mathbf{I} + (\mathbf{G}_{(1)}\mathbf{P})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{G}_{(1)}\mathbf{P}) \\ &= \mathbf{P}^T \underbrace{(\mathbf{I} + \mathbf{G}_{(1)}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)})}_{=\mathbf{S}_{(1)}} \mathbf{P} \\ &= \mathbf{P}^T \mathbf{S}_{(1)} \mathbf{P} \end{aligned}$$

Par ailleurs, nous avons que $\mathbf{F}_k^T \mathbf{F}_k = \mathbf{S}_k^{-1}$, alors

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_k^T \mathbf{F}_k &= \mathbf{S}_k^{-1} = (\mathbf{P}^T \mathbf{S}_{(1)} \mathbf{P})^{-1} \\ &= \mathbf{P} \mathbf{S}_{(1)}^{-1} \mathbf{P}^T \quad \text{où } \mathbf{S}_{(1)} = \mathbf{F}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)} \\ &= \mathbf{P} \mathbf{F}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}^T \\ &= (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}) \end{aligned} \tag{B.38}$$

Pour calculer $\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}$ nous allons écrire la matrice $\mathbf{F}_{(1)}$ en blocs :

$$\mathbf{F}_{(1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_l & \mathbf{f}_k & \mathbf{F}_r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{f}_{lk} & \mathbf{F}_{lr} \\ \mathbf{0} & \mathbf{f}_{kk} & \mathbf{f}_{kr} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{F}_{rr} \end{bmatrix} \tag{B.39}$$

Les dimensions des différentes sous matrices misent en jeu dans (B.39) sont données dans la Table B.1.

TABLE B.1 : Dimensions des sous sous matrice introduites dans (B.39). Rappelons que $L = l + r + 1$ est la dimension de la matrice $\mathbf{F}_{(1)}$.

Matrice/Vecteur	\mathbf{F}_k	\mathbf{f}_k	\mathbf{F}_r	\mathbf{F}_{ll}	\mathbf{f}_{lk}	\mathbf{F}_{lr}	\mathbf{f}_{kk}	\mathbf{f}_{kr}	\mathbf{F}_{rr}
Dimension	$L \times l$	$L \times 1$	$L \times r$	$l \times l$	$l \times 1$	$l \times r$	1×1	$1 \times r$	$r \times r$

Par permutation nous obtenons

$$\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{F}_{lr} & \mathbf{f}_{lk} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_{rr} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{f}_{kr} & \mathbf{f}_{kk} \end{bmatrix}$$

qui n'est pas une matrice triangulaire, donc $\mathbf{F}_k \neq (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})$. Toutefois, comme nous l'avons vu dans le cas précédent, la mise à jour de \mathbf{F} vers $\mathbf{F}_{(0)}$ requière uniquement le calcul de des blocs \mathbf{F}_{11} , \mathbf{f}_{12} et \mathbf{f}_{22} que l'on peut obtenir par identification comme suit. On commence par calculer $(\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}) &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{F}_{lr}^T & \mathbf{F}_{rr}^T & \mathbf{f}_{kr}^T \\ \mathbf{f}_{lk}^T & \mathbf{0} & \mathbf{f}_{kk}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{F}_{lr} & \mathbf{f}_{lk} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_{rr} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{f}_{kr} & \mathbf{f}_{kk} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll}^T \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{F}_{lr}^T \mathbf{F}_{lr} + \mathbf{F}_{rr}^T \mathbf{F}_{rr} + \mathbf{f}_{kr}^T \mathbf{f}_{kr} & \mathbf{F}_{lr}^T \mathbf{f}_{lk} \\ \mathbf{f}_{lk}^T \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{f}_{lk}^T \mathbf{F}_{lr} + \mathbf{f}_{kk}^T \mathbf{f}_{kr} & \mathbf{f}_{lk}^T \mathbf{f}_{lk} + \mathbf{f}_{kr}^T \mathbf{f}_{kk} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Par ailleurs, nous avons à partir de (B.32) et (B.38) que

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}) &= \mathbf{F}_k^T \mathbf{F}_k \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} \\ \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

par identification nous concluons que

$$\mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll}^T \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{F}_{ll}^T \mathbf{F}_{lr} \\ \mathbf{F}_{lr}^T \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{F}_{lr}^T \mathbf{F}_{lr} + \mathbf{F}_{rr}^T \mathbf{F}_{rr} + \mathbf{f}_{kr}^T \mathbf{f}_{kr} \end{bmatrix} \quad (\text{B.40})$$

où, \mathbf{F}_{rr} est une matrice triangulaire supérieure de dimension $r \times r$ rang plein et \mathbf{f}_{kr}^T est vecteur colonne de dimension $r \times 1$. On peut alors définir la matrice facteur de Cholesky \mathbf{F}_* comme suit :

$$\mathbf{F}_*^T \mathbf{F}_* = \mathbf{F}_{rr}^T \mathbf{F}_{rr} + \mathbf{f}_{kr}^T \mathbf{f}_{kr} \implies \mathbf{F}_* = \text{cholupdate}(\mathbf{F}_{rr}, \mathbf{f}_{kr}^T, +)$$

Ce qui permet de déduire à partir de (B.40) l'équation (3.45) :

$$\boxed{\mathbf{F}_{11} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{ll} & \mathbf{F}_{lr} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_* \end{bmatrix}, \text{ avec } \mathbf{F}_* = \text{cholupdate}(\mathbf{F}_{rr}, \mathbf{f}_{kr}^T, +)}$$

Pour retrouver le vecteur \mathbf{f}_{12} et le scalaire f_{22} et donc \mathbf{b}_0 et ρ_0 , nous allons recalculer $(\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})$ mais cette fois-ci à partir de la définition $\mathbf{F}_{(1)} = [\mathbf{F}_l \ \mathbf{f}_k \ \mathbf{F}_r]$ on obtient :

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}) &= (\mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}) \\ &= [\mathbf{F}_l \ \mathbf{F}_r \ \mathbf{f}_k]^T [\mathbf{F}_l \ \mathbf{F}_r \ \mathbf{f}_k] \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_l^T \mathbf{F}_l & \mathbf{F}_l^T \mathbf{F}_r & \mathbf{F}_l^T \mathbf{f}_k \\ \mathbf{F}_r^T \mathbf{F}_l & \mathbf{F}_r^T \mathbf{F}_r & \mathbf{F}_r^T \mathbf{f}_k \\ \mathbf{f}_k^T \mathbf{F}_l & \mathbf{f}_k^T \mathbf{F}_r & \mathbf{f}_k^T \mathbf{f}_k \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Or, d'après (B.32) et (B.38) :

$$\begin{aligned} (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P})^T (\mathbf{P}^T \mathbf{F}_{(1)} \mathbf{P}) &= \mathbf{F}_k^T \mathbf{F}_k \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} \\ \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{F}_{11} & \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Par identification nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{11}^T \mathbf{f}_{12} &= [\mathbf{F}_l \ \mathbf{F}_r]^T \mathbf{f}_k \\ \mathbf{f}_{12}^T \mathbf{f}_{12} + f_{22}^2 &= \mathbf{f}_k^T \mathbf{f}_k \end{aligned}$$

En combinant ce résultat avec les expressions de $\rho_{(0)}$ et \mathbf{b}_0 dans (B.36) et (B.37) respectivement nous obtenons les équations (3.43) et (3.44) :

$$\boxed{\begin{aligned} \rho_0^{-1} &= w_k \mathbf{f}_k^T \mathbf{f}_k \\ \mathbf{b}_0 &= \sqrt{w_k} [\mathbf{F}_l \ \mathbf{F}_r]^T \mathbf{f}_k \end{aligned}}$$

B.4.6 Simplification de la fonction ϕ (Section 3.4.4 p. 77)

Relation entre Γ et \mathbf{F} . Rappelons l'expression de la matrice de covariance Γ

$$\Gamma = \left(\overline{\mathbf{H}}^T \Sigma^{-1} \overline{\mathbf{H}} + \mathbf{W}^{-1} \right)^{-1} \iff \Gamma^{-1} = \left(\overline{\mathbf{H}}^T \Sigma^{-1} \overline{\mathbf{H}} + \mathbf{W}^{-1} \right)$$

En factorisant $\mathbf{W}^{-\frac{1}{2}}$ à droite et à gauche de la matrice Γ^{-1} nous obtenons :

$$\begin{aligned} \Gamma^{-1} &= \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \left(\underbrace{\mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \overline{\mathbf{H}}^T}_{\mathbf{G}^T} \Sigma^{-1} \underbrace{\overline{\mathbf{H}} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}}_{\mathbf{G}} + \mathbf{I} \right) \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \\ &= \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \left(\underbrace{\mathbf{G}^T \Sigma^{-1} \mathbf{G} + \mathbf{I}}_{\mathbf{S}} \right) \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \\ &= \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{S} \mathbf{W}^{-\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Comme $\mathbf{S} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$ nous obtenons (3.46)

$$\boxed{\Gamma = \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F}^T \mathbf{F} \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{B.41})$$

Expressions des matrices \mathbf{C}^{-1} et \mathbf{D} en fonction de \mathbf{F} . Rappelons les expressions des matrices \mathbf{C}^{-1} et \mathbf{D} :

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{(u)}^{-1} &= \mathbf{W}_{(u)}^{-1} - \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \Gamma_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-1}, \\ \mathbf{D}_{(u)} &= \Sigma^{-1} \overline{\mathbf{H}}_{(u)} \Gamma_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-1}. \end{aligned}$$

En remplaçant l'expression de $\Gamma_{(u)}$ donnée dans (B.41) nous obtenons alors

$$\mathbf{C}_{(u)}^{-1} = \mathbf{W}_{(u)}^{-1} - \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}}, \quad (\text{B.42})$$

$$\mathbf{D}_{(u)} = \Sigma^{-1} \overline{\mathbf{H}}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{B.43})$$

Simplification de la fonction ϕ . Afin de simplifier la fonction ϕ nous allons la scinder en deux et traiter les deux parties séparément. Rappelons que la fonction ϕ est donnée par :

$$\phi_{(u)} = \boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \mathbf{C}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{D}_{(u)} \boldsymbol{\mu}_{x(u)}$$

où $\boldsymbol{\mu}_{x(u)} = \mu \sigma_x \mathbf{1} + \mathbf{w}_{(u)} \beta / \sigma_x$.

On commence par traiter le terme $\boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \mathbf{C}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{x(u)}$ en remplaçant $\mathbf{C}_{(u)}^{-1}$ par l'expression donnée dans (B.42) :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \mathbf{C}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} &= \boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \left(\mathbf{W}_{(u)}^{-1} - \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \right) \boldsymbol{\mu}_{x(u)} \\ &= \underbrace{\boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{x(u)}}_{Q_{(u)}^p} - \underbrace{\boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \left(\mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \right) \boldsymbol{\mu}_{x(u)}}_{Q_{(u)}^n} \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{(u)}^p &= \boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} = (\mu \sigma_x \mathbf{1} + \mathbf{w}_{(u)} \beta / \sigma_x)^T \mathbf{W}_{(u)}^{-1} (\mu \sigma_x \mathbf{1} + \mathbf{w}_{(u)} \beta / \sigma_x) \\ &= \mu^2 \sigma_x^2 \mathbf{1}^T \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \mathbf{1} + \frac{\beta^2}{\sigma_x^2} \mathbf{w}_{(u)}^T \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \mathbf{w}_{(u)} + 2\beta \mu \mathbf{w}_{(u)}^T \mathbf{W}_{(u)}^{-1} \mathbf{1} \\ &= \sigma_x^2 \mu^2 \sum_l w_l^{-1} + \frac{\beta^2}{\sigma_x^2} \sum_l w_l + 2L_{(u)} \beta \mu \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} Q_{(u)}^n &= \boldsymbol{\mu}_{x(u)}^T \left(\mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \right) \boldsymbol{\mu}_{x(u)} = \underbrace{\left(\mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} \right)^T}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(u)}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \underbrace{\left(\mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} \right)}_{\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(u)}} \\ &= \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(u)} \end{aligned}$$

Par ailleurs, en remplaçant l'expression de la matrice \mathbf{D} (B.43) dans le terme $\mathbf{y}^T \mathbf{D} \boldsymbol{\mu}_x$ nous obtenons :

$$\begin{aligned} P_{(u)} &= \mathbf{y}^T \mathbf{D}_{(u)} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} = \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \bar{\mathbf{H}}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{\frac{1}{2}} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(u)} \\ &= \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(u)} \mathbf{F}_{(u)}^T \mathbf{F}_{(u)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(u)} \end{aligned}$$

Étant donné que dans les expressions des probabilités d'acceptation nous avons toujours des différences de fonctions ϕ (voir (3.21) p. 72) et comme $\phi_{(u)} = Q_{(u)}^p - Q_{(u)}^n - 2P_{(u)}$ nous allons simplifier les expressions des différences des fonction $Q_{(u)}^p$, $Q_{(u)}^n$ et $P_{(u)}$.

Nous commençons par calculer $Q_{(1)}^p - Q_{(0)}^p$:

$$\begin{aligned} Q_{(1)}^p - Q_{(0)}^p &= \sigma_x^2 \mu^2 \sum_{l \in \Omega_{(1)}} w_l^{-1} + \frac{\beta^2}{\sigma_x^2} \sum_{l \in \Omega_{(1)}} w_l + 2L_{(1)} \beta \mu \\ &\quad - \left(\sigma_x^2 \mu^2 \sum_{l \in \Omega_{(0)}} w_l^{-1} + \frac{\beta^2}{\sigma_x^2} \sum_{l \in \Omega_{(0)}} w_l + 2L_{(0)} \beta \mu \right) \end{aligned}$$

où les supports $\Omega_{(1)}$ et $\Omega_{(0)}$ ne diffèrent que de l'atome traité w_k et $L_{(1)} - L_{(0)} = 1$, alors

$$\begin{aligned} Q_{(1)}^p - Q_{(0)}^p &= \sigma_x^2 \mu^2 w_k^{-1} + \frac{\beta^2}{\sigma_x^2} w_k + 2\beta \mu \\ &= \left(\mu \sigma_x w_k^{-\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{\sigma_x} w_k^{\frac{1}{2}} \right)^2 \end{aligned} \tag{B.44}$$

D'autre part,

$$Q_{(1)}^n - Q_{(0)}^n = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)}$$

Nous savons à partir de (B.34) et (B.35) que $\mathbf{F}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)} = \bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} + \mathbf{v} \mathbf{v}^T$ où

$$\bar{\mathbf{F}}_{(0)} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{(0)} & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & 0 \end{bmatrix} \text{ et } \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \sqrt{\rho_{(0)}} \\ w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}} \end{bmatrix},$$

alors,

$$\begin{aligned} Q_{(1)}^n - Q_{(0)}^n &= \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)}^T (\bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} + \mathbf{v} \mathbf{v}^T) \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)} \\ &= \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} + \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)}^T \mathbf{v} \mathbf{v}^T \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} - \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)} \end{aligned}$$

sachant que $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)}$ et $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)}$ ne diffèrent qu'au niveau de l'atome traité w_k et par de par la définition de la de la matrice $\bar{\mathbf{F}}_{(0)}$ il est immédiat que $\tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} = \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)}$. Nous avons

donc que

$$\begin{aligned}
 Q_{(1)}^n - Q_{(0)}^n &= \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)}^T \mathbf{v} \mathbf{v}^T \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} \\
 &= \left(\mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right)^T \mathbf{v} \mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \\
 &= \left(\mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right)^T \mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \\
 &= \left(\mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right)^2
 \end{aligned} \tag{B.45}$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned}
 P_{(1)} - P_{(0)} &= \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} \mathbf{F}_{(1)}^T \mathbf{F}_{(1)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} - \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(0)} \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)} \\
 &= \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} (\bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} + \mathbf{v} \mathbf{v}^T) \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} - \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(0)} \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)} \\
 &= \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} \bar{\mathbf{F}}_{(0)}^T \bar{\mathbf{F}}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} + \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} \mathbf{v} \mathbf{v}^T \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} - \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(0)} \mathbf{F}_{(0)}^T \mathbf{F}_{(0)} \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(0)} \\
 &= \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} \mathbf{v} \mathbf{v}^T \tilde{\boldsymbol{\mu}}_{(1)} \\
 &= \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} \mathbf{v} \left(\mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right)
 \end{aligned} \tag{B.46}$$

À partir de (B.44), (B.45) et (B.46) nous obtenons bien (3.47) :

$$\begin{aligned}
 \phi_{(1)} - \phi_{(0)} &= \left(\mu_{\sigma_x} w_k^{-\frac{1}{2}} + \frac{\beta}{\sigma_x} w_k^{\frac{1}{2}} \right)^2 - \left(\mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(1)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right)^2 - 2 \mathbf{y}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}_{(1)} \mathbf{v} \left(\mathbf{v}^T \mathbf{W}_{(u)}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\mu}_{x(1)} \right) \\
 \text{où } \mathbf{v} &= \left[\mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}} \quad w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}} \right]^T,
 \end{aligned}$$

B.5 Pseudo-code détaillé de l'étape RJ-MCMC

Nous donnons ci-dessous les pseudo-codes détaillés des étapes *Naissance*, *Mort* et *Mise à jour* dans (B.1), (B.2) et (B.3) respectivement.

Pseudo-code B.1 Échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) : *Naissance*

```

 $w_k \sim q_{01}$  % Proposer  $w_k$  à partir de l'a priori
 $\mathbf{w} \leftarrow [w, w_k]$ 
 $\mathbf{G} \leftarrow [\mathbf{G}, \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k]$ 
 $\boldsymbol{\alpha} \leftarrow \mathbf{F} \mathbf{G}^T, \boldsymbol{\beta} \leftarrow \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k$ 
 $\rho_{(0)} \leftarrow w_k^{-1} + \mathbf{h}_j^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$ 
 $\gamma_{(0)} \leftarrow \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} - \boldsymbol{\beta}^T (\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y})$ 
 $\psi \leftarrow \ln(w_k \rho_{(0)}) - \gamma_{(0)}^2 \rho_{(0)}^{-1} - 2 \log\left(\frac{1-\lambda}{\lambda} \cdot \frac{p_{10}}{p_{01}}\right)$  %  $\psi(\mathbf{B}_{(1)}^{-1}, \mathbf{B}_{(0)}^{-1}; \mathbf{y}) - \chi_{10}$ 
 $\mathbf{v} \leftarrow [\mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}}, w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}}]$ 
 $V_w \leftarrow \mu \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} \sqrt{\mathbf{w}}) + \beta / \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} / \sqrt{\mathbf{w}})$ 
 $\phi \leftarrow (\mu \sigma_x w_k^{-\frac{1}{2}} + \beta / \sigma_x w_k^{\frac{1}{2}})^2 - V_w^2 - 2(\mathbf{y} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{v}) V_w$ 
Tirer  $u \sim \mathcal{U}([0; 1])$ 
si  $u < \exp(-1/2(\psi + \phi))$  alors
  % Naissance acceptée
   $q_k \leftarrow 1, L \leftarrow L + 1$ 
   $\mathbf{F} \leftarrow \text{cholupdate}([\mathbf{F} \ \mathbf{0}; \ \mathbf{0} \ \mathbf{0}], \mathbf{v}, +)$ 
   $o_k \leftarrow L$  % Mise à jour du vecteur d'ordre  $\mathbf{o}$ 
sinon
   $w_k \leftarrow \emptyset, \mathbf{G}(:, L + 1) = \emptyset$ 
fin si

```

Pseudo-code B.2 Échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) : *Mort*

```

% Récupération de  $\rho_{(0)}$  et  $\gamma_{(0)}$ 
 $\mathbf{e} \leftarrow \mathbf{F}^T \mathbf{F}(:, o_k)$  %  $= [\mathbf{F}_l \ \mathbf{f}_k \ \mathbf{F}_r]^T \mathbf{f}_k$ 
 $\rho_{(0)}^{-1} \leftarrow w_k \mathbf{e}(:, o_k)$  %  $= w_k \mathbf{f}_k^T \mathbf{f}_k$ 
 $\mathbf{b}_0 \leftarrow w_k \mathbf{e}(:, \overline{o_k})$  %  $= w_k [\mathbf{F}_l \ \mathbf{F}_r]^T \mathbf{f}_k$ ;  $\overline{o_k}$  : tous les indices de  $\mathbf{o}$  sauf  $o_k$ 
 $\gamma_{(0)} \leftarrow (\mathbf{h}_k^T + \rho_{(0)} \mathbf{b}_0^T \mathbf{G}_{(0)}^T) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}$ 
 $\psi \leftarrow \ln(w_k \rho_{(0)}) - \gamma_{(0)}^2 \rho_{(0)}^{-1} - 2 \log\left(\frac{\lambda}{1-\lambda} \cdot \frac{p_{01}}{p_{10}}\right)$  %  $\psi(\mathbf{B}_{(0)}^{-1}, \mathbf{B}_{(1)}^{-1}; \mathbf{y}) - \chi_{01}$ 
 $\mathbf{v} \leftarrow [\mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}}, w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}}]$ 
 $V_w \leftarrow \mu \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} \sqrt{\mathbf{w}}) + \beta / \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} / \sqrt{\mathbf{w}})$ 
 $\phi \leftarrow (\mu \sigma_x w_k^{-\frac{1}{2}} + \beta / \sigma_x w_k^{\frac{1}{2}})^2 - V_w^2 - 2(\mathbf{y} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{v}) V_w$ 
Tirer  $u \sim \mathcal{U}([0; 1])$ 
si  $u < \exp(1/2(\psi + \phi))$  alors
  % Mort acceptée
   $\mathbf{G}(:, o_k) \leftarrow \emptyset, i_o \leftarrow o_k + 1 : L$ 
  si  $o_k < L$  alors
     $\mathbf{F}(i_o, i_o) \leftarrow \text{cholupdate}(\mathbf{F}(i_o, i_o), \mathbf{F}(o_k, i_o), +)$ 
  fin si
   $\mathbf{F}_t \leftarrow \mathbf{F}(\overline{o_k}, \overline{o_k})$  % On retire les lignes et colonnes d'indices  $o_k$ 
   $\mathbf{F} \leftarrow \text{cholupdate}(\mathbf{F}_t, \mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}}, -)$ 
   $\mathbf{o}(i | o_i > o_k) \leftarrow \dots - 1, o_k \leftarrow 0$  % Mise à jour du vecteur d'ordre  $\mathbf{o}$  : on enlève 1 à tous les
   $o_i > o_j$ 
   $q_k \leftarrow 0, L \leftarrow L - 1$ 
fin si

```

Pseudo-code B.3 Échantillonnage conjoint de (q_k, w_k) : *Mise à jour*

```

 $u \sim \mathcal{U}([0; 1]), \tau = u > 1/2$  %  $\tau \in \{0, 1\}$  Variable booléenne : si  $\tau = 1$  proposition à partir de
l'a priori  $q_{11}^{(1)}$ , si  $\tau = 0$  proposition à partir de  $q_{11}^{(2)}$  i.e.,  $\mathcal{N}^+(0, \rho_w)$ 
% Récupération de  $\rho_{(0)}$  et  $\gamma_{(0)}$ 
 $\mathbf{e} \leftarrow \mathbf{F}^T \mathbf{F}(:, o_k)$  %  $= [\mathbf{F}_l \ \mathbf{f}_k \ \mathbf{F}_r]^T \mathbf{f}_k$ 
 $\rho_{(0)}^{-1} \leftarrow w_k \mathbf{e}(:, o_k)$  %  $= w_k \mathbf{f}_k^T \mathbf{f}_k$ 
 $\mathbf{b}_0 \leftarrow w_k \mathbf{e}(:, \bar{o}_k)$  %  $= w_k [\mathbf{F}_l \ \mathbf{F}_r]^T \mathbf{f}_k$ ;  $\bar{o}_k$  : tous les indices de  $\mathbf{o}$  sauf  $o_k$ 
 $\gamma_{(0)} \leftarrow (\mathbf{h}_k^T + \rho_{(0)} \mathbf{b}_0^T \mathbf{G}_{(0)}^T) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y}$ 
 $\psi \leftarrow \ln(w_k \rho_{(0)}) - \gamma_{(0)}^2 \rho_{(0)}^{-1}$  %  $\psi_m(\mathbf{B}_{(1)}'^{-1}, \mathbf{B}_{(1)}^{-1}; \mathbf{y})$ 
 $\mathbf{v} \leftarrow [\mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}}, w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}}]$ 
 $V_w \leftarrow \mu \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} \sqrt{\mathbf{w}}) + \beta / \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} / \sqrt{\mathbf{w}})$ 
 $\phi_m \leftarrow (\mu \sigma_x w_k^{-\frac{1}{2}} + \beta / \sigma_x w_k^{\frac{1}{2}})^2 - V_w^2 - 2(\mathbf{y} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{v}) V_w$ 
 $\mathbf{F}_{old} = \mathbf{F}, \mathbf{G}_{old} = \mathbf{G}, w_{old} = w_k, i_o \leftarrow o_k + 1 : L$ 
si  $o_k < L$  alors
     $\mathbf{F}(i_o, i_o) \leftarrow \text{cholupdate}(\mathbf{F}(i_o, i_o), \mathbf{F}(o_k, i_o), +)$ 
fin si
 $\mathbf{F}_t \leftarrow \mathbf{F}(\bar{o}_k, \bar{o}_k)$ 
 $\mathbf{F} \leftarrow \text{cholupdate}(\mathbf{F}_t, \mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}}, -)$ 
 $w_k \sim \tau q_{11}^{(1)} + (1 - \tau) q_{11}^{(2)}$  % Proposer  $w_k$  à partir de l'a priori si  $\tau = 1$ , ou à partir de  $\mathcal{N}^+(0, \rho_w)$ 
si  $\tau = 0$ 
 $\mathbf{w} \leftarrow [w, w_k], \mathbf{G} \leftarrow [\mathbf{G}, \sqrt{w_k} \mathbf{h}_k]$ 
 $\boldsymbol{\alpha} \leftarrow \mathbf{F} \mathbf{G}^T, \boldsymbol{\beta} \leftarrow \boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k$ 
 $\rho_{(0)} \leftarrow w_k^{-1} + \mathbf{h}_j^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{h}_k - \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\beta}$ 
 $\gamma_{(0)} \leftarrow \mathbf{h}_k^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y} - \boldsymbol{\beta}^T (\boldsymbol{\alpha} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{y})$ 
 $\psi_n \leftarrow \ln(w_k \rho_{(0)}) - \gamma_{(0)}^2 \rho_{(0)}^{-1}$  %  $\psi(\mathbf{B}_{(1)}'^{-1}, \mathbf{B}_{(1)}^{-1}; \mathbf{y})$ 
 $\mathbf{v} \leftarrow [\mathbf{b}_0 \sqrt{\rho_{(0)}}, w_k^{-\frac{1}{2}} / \sqrt{\rho_{(0)}}]$ 
 $V_w \leftarrow \mu \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} \sqrt{\mathbf{w}}) + \beta / \sigma_x \text{sum}(\mathbf{v} / \sqrt{\mathbf{w}})$ 
 $\phi_n \leftarrow (\mu \sigma_x w_k^{-\frac{1}{2}} + \beta / \sigma_x w_k^{\frac{1}{2}})^2 - V_w^2 - 2(\mathbf{y} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{v}) V_w$ 
 $Z_w \leftarrow \tau + (1 - \tau) \zeta(w_{old} / w_k)$ 
Tirer  $u \sim \mathcal{U}([0; 1])$ 
si  $u < \exp(-1/2(\psi_n - \psi_m + \phi_n - \phi_m)) \cdot Z_w$  alors
    % Mise à jour acceptée
 $\mathbf{F} \leftarrow \text{cholupdate}([\mathbf{F} \ \mathbf{0}; \mathbf{0} \ \mathbf{0}], \mathbf{v}, +)$ 
 $\mathbf{o}(i | (o_i > o_k)) \leftarrow - - 1, o_k \leftarrow L$  % Mise à jour du vecteur d'ordre  $\mathbf{o}$ 
sinon
 $w_k \leftarrow w_{old}, \mathbf{G} = \mathbf{G}_{old}, \mathbf{F} = \mathbf{F}_{old}$ 
fin si

```

Annexe C

Annexe du chapitre 5

Dans cette annexe, nous donnons les démonstrations de résultats du Chapitre 5.

C.1 Démonstration de la Proposition 5 (p. 108)

On rappelle l'expression de la densité de probabilité $p(\mathbf{x})$:

$$p(\mathbf{x}) \propto \prod_m^M p_T(t_m) = \prod_m^M \int_{\mathbb{R}_+} G(t_m; \beta w_m^{-1}, w_m^{-1}) p_W(w_m) dw_m. \quad (\text{C.1})$$

Alors, la densité jointe $p(\mathbf{x}, \mathbf{w})$ s'écrit :

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \prod_m^M G(t_m; \beta w_m^{-1}, w_m^{-1}) p_W(w_m). \quad (\text{C.2})$$

Démonstration.

- (i) À partir de (C.2) il est immédiat de constater que les variables w_m sont indépendantes les une des autres et qu'elles dépendent de \mathbf{x} à travers t_m , donc $p_W(\mathbf{w}|\mathbf{x}) = \prod_m^M p_W(w_m|t_m)$.
- (ii) De même, à partir de (C.2) on peut écrire

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}|\mathbf{w}) &\propto \prod_m^M G(t_m; \beta w_m^{-1}, w_m^{-1}) = \prod_m^M \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi w_m^{-1}}} \right) \times \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_m^M w_m (t_m - \beta w_m^{-1})^2 \right) \\ &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_m^M w_m (t_m)^2 - 2\beta t_m \right) \end{aligned}$$

Sachant que $t_m = [\mathbf{Ax} - \mathbf{b}]_m$, on peut écrire $p(\mathbf{x}|\mathbf{w})$ sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{aligned} p(\mathbf{x}|\mathbf{w}) &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left((\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T \mathbf{W} (\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) - 2\beta (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T \mathbf{1} \right) \right) \\ &\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{W} \mathbf{A} \mathbf{x} - 2\mathbf{x}^T \mathbf{A}^T (\mathbf{W} \mathbf{b} + \beta \mathbf{1}) \right) \right), \end{aligned}$$

où $\mathbf{W} = \text{diag}\{\mathbf{w}\}$. On déduit donc que $\mathbf{x}|\mathbf{w}$ est distribué suivant une gaussienne multidimensionnelle $\mathcal{N}(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\Lambda}^{-1})$ avec

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta} &= \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{W} \mathbf{b} + \beta \mathbf{1}), \\ \boldsymbol{\Lambda} &= \mathbf{A}^T \mathbf{W} \mathbf{A}. \end{aligned}$$

(iii) Il est évident, d'après la Proposition 5-(i), que $E[W_m|\mathbf{x}] = E[W_m|t_m]$. À partir de la définition de la densité p_T ((5.5) p. 108) nous avons que $\phi_\beta = -\ln p_T$, alors $\phi'_\beta = -p'_T/p_T$ avec

$$\begin{aligned} p'_T(t) &= \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}_+} G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw = \int_{\mathbb{R}_+} \frac{d}{dt} G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw \\ &= - \int_{\mathbb{R}_+} \frac{t - \beta w^{-1}}{w^{-1}} G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw \\ &= -t \int_{\mathbb{R}_+} w G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw + \beta \int_{\mathbb{R}_+} G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw \\ &= -t \int_{\mathbb{R}_+} w G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw + \beta p_T(t) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Par ailleurs, l'espérance conditionnelle de W sachant t s'écrit :

$$\begin{aligned} E[W|t] &= \int_{\mathbb{R}_+} w p(w|t) dw = \frac{1}{p_T(t)} \int_{\mathbb{R}_+} w p(w, t) dw, \\ &= \frac{1}{p_T(t)} \int_{\mathbb{R}_+} w G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw \\ &\implies \int_{\mathbb{R}_+} w G(t; \beta w^{-1}, w^{-1}) p_W(w) dw = p_T(t) E[W|t] \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

En remplaçant l'expression de (C.4) dans (C.3) nous obtenons

$$\begin{aligned} p'_T(t) &= -t p_T(t) E[W|t] + \beta p_T(t) \\ \implies E[W|t] &= \frac{-p'_T(t)/p_T(t) + \beta}{t} \end{aligned}$$

ce qui permet de conclure que $E[W|t] = \frac{\phi'_\beta(t) + \beta}{t}$.

■

C.2 Démonstration de la Proposition 6 (p. 109)

La démonstration est immédiate à partir de la Proposition 2 p. 41 sur la décomposition des densités LSMG, qui stipule que toute densité LSMG p admet la forme :

$$p(x) = K^{-1} \exp(\beta x) p_S(x)$$

où $p_S(x)$ est une densité SMG, $\beta \in \mathbb{R}$ et K une constante de normalisation. Alors,

$$-\ln p(x) = -\ln(K^{-1}) - \beta x - \ln p_S(x)$$

Par ailleurs, $\phi_{GR} = -\ln p_S$ est une fonction \mathcal{C}^1 sur \mathbb{R}^* et paire (p_S est une densité SMG symétrique) et $\phi_{GR}(\sqrt{x})$ est une fonction concave [CI04, Lemme 3] ce qui permet de conclure la démonstration.

Annexe D

Lois de probabilité et fonctions non élémentaires

Afin d'accompagner le lecteur dans la compréhension du manuscrit, ce chapitre détaille les lois et densités de probabilité ainsi que les fonction non élémentaires utilisées.

Lois de probabilité

Bernoulli $\mathcal{B}(\xi)$

$$P(X = k) = \begin{cases} \xi, & k = 1 \\ 1 - \xi, & k = 0 \end{cases}$$

avec $\xi \in [0, 1]$.

Exponentielle $\mathcal{E}(\sigma^{-1})$

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma} \exp\left(-\frac{x}{\sigma}\right), & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

avec $\sigma \in \mathbb{R}_+^*$.

Gamma $\Gamma(\alpha, \beta)$

$$p(x) = \begin{cases} \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} \exp(-\beta x), & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

avec $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+^*$.

Inverse-Gamma $\text{IG}(\alpha, \beta)$

$$p(x) = \begin{cases} \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{-\alpha-1} \exp\left(-\frac{\beta}{x}\right), & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

avec $\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+^*$.

Inverse gaussienne généralisée $\text{GIG}(\lambda, \gamma, \delta)$

$$p(x) = \begin{cases} \frac{\gamma^\lambda \delta^{-\lambda}}{2K_\lambda(\delta\gamma)} x^{\lambda-1} \exp\left(-\frac{\gamma^2 x + \delta^2 x^{-1}}{2}\right), & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

avec $\gamma, \delta \in \mathbb{R}_+^*$ et $\lambda \in \mathbb{R}$.

Laplace $\mathcal{L}(\mu, \sigma)$

$$p(x) = \frac{1}{2\sigma} \exp\left(-\frac{|x - \mu|}{\sigma}\right), \quad x \in \mathbb{R}$$

avec $\mu \in \mathbb{R}$ et $\sigma \in \mathbb{R}_+^*$. Quand $\mu = 0$ on note $\mathcal{L}(\sigma)$.

Cauchy $\mathcal{C}(\mu, \sigma)$

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\pi} \left(1 + \frac{(x - \mu)^2}{\sigma^2}\right)^{-1}, \quad x \in \mathbb{R}$$

avec $\sigma \in \mathbb{R}_+^*$. Quand $\mu = 0$ on note $\mathcal{C}(\sigma)$.

Student $T(\nu)$

$$p(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\sqrt{\pi\nu}\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \left(1 + \frac{x^2}{\nu}\right)^{-\frac{\nu+1}{2}}, \quad x \in \mathbb{R}$$

avec $\nu \in \mathbb{R}_+^*$ et $\Gamma(\cdot)$ is the Gamma function.

Laplace asymétrique $\text{AL}(\alpha, \beta, \mu)$

$$p(x) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha} \exp(-\alpha|x - \mu| + \beta(x - \mu)), \quad x \in \mathbb{R}$$

avec $\mu \in \mathbb{R}$, $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$ et $|\beta| < \alpha$.

Variance-Gamma $\text{VG}(\lambda, \alpha, \beta, \mu)$

$$p(x) = \frac{\gamma^{2\lambda} |x - \mu|^{\lambda - \frac{1}{2}} K_{\lambda - \frac{1}{2}}(\alpha|x - \mu|)}{\sqrt{\pi}\Gamma(2\alpha)^{\lambda - \frac{1}{2}}} e^{\beta(x - \mu)}, \quad x \in \mathbb{R}$$

avec $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$, $\alpha \in \mathbb{R}_+^*$, $|\beta| < \alpha$, et $\gamma^2 = \alpha^2 - \beta^2$.

Hyperbolique généralisée $\text{GH}(\lambda, \alpha, \beta, \delta, \mu)$

$$p(x) = \frac{\gamma^\lambda \delta^{-\lambda}}{\sqrt{2\pi} K_\lambda(\delta\gamma)} \frac{K_{\lambda - \frac{1}{2}}(\alpha\sqrt{\delta^2 + (x - \mu)^2})}{\left(\frac{1}{\alpha}\sqrt{\delta^2 + (x - \mu)^2}\right)^{\frac{1}{2} - \lambda}} e^{\beta(x - \mu)},$$

$x \in \mathbb{R}$, avec $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$, $\alpha, \delta \in \mathbb{R}_+^*$, $|\beta| < \alpha$, $\gamma^2 = \alpha^2 - \beta^2$, et $K_\lambda(\cdot)$ est la fonction de Bessel modifiée du second genre.

Fonctions non élémentaires

$\Gamma(\cdot)$	Fonction Gamma
$K_\lambda(\cdot)$	Fonction de Bessel modifiée de second genre
$\text{erf}(\cdot)$	Fonction d'erreur

Table des figures

1.1	Illustration de la déconvolution de train d'impulsions dans le contexte du contrôle non destructif (CND) des matériaux.	3
1.2	Illustration du problème de piégeage des approches MCMC.	18
2.1	Représentation non exhaustive des lois de la famille GH ainsi que certains cas spéciaux et limites. LSMG en bleu, SMG en vert et cas limites hors mélange de gaussiennes en rouge.	37
2.2	Densité de probabilité de l'approximation ELSA d'une loi exponentielle de paramètre d'échelle unitaire (en bleu) comparée à une approximation AXDA (en rouge) et l'approximation de Moreau (en jaune). Les paramètres des approximations ont été fixés de sorte que les variations totales soient identiques.	47
2.3	Densités de probabilité (a) et représentations logarithmiques (b) des approximations LSMG (ELSA en bleu et AMEX en magenta) d'une loi exponentielle de paramètre d'échelle unitaire comparée à une approximation AXDA (en rouge) et l'approximation de Moreau (en jaune). Les paramètres des approximations ont été fixés de sorte que les variations totales soient identiques.	50
2.4	Comparaisons des performances des échantillonneurs : Gibbs classique (première ligne), Gibbs avec décomposition SMG (deuxième ligne) et PCGS avec décomposition SMG (dernière ligne). Première colonne : échantillons $\mu^{(t)}$ générés ; deuxième colonne : corrélation structurelle entre μ et x_1 ; troisième colonne : fonction d'auto-corrélation ACF de μ	57
2.5	Différentes stratégies de marginalisation de la loi jointe $p(\mathbf{x}, \mathbf{w}, \mu \mathbf{y})$	60
4.1	Schéma illustrant le principe de calcul du MPSRF. Les lignes rouges représentent les lots de taille $m\Delta_T$ avec $m = \llbracket 1; T/\Delta_T \rrbracket$ et le MPSRF est calculé sur la seconde moitié de chaque lot représentée en vert. Un exemple d'évolution du MPSRF est donné par la courbe bleu où le seuil de convergence est atteint à T_c	83
4.2	(a) Réponse impulsionnelle $\mathbf{h}(f_h)$, (b) exemple de train d'impulsions (amplitudes) \mathbf{x} , (c) données simulées correspondantes non bruitées, (d) données simulées \mathbf{y} correspondantes bruitées dans le cas d'un RSB = 9 dB.	86
4.3	Résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par : (a) PCGS (b) Gibbs, après convergence.	86
4.4	Évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations des échantillonneurs PCGS et Gibbs. La ligne pointillée horizontale représente le seuil de convergence à 1.2.	87

4.5	Analyse de l'efficacité de convergence : (a) nombre d'itérations T_c et (b) temps de calcul nécessaires pour atteindre la convergence sur 100 signaux de la base de données. PCGS en bleu, Gibbs en rouge. La ligne verticale s'étend de la valeur minimale à la valeur maximale, les segments horizontaux représentent les premier, deuxième (médiane) et troisième quartiles et le point la moyenne.	87
4.6	Analyse de la qualité de l'estimation : (a) précision et (b) rappel des séquences de Bernoulli \mathbf{q} estimées. PCGS en bleu et Gibbs en rouge.	88
4.7	Analyse d'un cas pathologique pour l'échantillonneur de Gibbs : (a)-(b) résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par l'échantillonneur PCGS (à gauche) et de Gibbs (à droite), (c)-(d) zoom sur le résultats d'estimation pour $k \in [50, 100]$ et (e)-(f) données restituées à partir de l'estimation $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\hat{\mathbf{x}}$	89
4.8	Analyse de l'efficacité de l'échantillonnage des hyper-paramètres du modèle BMG. Représentation de trois chaînes de Markov pour les 150 premières itérations du PCGS : (a) paramètre de la séquence de Bernoulli λ , (b) paramètres d'échelle des amplitudes σ_x (c) variance du bruit σ . La ligne noire pointillée représente la vraie valeur de l'hyper-paramètre.	90
4.9	Temps de calcul moyen par itération τ_{iter} en fonction de $K \in [100, 900]$. Le PCGS est représenté en bleu avec une fonction d'interpolation quadratique et le Gibbs en rouge avec une fonction d'interpolation linéaire.	91
4.10	Temps de calcul moyen (sur 50 signaux) nécessaire pour atteindre la convergence en fonction de $K \in [100, 900]$	92
4.11	(a) exemple de train d'impulsions (amplitudes) non négatives \mathbf{x} , (b) données simulées \mathbf{y} correspondantes bruitées dans le cas d'un RSB = 12 dB.	95
4.12	Résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par : (a) PCGS et (b) Gibbs, après convergence.	95
4.13	Évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations des échantillonneurs PCGS et Gibbs. La ligne pointillée horizontale représente le seuil de convergence à 1.2.	96
4.14	Analyse de l'efficacité de convergence : (a) nombre d'itérations T_c et (b) temps de calcul nécessaire pour atteindre la convergence sur 100 signaux de la base de données. PCGS en bleu, Gibbs en rouge.	96
4.15	Analyse de la qualité de l'estimation : (a) précision, (b) rappel et (c) F_1 -score des séquences de Bernoulli \mathbf{q} estimées. PCGS en bleu et Gibbs en rouge.	97
4.16	Analyse de l'efficacité de l'échantillonnage des hyper-paramètres. Représentation de trois chaînes de Markov pour les 800 premières itérations du PCGS : (a) paramètres d'échelle des amplitudes σ_x . La ligne noire pointillée représente la vraie valeur de l'hyper-paramètre.	97
4.17	Coût de calcul moyen sur 100 signaux en fonction de la proportion d'amplitudes négatives générées. La courbe noire pointillée représente une approximation de la forme $g(t) = at^b + c$ du nuage de points qui possède la forme d'une courbe en L.	99
4.18	Analyse de la qualité de l'estimation en fonction du paramètre β : (a) précision, (b) rappel et (c) F_1 -score des séquences de Bernoulli \mathbf{q} estimées. PCGS en bleu et Gibbs en rouge.	100
5.1	Fonctions semi-quadratiques asymétriques GY (AGY) proposées par [MCB ⁺ 05] avec $s = 1$	105
5.2	Exemples de fonctions semi-quadratiques asymétriques. Les paramètres ont été fixés à $\alpha = 2$, $\beta = 1$ et $s = 1$. Les fonctions ont été décalées afin d'avoir $\arg \min_x \phi_\beta(x) = 0$ et $\inf_x \phi_\beta(x) = 0$	106

6.1	Introduction du paramètre de décalage pour l'approximation ELSA (avec $\beta = 3$) de la loi exponentielle standardisée : (a) sans paramètre de décalage $\mu = 0$, (b) avec paramètre de décalage $\mu = 0.1$	114
6.2	Données simulées : (a) train d'impulsions (amplitudes) non négatives \mathbf{x} , (b) données bruitées \mathbf{y} correspondantes.	115
6.3	Résultats d'estimation des amplitudes \mathbf{x} par : (a) modèle BMG sans décalage (b) modèle BMG avec décalage, après convergence.	115
6.4	Évolution du MPSRF en fonction du nombre d'itérations des échantillonneurs PCGS démodèle BMG et BMG- μ . La ligne pointillée horizontale représente le seuil de convergence à 1.2.	116
6.5	Approximation en mélange de gaussiennes d'une loi uniforme sur $[0, 1]$: (a) Comparaison de la densité de probabilité de l'approximation ELSA (en bleu) à une approximation AXDA (en rouge). (b) Schéma illustrant trois densités gaussiennes impliquées dans l'approximation ELSA. Les paramètres des approximations ELSA et AXDA ont été fixés de sorte que les variations totales soient identiques.	117
6.6	Approximation en mélange de gaussiennes d'une loi uniforme sur $[0, 1]$: (a) comparaisons de la densité de probabilité de l'approximation EGLSA à celle de la loi uniforme sur $[0, 1]$. (b) Schéma illustrant trois densités gaussiennes impliquées dans l'approximation EGLSA.	119

Liste des tableaux

2.1	Définition des types de lois de mélange de gaussiennes où $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$. W est une variable aléatoire de mélange de densité continu $p_W(w)$. W est indépendante de Z .	33
2.2	Exemples de distributions SMG avec la distribution de la variable de mélange correspondante	34
2.3	Exemples de distributions LSMG avec la distribution de la variable de mélange correspondante, où $\gamma^2 = \alpha^2 - \beta^2$	36
2.4	Minimisation des critères semi-quadratiques K_{GR} et K_{GY} par algorithme de type <i>Block Coordinate Descent</i>	38
2.5	<i>Effective Sample Size Ratio</i> (ESSR) des chaînes de Markov générées par chacun des échantillonneurs de la variable x_1 . L'ESSR a été estimé à partir de $T = 5000$ échantillons.	54
2.6	<i>Effective Sample Size Ratio</i> (ESSR) des chaînes de Markov générées par chacun des échantillonneurs de la variable x_1 . L'ESSR a été estimé à partir de $T = 5000$ échantillons.	58
3.1	Exemples de paramétrisation de l' <i>a priori</i> BMG et leur représentation Bernoulli- \mathcal{D} correspondante. Les variables q_k sont distribuées suivant (3.2) et $x_k q_k = 0 \sim \delta_0(x_k)$.	66
4.1	Facteur d'accélération FA en termes de temps de calcul apporté par l'échantillonneur PCGS en comparaison de l'échantillonneur de Gibbs en fonction du paramètre β .	99
5.1	Minimisation des critères semi-quadratiques K_{GR} et K_{GY} par l'algorithme de type <i>Block Coordinate Descent</i> où $\mathbf{U} = \text{diag}\{\mathbf{u}\}$.	104
5.2	Conditions nécessaires sur ϕ permettant de considérer les schémas semi-quadratiques GR et GY.	104
5.3	Exemples de fonctions semi-quadratiques asymétriques. Le paramètre α permet d'attribuer un poids à la fonction symétrique ϕ_{GR} , β permet de contrôler l'asymétrie des fonctions, et s le comportement autour du minimum.	106
5.4	Schéma AGR pour la minimisation du critère semi-quadratique asymétrique $K_{GR}^\beta(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ par algorithme de type <i>Block Coordinate Descent</i> où $\mathbf{U} = \text{diag}\{\mathbf{u}\}$	107
5.5	Algorithme <i>Expectation-Maximisation</i> pour la maximisation de la loi <i>a posteriori</i> (5.3)	109
B.1	Dimensions des sous sous matrice introduites dans (B.39). Rappelons que $L = l + r + 1$ est la dimension de la matrice $\mathbf{F}_{(1)}$.	144

Bibliographie

- [AD99] C. Andrieu and A. Doucet. “Joint Bayesian model selection and estimation of noisy sinusoids via reversible jump MCMC”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 47, no. 10, pp. 2667–2676, 1999. doi :10.1109/78.790649. 71
- [AM74] D. F. Andrews and C. L. Mallows. “Scale mixtures of normal distributions”. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Methodological)*, volume 36, no. 1, pp. 99–102, 1974. doi :https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1974.tb00989.x. 35, 43, 60, 127, 131
- [Azz85] A. Azzalini. “A class of distributions which includes the normal ones”. *Scandinavian Journal of Statistics*, volume 12, no. 2, pp. 171–178, 1985. 33, 41, 46
- [BBFAC04] J. Bect, L. Blanc-Féraud, G. Aubert, and A. Chambolle. “A 11-unified variational framework for image restoration”. In T. Pajdla and J. Matas, editors, *Computer Vision - ECCV 2004*, pp. 1–13. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004. doi :https://doi.org/10.1007/978-3-540-24673-2_1. 21
- [BC05] S. Bourguignon and H. Carfantan. “Bernoulli-Gaussian spectral analysis of unevenly spaced astrophysical data”. In *IEEE/SP 13th Workshop on Statistical Signal Processing, 2005*, pp. 811–816. 2005. doi :10.1109/SSP.2005.1628705. 15, 26, 88
- [BC06] S. Bourguignon and H. Carfantan. “Spectral analysis of irregularly sampled data using a Bernoulli-Gaussian model with free frequencies”. In *IEEE International Conference on Acoustics Speech and Signal Processing Proceedings*, volume 3, pp. 516–519. 2006. doi :10.1109/ICASSP.2006.1660704. 3, 13, 14, 15, 71, 79, 83, 113
- [BC15] S. Bourguignon and H. Carfantan. *Line Spectra Estimation for Irregularly Sampled Signals in Astrophysics*, chapter 6, pp. 141–167. John Wiley & Sons, Ltd, 2015. doi :https://doi.org/10.1002/9781118827253.ch6. 6
- [BCBB16] M. Boudineau, H. Carfantan, S. Bourguignon, and M. Bazot. “Sampling schemes and parameter estimation for nonlinear Bernoulli-Gaussian sparse models”. In *2016 IEEE Statistical Signal Processing Workshop (SSP)*, pp. 1–5. 2016. doi :10.1109/SSP.2016.7551706. 13, 14, 26, 83
- [BG98] S. P. Brooks and A. Gelman. “General methods for monitoring convergence of iterative simulations”. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, volume 7, no. 4, pp. 434–455, 1998. doi :10.1080/10618600.1998.10474787. 82
- [BH16] I. Barbu and C. Herzet. “A new approach for volume reconstruction in TomoPIV with the alternating direction method of multipliers”. *Measurement Science and Technology*, volume 27, no. 10, p. 104002, 2016. doi :10.1088/0957-0233/27/10/104002. 6

- [Bie96] D. Bienstock. “Computational study of a family of mixed-integer quadratic programming problems”. *Mathematical programming*, volume 74, no. 2, pp. 121–140, 1996. [8](#)
- [BNCM16] S. Bourguignon, J. Ninin, H. Carfantan, and M. Mongeau. “Exact sparse approximation problems via mixed-integer programming : Formulations and computational performance”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 64, no. 6, pp. 1405–1419, 2016. doi :10.1109/TSP.2015.2496367. [8](#)
- [BNK77] O. Barndorff-Nielsen and D. G. Kendall. “Exponentially decreasing distributions for the logarithm of particle size”. *Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences*, volume 353, no. 1674, pp. 401–419, 1977. doi :10.1098/rspa.1977.0041. [32](#), [37](#)
- [BNKS82] O. Barndorff-Nielsen, J. Kent, and M. Sørensen. “Normal variance-mean mixtures and z distributions”. *International Statistical Review / Revue Internationale de Statistique*, volume 50, no. 2, pp. 145–159, 1982. [36](#)
- [Bou19] M. Boudineau. “Vers la résolution "optimale" de problèmes inverses non linéaires parcimonieux grâce à l’exploitation de variables binaires sur dictionnaires continus : applications en astrophysique”. Ph.D. thesis, Université Toulouse 3 Paul Sabatier, 2019. [3](#), [9](#), [14](#), [15](#), [68](#), [73](#), [75](#), [79](#), [113](#)
- [BPC⁺11] S. Boyd, N. Parikh, E. Chu, B. Peleato, and J. Eckstein. “Distributed optimization and statistical learning via the alternating direction method of multipliers”. *Found Trends Mach Learn*, volume 3, no. 1, p. 1–122, 2011. doi :10.1561/2200000016. [6](#)
- [BSCI11] S. Bourguignon, C. Soussen, H. Carfantan, and J. Idier. “Sparse deconvolution : Comparison of statistical and deterministic approaches”. In *2011 IEEE Statistical Signal Processing Workshop (SSP)*, pp. 317–320. 2011. doi :10.1109/SSP.2011.5967691. [6](#), [15](#), [88](#)
- [BT09] A. Beck and M. Teboulle. “A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm for linear inverse problems”. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, volume 2, no. 1, pp. 183–202, 2009. doi :10.1137/080716542. [6](#)
- [CB00] C. Couvreur and Y. Bresler. “On the optimality of the backward greedy algorithm for the subset selection problem”. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, volume 21, no. 3, pp. 797–808, 2000. doi :10.1137/S0895479898332928. [8](#)
- [CBCT15] F. Costa, H. Batatia, L. Chaari, and J.-Y. Tournier. “Sparse EEG source localization using Bernoulli Laplacian priors”. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, volume 62, no. 12, pp. 2888–2898, 2015. doi :10.1109/TBME.2015.2450015. [13](#), [15](#), [81](#), [84](#)
- [CBFAB94] P. Charbonnier, L. Blanc-Feraud, G. Aubert, and M. Barlaud. “Two deterministic half-quadratic regularization algorithms for computed imaging”. In *Proceedings of 1st International Conference on Image Processing*, volume 2, pp. 168–172 vol.2. 1994. doi :10.1109/ICIP.1994.413553. [37](#), [105](#)
- [CBIS13] E. Carcreff, S. Bourguignon, J. Idier, and L. Simon. “Resolution enhancement of ultrasonic signals by up-sampled sparse deconvolution”. In *2013 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*, pp. 6511–6515. 2013. doi :10.1109/ICASSP.2013.6638920. [3](#)

- [CCK18] S. Chaabene, L. Chaari, and A. Kallel. “Sparse Bayesian pMRI reconstruction with complex Bernoulli-Laplace mixture priors”. In *2018 IEEE 4th Middle East Conference on Biomedical Engineering (MECBME)*, pp. 193–197, 2018. doi :10.1109/MECBME.2018.8402432. [13](#), [81](#)
- [CCL96] Q. Cheng, R. Chen, and T.-H. Li. “Simultaneous wavelet estimation and deconvolution of reflection seismic signals”. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, volume 34, no. 2, pp. 377–384, 1996. doi :10.1109/36.485115. [3](#), [4](#), [13](#), [14](#), [15](#), [79](#)
- [CGGK10] G. Casella, M. Ghosh, J. Gill, and M. Kyung. “Penalized regression, standard errors, and Bayesian Lasso”. *Bayesian Analysis*, volume 5, no. 2, pp. 369 – 411, 2010. doi :10.1214/10-BA607. [23](#)
- [CGI96] F. Champagnat, Y. Goussard, and J. Idier. “Unsupervised deconvolution of sparse spike trains using stochastic approximation”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 44, no. 12, pp. 2988–2998, 1996. doi :10.1109/78.553473. [13](#)
- [CI04] F. Champagnat and J. Idier. “A connection between half-quadratic criteria and EM algorithms”. *IEEE Signal Processing Letters*, volume 11, no. 9, pp. 709–712, 2004. doi :10.1109/LSP.2004.833511. [34](#), [35](#), [38](#), [40](#), [107](#), [152](#)
- [CI10] H. Carfantan and J. Idier. “Statistical linear destriping of satellite-based pushbroom-type images”. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, volume 48, no. 4, pp. 1860–1871, 2010. doi :10.1109/TGRS.2009.2033587. [105](#), [106](#)
- [CJPT13] E. Chouzenoux, A. Jezierska, J.-C. Pesquet, and H. Talbot. “A majorize-minimize subspace approach for $\ell_2 - \ell_0$ image regularization”. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, volume 6, no. 1, pp. 563–591, 2013. doi :10.1137/11085997X. [7](#), [106](#)
- [CP08] P. L. Combettes and J.-C. Pesquet. “A proximal decomposition method for solving convex variational inverse problems”. *Inverse Problems*, volume 24, no. 6, p. 065014, 2008. doi :10.1088/0266-5611/24/6/065014. [15](#)
- [CP11] P. L. Combettes and J.-C. Pesquet. *Proximal Splitting Methods in Signal Processing*, pp. 185–212. Springer New York, New York, NY, 2011. doi :10.1007/978-1-4419-9569-8_10. [19](#)
- [CRPW12] V. Chandrasekaran, B. Recht, P. A. Parrilo, and A. S. Willsky. “The convex geometry of linear inverse problems”. *Foundations of Computational Mathematics*, volume 12, no. 6, pp. 805–849, 2012. doi :10.1007/s10208-012-9135-7. [7](#)
- [CRT06] E. Candes, J. Romberg, and T. Tao. “Robust uncertainty principles : exact signal reconstruction from highly incomplete frequency information”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 52, no. 2, pp. 489–509, 2006. doi :10.1109/TIT.2005.862083. [6](#)
- [CTB13] L. Chaari, J.-Y. Tournier, and H. Batatia. “Sparse Bayesian regularization using Bernoulli-Laplacian priors”. In *21st European Signal Processing Conference (EU-SIPCO 2013)*, pp. 1–5, 2013. [13](#), [15](#), [84](#), [85](#)
- [CWB08] E. J. Candes, M. B. Wakin, and S. P. Boyd. “Enhancing sparsity by reweighted ℓ_1 minimization”. *Journal of Fourier analysis and applications*, volume 14, no. 5-6, pp. 877–905, 2008. [7](#)

- [DE12] Q. A. Dang and M. Ehrhardt. “On Dirac delta sequences and their generating functions”. *Applied Mathematics Letters*, volume 25, no. 12, pp. 2385–2390, 2012. doi :<https://doi.org/10.1016/j.aml.2012.07.009>. 23
- [Dev86] L. Devroye. *Non-Uniform Random Variate Generation*. Springer New York, New York, NY, 1986. doi :[10.1007/978-1-4613-8643-8](https://doi.org/10.1007/978-1-4613-8643-8). 49
- [DHT09] N. Dobigeon, A. O. Hero, and J. Tourneret. “Hierarchical Bayesian sparse image reconstruction with application to MRFM”. *IEEE Transactions on Image Processing*, volume 18, no. 9, pp. 2059–2070, 2009. doi :[10.1109/TIP.2009.2024067](https://doi.org/10.1109/TIP.2009.2024067). 3, 4, 13, 114
- [DKN03] R. Deriche, P. Kornprobst, and M. Nikolova. “Half-quadratic regularization for MRI image restoration”. In *2003 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing, 2003. Proceedings. (ICASSP '03).*, volume 6, pp. VI–585. 2003. doi :[10.1109/ICASSP.2003.1201749](https://doi.org/10.1109/ICASSP.2003.1201749). 37
- [DKPR87] S. Duane, A. Kennedy, B. J. Pendleton, and D. Roweth. “Hybrid Monte Carlo”. *Physics Letters B*, volume 195, no. 2, pp. 216–222, 1987. doi :[https://doi.org/10.1016/0370-2693\(87\)91197-X](https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)91197-X). 21
- [DLR77] A. P. Dempster, N. M. Laird, and D. B. Rubin. “Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm”. *Journal of the Royal Statistical Society Series B (Methodological)*, volume 39, no. 1, pp. 1–38, 1977. 29, 34, 103, 108
- [DMP18] A. Durmus, É. Moulines, and M. Pereyra. “Efficient Bayesian computation by proximal Markov Chain Monte Carlo : When Langevin meets Moreau”. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, volume 11, no. 1, pp. 473–506, 2018. doi :[10.1137/16M1108340](https://doi.org/10.1137/16M1108340). 20, 53
- [DP08] D. A. van Dyk and T. Park. “Partially collapsed Gibbs samplers”. *Journal of the American Statistical Association*, volume 103, no. 482, pp. 790–796, 2008. doi :[10.1198/016214508000000409](https://doi.org/10.1198/016214508000000409). 23, 50, 56
- [DT08] D. L. Donoho and Y. Tsaig. “Fast solution of ℓ_1 -norm minimization problems when the solution may be sparse”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 54, no. 11, pp. 4789–4812, 2008. doi :[10.1109/TIT.2008.929958](https://doi.org/10.1109/TIT.2008.929958). 6
- [DT10] N. Dobigeon and J.-Y. Tourneret. “Bayesian orthogonal component analysis for sparse representation”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 58, no. 5, pp. 2675–2685, 2010. doi :[10.1109/TSP.2010.2041594](https://doi.org/10.1109/TSP.2010.2041594). 24
- [DW10] M. A. Davenport and M. B. Wakin. “Analysis of orthogonal matching pursuit using the restricted isometry property”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 56, no. 9, pp. 4395–4401, 2010. doi :[10.1109/TIT.2010.2054653](https://doi.org/10.1109/TIT.2010.2054653). 6
- [EH04] E. Eberlein and E. A. v. Hammerstein. “Generalized hyperbolic and inverse Gaussian distributions : Limiting cases and approximation of processes”. In R. C. Dalang, M. Dozzi, and F. Russo, editors, *Seminar on Stochastic Analysis, Random Fields and Applications IV*, pp. 221–264. Birkhäuser Basel, Basel, 2004. 37
- [EHJT04] B. Efron, T. Hastie, I. Johnstone, and R. Tibshirani. “Least angle regression”. *The Annals of Statistics*, volume 32, no. 2, pp. 407 – 499, 2004. doi :[10.1214/009053604000000067](https://doi.org/10.1214/009053604000000067). 6

- [EK95] E. Eberlein and U. Keller. “Hyperbolic distributions in finance”. *Bernoulli*, volume 1, no. 3, pp. 281–299, 1995. [32](#), [33](#), [36](#)
- [Fan91] J. Fan. “On the optimal rates of convergence for nonparametric deconvolution problems”. *The Annals of Statistics*, volume 19, no. 3, pp. 1257 – 1272, 1991. doi :10.1214/aos/1176348248. [34](#)
- [FF93] I. E. Frank and J. H. Friedman. “A statistical view of some chemometrics regression tools”. *Technometrics*, volume 35, no. 2, pp. 109–135, 1993. [7](#)
- [FG06] C. Févotte and S. J. Godsill. “A Bayesian approach for blind separation of sparse sources”. *IEEE Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, volume 14, no. 6, pp. 2174–2188, 2006. [33](#)
- [FHT07] J. Friedman, T. Hastie, and R. Tibshirani. “Sparse inverse covariance estimation with the graphical Lasso”. *Biostatistics*, volume 9, no. 3, pp. 432–441, 2007. doi : 10.1093/biostatistics/kxm045. [6](#)
- [FL01] J. Fan and R. Li. “Variable selection via nonconcave penalized likelihood and its oracle properties”. *Journal of the American Statistical Association*, volume 96, no. 456, pp. 1348–1360, 2001. doi :10.1198/016214501753382273. [7](#)
- [Fuc05] J. Fuchs. “Recovery of exact sparse representations in the presence of bounded noise”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 51, no. 10, pp. 3601–3608, 2005. doi :10.1109/TIT.2005.855614. [6](#)
- [GC11] M. Girolami and B. Calderhead. “Riemann manifold Langevin and Hamiltonian Monte Carlo methods”. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology)*, volume 73, no. 2, pp. 123–214, 2011. doi : https://doi.org/10.1111/j.1467-9868.2010.00765.x. [21](#)
- [GCS⁺13] A. Gelman, J. B. Carlin, H. S. Stern, D. B. Dunson, A. Vehtari, and D. B. Rubin. *Bayesian Data Analysis*. Chapman and Hall/CRC, 2013. doi :10.1201/b16018. [53](#)
- [GFA03] S. Gulam Razul, W. Fitzgerald, and C. Andrieu. “Bayesian model selection and parameter estimation of nuclear emission spectra using RJMCMC”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, volume 497, no. 2, pp. 492–510, 2003. doi :https://doi.org/10.1016/S0168-9002(02)01807-7. [4](#)
- [GG84] S. Geman and D. Geman. “Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images”. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, volume PAMI-6, no. 6, pp. 721–741, 1984. doi : 10.1109/TPAMI.1984.4767596. [15](#), [17](#)
- [GIL11] D. Ge, J. Idier, and E. Le Carpentier. “Enhanced sampling schemes for MCMC based blind Bernoulli–Gaussian deconvolution”. *Signal Processing*, volume 91, no. 4, pp. 759–772, 2011. doi :https://doi.org/10.1016/j.sigpro.2010.08.009. [13](#), [24](#), [25](#), [26](#), [27](#), [29](#), [63](#), [73](#), [85](#), [87](#), [88](#), [91](#), [112](#)
- [GMI15] C. Gilavert, S. Moussaoui, and J. Idier. “Efficient Gaussian sampling for solving large-scale inverse problems using MCMC”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 63, no. 1, pp. 70–80, 2015. doi :10.1109/TSP.2014.2367457. [60](#)

- [GR92] D. Geman and G. Reynolds. “Constrained restoration and the recovery of discontinuities”. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, volume 14, no. 3, pp. 367–383, 1992. doi :10.1109/34.120331. [19](#), [37](#), [38](#), [103](#), [104](#), [110](#)
- [Gre95] P. J. Green. “Reversible jump Markov chain Monte Carlo computation and Bayesian model determination”. *Biometrika*, volume 82, no. 4, pp. 711–732, 1995. doi :10.1093/biomet/82.4.711. [70](#), [71](#)
- [Gri11] R. Gribonval. “Should penalized least squares regression be interpreted as maximum a posteriori estimation?” *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 59, no. 5, pp. 2405–2410, 2011. doi :10.1109/TSP.2011.2107908. [11](#)
- [GY95] D. Geman and C. Yang. “Nonlinear image recovery with half-quadratic regularization”. *IEEE Transactions on Image Processing*, volume 4, no. 7, pp. 932–946, 1995. doi :10.1109/83.392335. [37](#), [38](#), [40](#), [103](#), [104](#)
- [Han92] P. C. Hansen. “Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve”. *SIAM Review*, volume 34, no. 4, pp. 561–580, 1992. [99](#)
- [Has70] W. K. Hastings. “Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications”. *Biometrika*, volume 57, no. 1, pp. 97–109, 1970. doi :10.1093/biomet/57.1.97. [15](#), [17](#)
- [HD10] C. Herzet and A. Drémeau. “Bayesian pursuit algorithms”. In *2010 18th European Signal Processing Conference*, pp. 1474–1478. 2010. [8](#)
- [Hen86] N. Henze. “A probabilistic representation of the ‘skew-normal’ distribution”. *Scandinavian Journal of Statistics*, volume 13, no. 4, pp. 271–275, 1986. [33](#)
- [HSIG13] C. Herzet, C. Soussen, J. Idier, and R. Gribonval. “Exact recovery conditions for sparse representations with partial support information”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 59, no. 11, pp. 7509–7524, 2013. doi :10.1109/TIT.2013.2278179. [6](#)
- [Idi01] J. Idier. “Convex half-quadratic criteria and interacting auxiliary variables for image restoration”. *IEEE Transactions on Image Processing*, volume 10, no. 7, pp. 1001–1009, 2001. doi :10.1109/83.931094. [38](#), [104](#), [107](#)
- [JTD11] P. Jain, A. Tewari, and I. S. Dhillon. “Orthogonal matching pursuit with replacement”. In *Proceedings of the 24th International Conference on Neural Information Processing Systems, NIPS’11*, p. 1215–1223. Curran Associates Inc., Red Hook, NY, USA, 2011. [8](#)
- [Jø82] B. Jørgensen. *Statistical properties of the generalized inverse Gaussian distribution*. Springer New York, 1982. doi :10.1007/978-1-4612-5698-4. [37](#)
- [KKM⁺11] Y. Kalambet, Y. Kozmin, K. Mikhailova, I. Nagaev, and P. Tikhonov. “Reconstruction of chromatographic peaks using the exponentially modified Gaussian function”. *Journal of Chemometrics*, volume 25, no. 7, pp. 352–356, 2011. doi :https://doi.org/10.1002/cem.1343. [33](#)
- [KKP12] S. Kotz, T. Kozubowski, and K. Podgorski. *The Laplace Distribution and Generalizations : a Gevisit with Applications to Communications, Economics, Engineering, and Finance*. Springer Science & Business Media, 2012. [48](#)

- [KM82] J. Kormylo and J. Mendel. “Maximum likelihood detection and estimation of Bernoulli-Gaussian processes”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 28, no. 3, pp. 482–488, 1982. doi :10.1109/TIT.1982.1056496. 13
- [KS09] D. Karlis and A. Santourian. “Model-based clustering with non-elliptically contoured distributions”. *Statistics and Computing*, volume 19, no. 1, pp. 73–83, 2009. doi :https://doi.org/10.1007/s11222-008-9072-0. 36
- [KTHD12] G. Kail, J. Tourneret, F. Hlawatsch, and N. Dobigeon. “Blind deconvolution of sparse pulse sequences under a minimum distance constraint : A partially collapsed Gibbs sampler method”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 60, no. 6, pp. 2727–2743, 2012. doi :10.1109/TSP.2012.2190066. 26
- [Liu04] J. S. Liu. *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing*. Springer New York, 2004. doi :10.1007/978-0-387-76371-2. 53
- [LM21] S. X. Lee and G. J. McLachlan. “On mean and/or variance mixtures of normal distributions”. In S. Balzano, G. C. Porzio, R. Salvatore, D. Vistocco, and M. Vichi, editors, *Statistical Learning and Modeling in Data Analysis*, pp. 117–127. Springer International Publishing, Cham, 2021. 33
- [LS93] K. Lange and J. S. Sinsheimer. “Normal/independent distributions and their applications in robust regression”. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, volume 2, no. 2, pp. 175–198, 1993. 34
- [Maz05] V. Mazet. “Développement de méthodes de traitement de signaux spectroscopiques : estimation de la ligne de base et du spectre de raies”. Ph.D. thesis, 2005. Thèse de doctorat dirigée par Brie, David Automatique, traitement du signal et génie informatique Nancy 1 2005. 93
- [MBM⁺20] R. B. Mhenni, S. Bourguignon, M. Mongeau, J. Ninin, and H. Carfantan. “Sparse branch and bound for exact optimization of l0-norm penalized least squares”. In *ICASSP 2020 - 2020 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, pp. 5735–5739. 2020. doi :10.1109/ICASSP40776.2020.9053870. 9
- [MCB⁺05] V. Mazet, C. Carteret, D. Brie, J. Idier, and B. Humbert. “Background removal from spectra by designing and minimising a non-quadratic cost function”. *Chemo-metrics and Intelligent Laboratory Systems*, volume 76, no. 2, pp. 121–133, 2005. doi :https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2004.10.003. 103, 104, 105, 106, 110, 156
- [MCBBP18] Y. Marnissi, E. Chouzenoux, A. Benazza-Benyahia, and J.-C. Pesquet. “An auxiliary variable method for Markov Chain Monte Carlo algorithms in high dimension”. *Entropy*, volume 20, no. 2, 2018. doi :10.3390/e20020110. 21, 40
- [MCBBP20] Y. Marnissi, E. Chouzenoux, A. Benazza-Benyahia, and J.-C. Pesquet. “Majorize–minimize adapted Metropolis–Hastings algorithm”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 68, pp. 2356–2369, 2020. doi :10.1109/TSP.2020.2983150. 19
- [MCPBB16] Y. Marnissi, E. Chouzenoux, J.-C. Pesquet, and A. Benazza-Benyahia. “An auxiliary variable method for Langevin based MCMC algorithms”. In *2016 IEEE Statistical Signal Processing Workshop (SSP)*, pp. 1–5. 2016. doi :10.1109/SSP.2016.7551764. 22

- [MD12] A. Mohammad-Djafari. “Bayesian approach with prior models which enforce sparsity in signal and image processing”. *EURASIP Journal on Advances in Signal Processing*, volume 2012, no. 1, pp. 1–19, 2012. [10](#)
- [MIB05] V. Mazet, J. Idier, and D. Brie. “Déconvolution impulsionnelle positive myope”. In *20e colloque GRETSI*, volume 2, pp. 1081–1084. Louvain-la-Neuve, Belgique, 2005. [3](#), [4](#), [13](#), [14](#), [79](#), [81](#), [93](#), [95](#)
- [MU49] N. Metropolis and S. Ulam. “The Monte Carlo method”. *Journal of the American Statistical Association*, volume 44, no. 247, pp. 335–341, 1949. doi : 10.1080/01621459.1949.10483310. PMID : 18139350. [15](#), [17](#)
- [MZ93] S. Mallat and Z. Zhang. “Matching pursuits with time-frequency dictionaries”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 41, no. 12, pp. 3397–3415, 1993. doi :10.1109/78.258082. [8](#)
- [Nat95] B. K. Natarajan. “Sparse approximate solutions to linear systems”. *SIAM Journal on Computing*, volume 24, no. 2, pp. 227–234, 1995. doi :10.1137/S0097539792240406. [5](#)
- [NISD19] T. T. Nguyen, J. Idier, C. Soussen, and E.-H. Djermoune. “Non-negative orthogonal greedy algorithms”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 67, no. 21, pp. 5643–5658, 2019. [6](#)
- [NN05] M. Nikolova and M. K. Ng. “Analysis of half-quadratic minimization methods for signal and image recovery”. *SIAM Journal on Scientific Computing*, volume 27, no. 3, pp. 937–966, 2005. doi :10.1137/030600862. [39](#)
- [OPT00] M. Osborne, B. Presnell, and B. Turlach. “A new approach to variable selection in least squares problems”. *IMA Journal of Numerical Analysis*, volume 20, no. 3, pp. 389–403, 2000. doi :10.1093/imanum/20.3.389. [6](#)
- [PC08] T. Park and G. Casella. “The Bayesian Lasso”. *Journal of the American Statistical Association*, volume 103, no. 482, pp. 681–686, 2008. doi :10.1198/016214508000000337. [11](#), [20](#), [22](#), [55](#)
- [Per16] M. Pereyra. “Proximal Markov Chain Monte Carlo algorithms”. *Statistics and Computing*, volume 26, no. 4, pp. 745–760, 2016. [19](#), [47](#)
- [PKDRW06] J. Palmer, K. Kreutz-Delgado, B. Rao, and D. Wipf. “Variational EM algorithms for non-Gaussian latent variable models”. In Y. Weiss, B. Schölkopf, and J. Platt, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 18. MIT Press, 2006. [35](#)
- [PKDWR05] J. Palmer, K. Kreutz-Delgado, D. Wipf, and B. Rao. “Variational representations of non-Gaussian priors”. *UCSD, San Diego*, 2005. [35](#)
- [PRK93] Y. C. Pati, R. Rezaifar, and P. S. Krishnaprasad. “Orthogonal matching pursuit : recursive function approximation with applications to wavelet decomposition”. In *Proceedings of 27th Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers*, pp. 40–44 vol.1. 1993. doi :10.1109/ACSSC.1993.342465. [8](#)

- [Pro04] R. Protasov. “EM-based maximum likelihood parameter estimation for multivariate generalized hyperbolic distributions with fixed lambda”. *Statistics and Computing*, volume 14, pp. 67–77, 2004. doi :10.1023/B:STCO.0000009419.12588.da. [33](#), [36](#)
- [PSC⁺16] M. Pereyra, P. Schniter, É. Chouzenoux, J.-C. Pesquet, J.-Y. Tourneret, A. O. Hero, and S. McLaughlin. “A survey of stochastic simulation and optimization methods in signal processing”. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, volume 10, no. 2, pp. 224–241, 2016. doi :10.1109/JSTSP.2015.2496908. [15](#)
- [RBNC04] O. Rosec, J.-M. Boucher, B. Nsiri, and T. Chonavel. “Blind marine seismic deconvolution using statistical MCMC methods”. *IEEE Journal of Oceanic Engineering*, volume 28, no. 3, pp. 502–512, 2004. doi :10.1109/JOE.2003.816683. [14](#), [83](#)
- [RJLW20] L. J. Rendell, A. M. Johansen, A. Lee, and N. Whiteley. “Global consensus Monte Carlo”. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, volume 0, no. 0, pp. 1–11, 2020. doi :10.1080/10618600.2020.1811105. [23](#)
- [RR01] G. O. Roberts and J. S. Rosenthal. “Optimal scaling for various Metropolis-Hastings algorithms”. *Statistical Science*, volume 16, no. 4, pp. 351–367, 2001. [71](#)
- [RS97] G. O. Roberts and S. K. Sahu. “Updating schemes, correlation structure, blocking and parameterization for the Gibbs sampler”. *Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology)*, volume 59, no. 2, pp. 291–317, 1997. doi :https://doi.org/10.1111/1467-9868.00070. [15](#)
- [RS02] G. O. Roberts and O. Stramer. “Langevin diffusions and Metropolis-Hastings algorithms”. *Methodology and computing in applied probability*, volume 4, no. 4, pp. 337–357, 2002. [18](#)
- [RT96] G. O. Roberts and R. L. Tweedie. “Exponential convergence of Langevin distributions and their discrete approximations”. *Bernoulli*, volume 2, no. 4, pp. 341 – 363, 1996. doi :bj/1178291835. [18](#)
- [SBFA15] E. Soubies, L. Blanc-Féraud, and G. Aubert. “A continuous exact ℓ_0 penalty (cel0) for least squares regularized problem”. *SIAM Journal on Imaging Sciences*, volume 8, no. 3, pp. 1607–1639, 2015. doi :10.1137/151003714. [7](#)
- [SBFA17] E. Soubies, L. Blanc-Féraud, and G. Aubert. “A unified view of exact continuous penalties for $\ell_2 - \ell_0$ minimization”. *SIAM Journal on Optimization*, volume 27, no. 3, pp. 2034–2060, 2017. doi :10.1137/16M1059333. [7](#)
- [SI06] H. Snoussi and J. Idier. “Bayesian blind separation of generalized hyperbolic processes in noisy and underdeterminate mixtures”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 54, no. 9, pp. 3257–3269, 2006. doi :10.1109/TSP.2006.877660. [32](#), [33](#)
- [SIBD11] C. Soussen, J. Idier, D. Brie, and J. Duan. “From Bernoulli-Gaussian deconvolution to sparse signal restoration”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 59, no. 10, pp. 4572–4584, 2011. doi :10.1109/TSP.2011.2160633. [8](#), [11](#), [13](#)

- [SRS09] J. D. Silver, M. E. Ritchie, and G. K. Smyth. “Microarray background correction : maximum likelihood estimation for the normal–exponential convolution”. *Biostatistics*, volume 10, no. 2, pp. 352–363, 2009. [33](#)
- [Tib96] R. Tibshirani. “Regression shrinkage and selection via the Lasso”. *Journal of the Royal Statistical Society Series B (Methodological)*, volume 58, no. 1, pp. 267–288, 1996. [6](#), [11](#)
- [Tin10] K. M. Ting. “Precision and recall”. In C. Sammut and G. I. Webb, editors, *Encyclopedia of Machine Learning*, pp. 781–781. Springer US, Boston, MA, 2010. doi :10.1007/978-0-387-30164-8_652. [84](#)
- [Tro04] J. Tropp. “Greed is good : algorithmic results for sparse approximation”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 50, no. 10, pp. 2231–2242, 2004. doi :10.1109/TIT.2004.834793. [6](#), [7](#)
- [Tro06] J. Tropp. “Just relax : convex programming methods for identifying sparse signals in noise”. *IEEE Transactions on Information Theory*, volume 52, no. 3, pp. 1030–1051, 2006. doi :10.1109/TIT.2005.864420. [6](#)
- [TW10] J. A. Tropp and S. J. Wright. “Computational methods for sparse solution of linear inverse problems”. *Proceedings of the IEEE*, volume 98, no. 6, pp. 948–958, 2010. doi :10.1109/JPROC.2010.2044010. [6](#)
- [VDC19] M. Vono, N. Dobigeon, and P. Chainais. “Split-and-augmented Gibbs sampler—application to large-scale inference problems”. *IEEE Transactions on Signal Processing*, volume 67, no. 6, pp. 1648–1661, 2019. doi :10.1109/TSP.2019.2894825. [39](#), [40](#)
- [VDC20] M. Vono, N. Dobigeon, and P. Chainais. “Asymptotically exact data augmentation : Models, properties, and algorithms”. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, pp. 1–14, 2020. doi :10.1080/10618600.2020.1826954. [20](#), [23](#), [39](#), [43](#)
- [WF15] D. Wraith and F. Forbes. “Location and scale mixtures of Gaussians with flexible tail behaviour : Properties, inference and application to multivariate clustering”. *Computational Statistics & Data Analysis*, volume 90, pp. 61–73, 2015. doi : <https://doi.org/10.1016/j.csda.2015.04.008>. [32](#), [33](#), [36](#)
- [WS01] R. Waagepetersen and D. Sorensen. “A tutorial on reversible jump MCMC with a view toward applications in QTL-mapping”. *International Statistical Review*, volume 69, no. 1, pp. 49–61, 2001. doi :10.1111/j.1751-5823.2001.tb00479.x. [71](#)
- [Yu17] Y. Yu. “On normal variance–mean mixtures”. *Statistics & Probability Letters*, volume 121, pp. 45–50, 2017. doi :<https://doi.org/10.1016/j.spl.2016.07.024>. [36](#)

*The time is gone, the song is over,
thought I'd something more to say...*
—*Pink Floyd*

Résumé

Cette thèse aborde la résolution des problèmes inverses parcimonieux quand les données observées peuvent être considérées comme une combinaison linéaire d'un faible nombre d'éléments dits « atomes » (*e.g.*, impulsions, réponse instrumentale décalée ou sinusoïdes). Ces problèmes sont rencontrés dans différents domaines d'application, allant du contrôle non destructif ultrasonore, à la spectroscopie et l'analyse spectrale. Dans le contexte bayésien, ces problèmes peuvent être abordés en considérant des modèles *a priori* sur les paramètres d'intérêts, prenant en compte la parcimonie de façon explicite via l'introduction de variables binaires (*e.g.*, modèle Bernoulli-Gaussien). L'estimation des paramètres se fait ensuite en calculant un estimateur de type espérance a posteriori à partir d'échantillons générés par des méthodes Monte-Carlo par chaînes de Markov (MCMC). L'avantage majeur des méthodes MCMC dans le contexte bayésien, par rapport aux approches d'optimisation déterministes, est la possibilité d'intégrer sans grande difficulté l'estimation des hyper-paramètres du modèle (*e.g.*, la variance du bruit d'observation) ainsi que de se placer dans un cadre semi-aveugle ou aveugle, c'est-à-dire des cas où les atomes sont partiellement ou totalement inconnus. Cependant, ces méthodes MCMC sont généralement très coûteuses en temps de calcul et nécessitent d'être manipulées avec soin afin de garantir leur convergence. Des approches d'échantillonnage efficace s'appuyant sur le *Partially Collapsed Gibbs Sampler* (PCGS) ont été développées dans le cas du modèle Bernoulli-Gaussien. Cependant, elles ne peuvent pas être utilisées dès que l'on souhaite considérer d'autres *a priori* parcimonieux, avec des lois à longues queues (*e.g.*, Bernoulli-Laplace) qui sont préférables à la Gaussienne car elles induisent une moindre régularisation ; ou avec des lois à support réduit (*e.g.*, Bernoulli-Exponentiel) afin de garantir une contrainte de non-négativité. On est alors restreint à l'utilisation des méthodes MCMC classiques coûteuses en temps de calcul. L'objectif de cette thèse est de réconcilier l'échantillonnage PCGS avec des modèles prenant en compte la parcimonie de façon explicite autres que le modèle Bernoulli-Gaussien. La principale contribution est l'introduction et l'étude d'un nouveau modèle *a priori* dit « Bernoulli Mélange de Gaussiennes » (BMG). Ce dernier repose sur les lois de mélange continu de Gaussiennes et permet l'amélioration des propriétés de convergence des méthodes MCMC grâce à une implémentation numérique efficace d'algorithmes PCGS. D'autre part, le modèle est présenté dans un cadre général, permettant de prendre en compte, de manière systématique, de nombreuses lois de probabilité. Pour ces travaux, nous avons exploité des lois de probabilité de la famille LSMG (*Location and Scale Mixture of Gaussians*), peu étudiée dans la littérature, que nous avons caractérisées plus précisément. Une deuxième contribution majeure consiste à étendre le champ d'application du modèle BMG aux lois de probabilité à support réduit. Ainsi, nous avons proposé une nouvelle approche d'approximation de lois de probabilité dénommée « *asymptotically Exact Location-Scale Approximations* » (ELSA) pour laquelle nous avons montré le bon comportement, à la fois en théorie et en pratique et avons montré empiriquement son efficacité par rapport aux approches de l'état de l'art. Enfin, l'efficacité du nouveau modèle BMG, de son échantillonneur PCGS et des approximations ELSA est étudiée et validée dans le cadre des problèmes inverses parcimonieux sur un exemple de déconvolution de train d'impulsions.

Mots clés : Problèmes inverses, Parcimonie, Échantillonnage stochastique, Mélanges continus de Gaussiennes, Inférence bayésienne

Abstract

This thesis deals with sparse inverse problems when the observed data can be considered as a linear combination of a small number of elements called « atoms » (*e.g.*, pulses, shifted instrumental response or sinusoids). These problems are encountered in various domains, ranging from ultrasonic non-destructive testing to spectroscopy and spectral analysis. In the Bayesian framework, these problems can be addressed by considering *a priori* models on the parameters of interest that take into account the sparsity explicitly via the introduction of binary variables (*e.g.*, Bernoulli-Gaussian model). The estimation of the parameters is done by computing the posterior mean estimator from samples generated by Markov chain Monte Carlo (MCMC) methods. The major advantage of MCMC methods in the Bayesian framework, compared to deterministic optimization approaches, is the possibility of integrating without much difficulty the estimation of the hyper-parameters of the model (*e.g.*, the variance of the observation noise) as well as considering semi-blind or blind settings, i.e., cases where the atoms are partially or totally unknown. However, MCMC methods are generally computationally expensive and need to be handled carefully to ensure their convergence. An efficient sampling approaches based on the Partially Collapsed Gibbs Sampler (PCGS) have been developed for the Bernoulli-Gaussian model. However, it cannot be used with other sparse enforcing priors, such as priors with long-tailed distributions (*e.g.*, Bernoulli-Laplace) which are preferable to the Gaussian because they induce less regularization ; or with distributions supported in a bounded interval (*e.g.*, Bernoulli-Exponential) in order to guarantee a non-negativity constraint. As a result one is restricted to the computationally expensive classical MCMC methods. The objective of this thesis is to reconcile PCGS sampling with models that explicitly take into account sparsity other than the Bernoulli-Gaussian model. The main contribution is the introduction and study of a new prior model called « Bernoulli Mixture of Gaussians » (BMG). The latter, based on continuous Gaussian mixtures improves the convergence properties of MCMC methods thanks to an efficient numerical implementation of PCGS algorithms. On the other hand, the model is presented in a general framework, allowing to take into account, in a systematic way, a rich family of probability distributions. More precisely, the BMG relies on the LSMG (*Location and Scale Mixture of Gaussians*) family, which we have studied and characterized. The second major contribution consists in extending the field of application of the BMG model to probability distributions supported on a bounded interval. Thus, we have proposed a new approach to approximate probability distributions called « *asymptotically Exact Location-Scale Approximations* » (ELSA) for which we have shown good behavior, both in theory and in practice and empirically validate its efficiency compared to state-of-the-art approaches. Finally, the efficiency of the BMG model, its PCGS sampler and ELSA approximations is studied and validated in the context of sparse inverse problems on an example of spike train deconvolution.

Keywords : Inverse problems, Sparsity, Stochastic sampling, Continuous Gaussian mixtures, Bayesian inference

