



HAL
open science

Analyse massive d'images multi-angulaires hyperspectrales de la planète Mars par régression inverse de modèles physiques

Benoit Kugler

► **To cite this version:**

Benoit Kugler. Analyse massive d'images multi-angulaires hyperspectrales de la planète Mars par régression inverse de modèles physiques. Traitement des images [eess.IV]. Université Grenoble Alpes [2020-..], 2021. Français. NNT : 2021GRALM021 . tel-03417184

HAL Id: tel-03417184

<https://theses.hal.science/tel-03417184>

Submitted on 5 Nov 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L' UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Mathématiques Appliquées**

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Benoit KUGLER

Thèse dirigée par **Florence FORBES**, Directrice de recherche, Université Grenoble Alpes et
co-dirigée par **Sylvain DOUTÉ**, Directeur de recherche, Université Grenoble Alpes

préparée au sein du **Laboratoire Jean Kuntzmann**
dans l'**École Doctorale Mathématiques, Sciences et Technologies de l'Information, Informatique**

Analyse massive d'images multi-angulaires hyperspectrales de la planète Mars par régression inverse de modèles physiques

Massive hyperspectral images analysis by inverse regression of physical models

Thèse soutenue publiquement le **7 juillet 2021**,
devant le jury composé de :

Mme Clémentine PRIEUR

Professeure des universités, Université Grenoble Alpes, Présidente

Mr Saïd MOUSSAOUI

Professeur, Ecole Centrale Nantes, Examineur

Mr Cédric PILORGET

Maitre de conférence, Université Paris-Saclay, Examineur

Mr Nicolas DOBIGEON

Professeur, INP - ENSEEIGHT Toulouse, Rapporteur

Mr Frédéric SCHMIDT

Professeur des universités, Université Paris-Saclay, Rapporteur

Mme Florence FORBES

Directrice de recherche, INRIA - Université Grenoble Alpes, Directrice de thèse

Mr Sylvain DOUTÉ

Directeur de recherche, CNRS - Université Grenoble Alpes, Co-Directeur de thèse



Remerciements

Si je peux considérer ces trois années de thèse comme une expérience globalement agréable, c'est avant tout parce que j'ai eu le privilège d'être bien encadré : merci Florence et Sylvain pour votre intérêt, votre douceur, mais aussi pour votre motivation et votre rigueur scientifique. Je vous suis reconnaissant d'avoir pu découvrir l'univers de la recherche scientifique!

J'aimerais aussi remercier particulièrement l'équipe Statify : les anciens (comme Alexis, Thibault, Brice, Clément, Marta, Fei) qui ont contribué à une atmosphère chaleureuse et les nouveaux, avec qui j'ai partagé les joies et les soucis du doctorant. Merci à Meryem, Mascha, Antoine, Dasha, Sami pour les randos, les repas, les discussions et les cruciales heures de formations! Mention spécial pour Alexandre, avec qui j'ai partagé mon bureau, et qui a été un soutien sans faille, que ce soit pour partager nos soucis administratifs ou pour discuter de nos problématiques scientifiques!

Je remercie aussi l'équipe enseignante de la Prépa INP, avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer. Merci pour votre respect et vos conseils!

Résumé

L'objectif de la thèse est de mettre au point une technique d'apprentissage statistique adaptée à l'inversion de modèles physiques complexes. Les deux principales difficultés adressées sont d'une part la quantité massive d'observations à analyser et d'autre part la nécessité de quantifier l'incertitude sur l'inversion, qui peut provenir du modèle physique ou des mesures. Dans un cadre d'inversion Bayésienne, nous proposons donc une approche en deux temps : une phase d'apprentissage d'un modèle statistique paramétrique (GLLiM), commune à toutes les observations, puis une phase de prédiction, répétée pour chaque mesure, mais suffisamment rapide pour prendre en charge un large jeu de données. Nous montrons que la loi a-posteriori, qui prend la forme d'un mélange gaussien, peut être exploitée pour détecter et estimer d'éventuelles solutions multiples. De plus, nous explorons des techniques d'échantillonnages pour chercher le meilleur compromis entre temps de calcul et précision de l'inversion.

Bien que générale, l'approche proposée est appliquée principalement sur un problème inverse complexe en télédétection planétaire. Il s'agit d'utiliser un modèle photométrique semi-empirique (le modèle de Hapke) pour analyser des mesures spectrales de réflectance bidirectionnelle et retrouver indirectement la caractérisation texturale du matériau examiné. Plusieurs jeux de données sont étudiés, provenant aussi bien de mesures de laboratoire que d'une grande collection d'images satellitaires hyperspectrales multi-angulaires.

Enfin, nous exploitons la polyvalence du modèle GLLiM pour explorer plusieurs problématiques liées à l'inversion Bayésienne. En particulier, nous proposons un indicateur pour évaluer l'influence du choix du modèle direct sur la qualité de l'inversion. Nous utilisons aussi le modèle GLLiM pour prendre en compte une information a-priori, le rendant adapté à la résolution de problèmes d'assimilation de données.

Abstract

The objective of the thesis is to develop a statistical learning technique suitable for the inversion of complex physical models. The two main difficulties addressed are on the one hand the massive amount of observations to be analyzed and on the other hand the need to quantify the uncertainty on the inversion, which can come from the physical model or from the measurements. In a Bayesian inversion framework, we therefore propose a two-step approach : a learning step of a parametric statistical model (GLLiM), common to all the observations, then a prediction step, repeated for each measurement, but fast enough to support a large dataset. We show that the posterior distribution, which takes the form of a Gaussian mixture, can be exploited to detect and estimate possible multiple solutions. In addition, we explore sampling techniques to seek the best the trade-off between computation time and inversion precision.

Although general, the proposed approach is applied mainly to a complex inverse problem in planetary remote sensing. This involves using a semi-empirical photometric model (Hapke's model) to analyze spectral bidirectional reflectance measurements and indirectly find the textural characterization of the material examined. Several datasets are studied, both from laboratory measurements and a large collection of multi-angular hyperspectral satellite images.

Finally, we exploit the versatility of the GLLiM model to explore several issues related to Bayesian inversion. In particular, we propose an indicator to assess the influence of the choice of the direct model on the quality of the inversion. We also use the GLLiM model to take into account a priori information, making it suitable for solving data assimilation problems.

Table des matières

Introduction	7
1 Inversion bayésienne efficace par régression et échantillonnage préférentiel	12
1.1 Régression inverse avec le modèle GLLiM	15
1.1.1 Définition et interprétation du modèle GLLiM	15
1.1.2 Inférence des paramètres du modèle GLLiM	18
1.1.3 Choix de l'hyper-paramètre K	24
1.1.4 Influence du niveau de bruit sur les observations	27
1.1.5 Conclusion	29
1.2 Prise en compte de solutions multiples	30
1.2.1 Prédiction par les centroïdes	30
1.2.2 Fusion d'une loi de mélange gaussien	31
1.2.3 Permutation des solutions multiples	33
1.2.4 Détection de solutions multiples	34
1.2.5 Conclusion	37
1.3 Raffinement des prédictions par échantillonnage d'importance	39
1.3.1 Échantillonnage préférentiel normalisé (IS)	39
1.3.2 Échantillonnage préférentiel autour des centroïdes	42
1.3.3 Échantillonnage préférentiel incrémental (IMIS)	43
1.3.4 Comparaison des méthodes GLLiM, IS et IMIS	45
1.3.5 Conclusion	49
1.4 Conclusion	50
2 Application à l'analyse de données de planétologie : mesures de laboratoire et images hyperspectrales de télédétection	52
2.1 Présentation du modèle de Hapke	54
2.1.1 Géométries de mesure	54
2.1.2 Espace des paramètres physiques	55
2.1.3 Relation dite du <i>hockey-stick</i>	56
2.1.4 Incertitude sur les mesures	56
2.1.5 Choix d'implémentation	56
2.1.6 Conclusion	58
2.2 Comparaison avec les méthodes de référence MCMC	59
2.2.1 Inversion du modèle de Hapke à quatre paramètres	59
2.2.2 Inversion du modèle de Hapke à six paramètres	63
2.2.3 Conclusion	63
2.3 Analyse spectro-photométrique de mesures de réflectance	65
2.3.1 Mesures de laboratoire	65
2.3.2 Images hyper-spectrales satellitaires	82
2.4 Conclusion	86

3	Utilisation du modèle GLLiM dans un contexte statistique étendu	87
3.1	Evaluation d'une erreur systématique sur le modèle physique	89
3.1.1	Formalisme statistique	89
3.1.2	Estimation du bruit par un algorithme EM	89
3.1.3	Généralisation à un biais affine	91
3.1.4	Analyse du modèle de Hapke	93
3.1.5	Conclusion	95
3.2	Sélection des géométries de mesures	99
3.2.1	Calcul des indices de détermination	100
3.2.2	Application au modèle de Hapke	102
3.2.3	Conclusion	103
3.3	Utilisation du modèle GLLiM avec un prior gaussien	105
3.3.1	Modèle GLLiM avec prior gaussien	105
3.3.2	Généralisation du prior à un mélange gaussien	108
3.3.3	Illustration sur un modèle de manteau neigeux	109
3.3.4	Conclusion	110
3.4	Conclusion	112
	Conclusion et perspectives	113
	A Liste des publications	116
	B Compléments mathématiques	117
B.1	Formule de Woodbury	117
B.2	Produit de densités gaussiennes	117
	C Géométries de mesure de réflectance	118
	D Résultats complémentaires de l'inversion de mesures de laboratoire	121
D.1	Échantillons minéraux	121
D.2	Météorites	124
D.3	Matériaux analogues à une surface planétaire	128
	E Résultats complémentaires de l'assimilation de profils du manteau neigeux	130
	F Un résultat de convergence pour le modèle GLLiM	131
	G Autour de l'implémentation logicielle	140
G.1	Un aperçu des langages de calcul scientifique	140
G.2	Encadrement d'un stage pour passer à l'échelle	141
G.3	Zoom sur un choix d'implémentation : diversité des fonctionnelles	141

Liste des exemples de l'implémentation en Julia

1	Exemple de code	11
2	Inversion du modèle GLLiM	19
3	Critère d'arrêt de l'algorithme EM pour GLLiM	21
4	Algorithme EM pour GLLiM	23
5	Fusion d'un mélange gaussien	33
6	Permutation des centroïdes	34
7	Indicateur de non uniformité de la loi a-posteriori	35
8	Indicateur de dispersion des solutions	37
9	Importance Sampling (IS)	41
10	Ajout d'un bruit sur la loi de proposition	41
11	Incremental Mixture Importance Sampling (IMIS)	46
12	Sélection semi-automatique des paramètres IMIS	46
13	Modèle de Hapke	58
14	Estimation du bruit du modèle par EM	92
15	Indices de détermination	100
16	Loi conditionnelle avec prior	109
17	Interface Models.Model	142

Introduction

L'atterrissage sur Mars du rover Perseverance au début de l'année 2021 marque le début d'une nouvelle mission d'exploration et d'étude de la surface de la planète. Notamment, le prélèvement d'échantillons de minéraux de surface a pour objectif de mieux comprendre les processus géologiques et climatiques qui ont transformé Mars au cours du temps. Plus généralement, les propriétés physiques (taille, forme, structure interne) des matériaux de surface de différents corps célestes (planètes, satellites, astéroïdes, comètes) peuvent être analysées et reliées à la formation et l'évolution des roches, et utilisées comme marqueur de leur histoire géologique.

Alternativement à l'envoi d'un rover, qui est une opération difficile et coûteuse, l'étude de la surface d'un corps céleste peut s'effectuer depuis l'orbite. Par exemple, des mesures photométriques, qui caractérisent l'énergie lumineuse réfléchie par le corps céleste, peuvent permettre de remonter à la composition chimique et texturale des matériaux de surface. Pour cela, des modèles photométriques de transfert radiatif ont été mis au point. Ils relient un ensemble de paramètres physiques d'intérêt, qui décrivent les propriétés de la surface, à la lumière réfléchie (réflectance) dans toutes les directions de l'espace, une quantité mesurable par un capteur embarqué dans un satellite. Par exemple, on dispose depuis 2006 de nombreuses acquisitions hyperspectrales multi-angulaires, c'est à dire effectuées à de nombreuses longueurs d'onde, par le spectro-imageur CRISM (Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars) à bord de la sonde Mars Reconnaissance Orbiter (MRO). L'inversion du modèle photométrique permet alors de retrouver la composition et la texture du matériau à partir de ces observations. En parallèle, des expériences de laboratoire peuvent être conduites sur des minéraux connus ou des matériaux supposés analogues à ceux présents sur les corps planétaires. Les conditions expérimentales favorables permettent d'obtenir des mesures précises, utilisées comme référence pour comparer et classer les résultats obtenus sur des corps célestes.

Le sujet de cette thèse trouve son origine dans ce contexte planétologique. Plus particulièrement, une des phases cruciales de cette approche est de pouvoir effectivement retrouver les paramètres physiques à partir des observations photométriques. Remarquons que le matériau étudié ici est supposé pur, donc pouvant être décrit par un seul ensemble de paramètres physiques. Le cas plus général d'un mélange de plusieurs composants a été étudié par exemple dans [Douté et al., 2007, Moussaoui et al., 2008, Dobigeon et al., 2009, Andrieu et al., 2018]. Estimer la valeur des paramètres physiques prend la forme d'un problème inverse, terme qui désigne généralement une situation dans laquelle on souhaite déterminer les causes d'un phénomène à partir de l'observation de ces effets. Cela est rendu possible par la connaissance d'un modèle, appelé généralement modèle direct, qui, étant donné une cause (ici les paramètres physiques), exprime l'effet (ici la mesure de réflectance). On cherche alors, étant donnée une observation, à retrouver les paramètres physiques qui expliquent au mieux cette observation, selon le modèle direct. Il s'agit d'une tâche courante (cf [Tarantola et al., 1982] ou [Giovannelli and Idier, 2015] pour une vue d'ensemble) dans de nombreux domaines : citons par exemple l'imagerie médicale [Frau-Pascual et al., 2014, Mesejo et al., 2016, Lemasson et al., 2016, Nataraj et al., 2018] ou l'astro-physique [Bernard-Michel et al., 2009, Schmidt and Fernando, 2015]. Ce problème reste malgré tout difficile, notamment parce que le modèle utilisé pour expliquer les observations peut être complexe (souvent non linéaire) et que les observations disponibles sont bruitées.

L'objectif principal de ce travail est donc de développer une méthodologie adaptée à la résolution d'un problème inverse et de l'appliquer sur un modèle de transfert radiatif utilisé en planétologie. Nous continuons cette introduction en décrivant plus précisément le problème inverse concerné avant de passer en revue les

principales méthodes existantes pour le résoudre. Nous finirons par présenter le plan du manuscrit et ses contributions principales.

Caractéristiques génériques du problème inverse concerné Nous nous intéressons à l'inversion d'un modèle physique F , reliant des paramètres $\mathbf{x} \in \mathcal{P}$ variant dans un domaine $\mathcal{P} \subset \mathbb{R}^L$ à un vecteur d'observables $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^D$. Dans notre cas, le nombre L de paramètres physiques ne dépasse pas la dizaine et la dimension D d'une observation peut varier, mais n'excède pas en général la centaine. La fonctionnelle F est non linéaire et son expression analytique est trop complexe pour pouvoir être explicitement inversée. De plus, le contexte planétologique impose différentes contraintes, qui vont en retour influencer le choix d'une méthode de résolution.

Tout d'abord, le nombre d'observations à inverser est massif. En effet, des centaines de sites martiens ont été survolés, et pour chacun, des mesures ont été prises pour des milliers de points spatiaux et pour plusieurs centaines de longueurs d'onde, résultant en plusieurs centaines de milliers de vecteur \mathbf{y} à inverser.

Ensuite, les observations \mathbf{y} présentent une incertitude, qui provient des conditions de mesures et du pré-traitement (comme la correction de l'influence de l'atmosphère martienne). On veut donc pouvoir quantifier l'incertitude sur l'observation propagée par la procédure d'inversion du modèle.

Finalement, parce que le problème inverse est souvent mal contraint dans le contexte de la télédétection, on a peu de garanties sur le nombre de solutions attendues : le modèle F peut ne pas être injectif. On veut donc pouvoir détecter et prendre en charge les potentielles solutions multiples.

Remarquons que, bien que la motivation de ce travail provienne d'un contexte particulier, les caractéristiques présentées ici sont générales et pourraient se retrouver naturellement dans d'autres contextes.

Méthodes existantes de résolution d'un problème inverse De nombreuses approches ont été proposées pour résoudre un problème inverse. Nous en décrivons rapidement quatre : les méthodes d'optimisation directe, les méthodes de Lookup Table, les méthodes d'apprentissage profond et les méthodes d'inversion bayésienne par échantillonnage.

Une approche classique, dite d'optimisation, consiste à minimiser la distance entre l'observation et la valeur prédite par le modèle direct. Un terme de pénalisation peut être ajouté pour augmenter la régularité des solutions ou pour inclure une information a priori. Plus précisément, étant donnée une observation \mathbf{y}_{obs} , on cherche

$$\hat{\mathbf{x}} := \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{P}} \lambda \|F(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_{obs}\|^2 + \mu d_{pen}^2(\mathbf{x}) \quad (1)$$

où λ et μ sont des poids à choisir, et $d_{pen}(\mathbf{x})$ est un terme (optionnel) de régularisation, par exemple de la forme $d_{pen}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}\|$ ou $d_{pen}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|$ (\mathbf{x}_0 représentant une connaissance a priori). Ce problème de minimisation peut être résolu par exemple par un algorithme de descente de gradient (méthodes quasi-Newton) ou par l'algorithme de Powell quand le gradient de F n'est pas calculable. Cette approche est utilisée dans plusieurs travaux, comme [Shepard and Helfenstein, 2007, Helfenstein and Shepard, 2011, Phan et al., 2014]; une vue d'ensemble des applications en imagerie est donnée par [Scherzer et al., 2009]. On peut aussi inclure dans cette famille de méthodes les algorithmes génétiques ([Kennedy et al., 2001, Cord et al., 2003]), qui font évoluer une population de solutions candidates par mutations successives en ne conservant que les meilleures solutions au sens de la fonction de coût donnée par (1). Comme l'algorithme d'optimisation doit être répété pour chaque observation à inverser, cette approche n'est en général pas adaptée à un contexte d'inversion massive. L'estimateur produit ne permet pas de quantifier une incertitude sur la solution. Le terme de régularisation pourrait permettre d'éviter l'instabilité due à des solutions multiples, mais il faut pour cela disposer d'une information a-priori sur la forme ou la localisation des solutions recherchées, ce qui n'est pas notre cas.

Une autre famille de méthodes (dites de *Lookup Table*) consiste à générer une fois pour toute un dictionnaire de couples $(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n = F(\mathbf{x}_n))_{n=1\dots N}$, où les points \mathbf{x}_n décrivent un sous ensemble de l'espace des paramètres possibles \mathcal{P} . Ensuite, on choisit le plus proche voisin d'une observation \mathbf{y}_{obs} et on prédit les paramètres par le point \mathbf{x} associé :

$$\hat{\mathbf{x}} := \mathbf{x}_i \text{ où } i := \arg \min_{n=1\dots N} \|\mathbf{y}_{obs} - \mathbf{y}_n\|$$

Remarquons que cette méthode ne nécessite pas de disposer d’une expression analytique de F (où même de pouvoir l’évaluer) : seul un dictionnaire représentant le modèle est requis. Cette approche est utilisée dans plusieurs domaines, comme la planétologie ([Carlson et al., 2005]), l’agronomie ([Weiss et al., 2000, Darvishzadeh et al., 2012]) ou encore l’imagerie médicale ([Lemasson et al., 2016]). Ces méthodes présentent en général de bonnes performances (en terme de temps de calcul), puisque la phase de prédiction ne requiert qu’un parcourt du dictionnaire de référence (et ne requiert pas d’évaluer le modèle direct). En revanche, elles ne permettent pas de quantifier l’incertitude. De plus, les prédictions peuvent être instables, au sens où deux observations proches peuvent être associées à des paramètres très peu similaires (voir par exemple [Bernard-Michel et al., 2007, Aspländer, 2021]). La précision et la robustesse de la prédiction peuvent être améliorées en augmentant la taille N du dictionnaire, mais le coût en temps de calcul (qui est proportionnel à N) devient alors trop important.

Plus récemment, les méthodes d’apprentissage profond ont aussi été appliquées à des problèmes inverses (voir [Arridge et al., 2019] pour une vue d’ensemble). L’idée est de remplacer le modèle inverse théorique par une approximation paramétrique F_{θ^*} apprise sur un dictionnaire. Étant donné un jeu d’apprentissage $(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n = F(\mathbf{x}_n))_{n=1\dots N}$, les paramètres θ^* du réseau de neurones sont ajustés itérativement pour minimiser une fonction de coût, par exemple de la forme $\sum_n \|F_{\theta^*}(\mathbf{y}_n) - \mathbf{x}_n\|$. Une fois l’apprentissage effectué, les paramètres sont prédits à partir d’une observation par

$$\hat{\mathbf{x}} := F_{\theta^*}(\mathbf{y}_{obs})$$

Cette approche a été appliquée dans divers travaux, particulièrement en imagerie médicale ([Virtue et al., 2017, Hoppe et al., 2017, Balsiger et al., 2018, Barbieri et al., 2018, Golbabaee et al., 2019, Song et al., 2019]). Elle permet d’inverser efficacement un grand nombre d’observations : l’étape d’apprentissage, qui est très coûteuse en ressources et en temps de calcul, est effectuée en amont, une seule fois, tandis que l’étape de prédiction pour chaque observation est très rapide. Les approches par apprentissage profond rencontrent un grand succès, notamment pour des tâches de classification. En revanche, elles ont jusqu’à maintenant essentiellement été utilisées pour produire des estimateurs ponctuels, qui ne permettent pas de quantifier l’incertitude ou de prendre en compte des solutions multiples. Cela dit, de nombreux travaux ont récemment été entrepris pour développer des méthodes permettant de quantifier l’incertitude de la prédiction d’un réseau. L’apparition des réseaux de neurones bayésiens, qui estiment des *distributions* sur les poids du réseau, remonte à [MacKay, 1992, Neal, 1996]. Par ailleurs, des techniques permettant de réutiliser les architectures des réseaux existants ont aussi été proposées (voir par exemple [Gal, 2016] et [Kabir et al., 2018, Abdar et al., 2021] pour une vue d’ensemble). Malgré cela, il ne semble pas y avoir encore de consensus sur le sujet. De manière générale, le grand nombre de paramètres du réseau le rend difficilement interprétable : remarquons par exemple, que dans le cas où F n’est pas injective, F^{-1} n’existe pas, et il n’est pas clair de comprendre ce que F_{θ^*} représente.

Une autre grande famille de méthodes pour résoudre un problème inverse repose sur un formalisme probabiliste (popularisé par exemple par [Tarantola, 2005]). Le principe est de modéliser le problème par un couple de variable aléatoire $(X, Y) \in \mathbb{R}^L \times \mathbb{R}^D$, où la loi de X modélise l’information a-priori et la loi de Y sachant X est définie par le modèle physique à inverser. La solution du problème inverse est alors donnée par la loi conditionnelle de X sachant $Y = \mathbf{y}_{obs}$, reliée aux deux lois précédentes par le théorème de Bayes :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{1}{\int p(\mathbf{x})p(\mathbf{y}|\mathbf{x})d\mathbf{x}}p(\mathbf{x})p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$$

Partant d’une distribution a-priori (typiquement uniforme), la donnée de l’observation affine l’état de connaissance sur les paramètres et cette détermination est plus ou moins précise en fonction de son incertitude. Formellement, le problème et sa solution sont bien définis par la donnée d’une loi a-priori et du modèle probabiliste directe (loi de Y sachant X). Remarquons en revanche que la difficulté liée à ce formalisme vient de l’exploitation de la loi a-posteriori. En effet, elle est souvent utilisée en calculant l’estimateur de la moyenne :

$$\hat{\mathbf{x}} := \mathbb{E}[X|Y = \mathbf{y}_{obs}]$$

Or, la relation de Bayes fait intervenir dans l’expression de la loi a-posteriori une constante de normalisation, qui est souvent non explicite. Dès lors, il n’est pas évident de calculer sa moyenne ou de l’échantillonner. L’approche par inversion bayésienne requiert donc en général d’utiliser une méthode d’échantillonnage, telles que les méthodes d’Importance Sampling (IS, [Kloek and van Dijk, 1978]), Markov Chain Monte Carlo (MCMC, [Robert and Casella, 2004]) ou Approximate Bayesian Computation (ABC, [Sisson et al., 2018]) pour pouvoir explorer concrètement la loi a-posteriori. Ces méthodes permettent de générer des échantillons suivant la loi et de les utiliser pour calculer un estimateur ponctuel des paramètres physiques. La variance de la loi a-posteriori est alors un indicateur naturel de l’incertitude de l’inversion. Cette approche vient avec des garanties théoriques fortes et est utilisée dans de nombreux domaines, comme la planétologie ([Schmidt and Fernando, 2015]), le traitement d’image ([Gilavert et al., 2015]), l’imagerie médicale ([Bertrand et al., 2001]) ou la géologie ([Martin et al., 2012]). Néanmoins, ces méthodes sont généralement coûteuses en temps de calcul : de manière similaire aux méthodes d’optimisation directe et en opposition avec les approches d’apprentissage, la génération des échantillons de la loi a-posteriori n’est pas directe et doit être répétée pour chaque observation. De plus, même si le formalisme bayésien permet naturellement de prendre en compte des solutions multiples, l’exploration d’une loi multi-modale par ces méthodes n’est pas simple. Notamment, l’estimateur naturel de la moyenne de la posterior ne suffit pas à apprécier la multiplicité des solutions.

Notons que formalisme bayésien et apprentissage profond ont déjà été combinés : la méthode dite des Normalizing Flows, introduite notamment dans [Dinh et al., 2015], peut être utilisée pour apprendre une séquence de transformations inversibles d’une densité simple vers la loi a-posteriori étudiée. Cela permet de disposer d’une expression explicite pour la densité et de facilement pouvoir l’échantillonner. En revanche, l’apprentissage de la loi a-posteriori est répété pour chaque observation, ce qui entraîne un temps de calcul important dans un cadre d’inversion massive. Nous renvoyons à [Kobyzev et al., 2020, Papamakarios et al., 2021] pour une vue d’ensemble et [Kruse et al., 2021] pour une comparaison de différentes architectures sur deux problèmes inverses simples.

Cadre retenu et organisation du manuscrit Après analyse de ces différentes méthodes, nous concluons qu’aucune ne répond parfaitement aux critères du problème inverse concerné. L’approche proposée dans cette thèse est alors une tentative de réunir leurs avantages : une approche par apprentissage permet une prédiction rapide et le formalisme bayésien est un bon cadre pour exprimer l’incertitude des mesures et la multiplicité des solutions. Dans la suite, nous nous plaçons donc dans un cadre bayésien : nous posons

$$Y = F(X) + \epsilon$$

où X a une loi a-priori $p(\mathbf{x})$ (supposée ici uniforme sur l’espace des paramètres \mathcal{P}), et ϵ est un bruit gaussien centrée de covariance Σ . L’objectif général de ce travail consiste alors à proposer et appliquer une méthodologie permettant d’explorer efficacement la loi a-posteriori de ce modèle.

Le manuscrit s’organise en trois chapitres. Le premier chapitre se place dans le cadre général mentionné ci-dessus et développe une méthodologie basée sur une approche d’apprentissage qui permet d’obtenir efficacement une approximation de la loi a-posteriori sous la forme d’un modèle de mélange gaussien. Nous commencerons par décrire le modèle GLLiM (Gaussian Locally-Linear Mapping, introduit dans [Deleforge et al., 2015]) qui est au coeur de la méthode proposée. Nous présenterons ensuite les deux principales contributions méthodologiques de cette thèse. Alors que jusque là, la plupart des travaux utilisant le modèle GLLiM résumaient l’information donnée par la loi a-posteriori prédite par GLLiM par sa moyenne (et sa covariance), nous proposons d’utiliser le modèle de mélange complet.

- La partie 1.2 exploite le modèle de mélange pour estimer les potentielles solutions multiples. Pour cela, nous cherchons à déterminer les modes du mélange gaussien prédit. Comme c’est en fait un problème difficile (cf. [Ray and Lindsay, 2005]), nous proposons comme alternative d’utiliser les centroïdes (moyenne de chaque composante du mélange). Pour obtenir un résultat exploitable, nous utilisons un algorithme de fusion de mélange pour réduire le nombre de composantes et nous montrons que les centroïdes du mélange réduit fournissent une bonne approximation des solutions multiples.
- La partie 1.3 montre comment utiliser des techniques d’échantillonnage (Importance Sampling) pour obtenir un meilleur compromis entre précision de l’approximation de la loi a-posteriori et temps de

calcul. Pour cela, nous remarquons que la loi a-posteriori prédite par le modèle GLLiM est première approximation de la loi réelle, et qu'elle est donc un bon candidat pour être une loi de proposition dans une méthode d'échantillonnage préférentiel.

Le deuxième chapitre est consacrée à l'inversion du modèle de Hapke, qui est un modèle de transfert radiatif couramment utilisé par les planétologues pour analyser des mesures de réflectance. Après avoir rappelé son expression et la signification de ses paramètres, nous validerons la méthodologie sur des données synthétiques. Entre autres, nous nous comparerons à des méthodes MCMC de référence, en terme de précision numérique et de coût en temps de calcul. Nous appliquerons ensuite notre méthode sur plusieurs jeux d'observations :

- les mesures de laboratoire présentées et étudiées dans [Pilorget et al., 2016] (section 2.3.1)
- des mesures de laboratoire sur des échantillons de météorites (section 2.3.1) et de matériaux planétaires (section 2.3.1), effectuées par S. Potin ([Potin et al., 2019, Potin et al., 2020, Potin et al., 2021])
- des observations de la planète Mars effectuées par l'instrument Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars (CRISM), étudiées dans [Douté and Pilorget, 2017], et inversées dans leur ensemble pour la première fois (section 2.3.2)

Finalement, le troisième chapitre discute du choix du modèle (physique ou statistique) à travers trois questions :

- Peut-on évaluer quantitativement la pertinence d'un modèle physique à expliquer un jeu d'observations ? La section 3.1 propose un algorithme pour estimer une incertitude de modèle et l'applique sur le modèle de Hapke.
- Comment choisir les observables à mesurer pour contraindre au mieux les paramètres du modèle physique ? La section 3.2 propose un critère de sélection des géométries de mesure pour favoriser l'inversion du modèle de Hapke.
- Peut-on généraliser l'approche proposée dans le premier chapitre à un prior sur X non uniforme ? La section 3.3 montre comment adapter la méthodologie pour prendre en compte efficacement un a-priori gaussien, et l'illustre sur un problème d'assimilation de données intervenant dans l'étude du manteau neigeux ([Gay et al., 2015]).

Implémentation logicielle Les différents algorithmes utilisés dans cette thèse ont été implémentés avec le langage Julia ([Bezanson et al., 2017]) et sont disponibles à cette [adresse](#). Pour accompagner le corps du texte, des exemples de code provenant de l'implémentation en Julia seront donnés dans des encarts de la forme

Exemple de code

```
# code example
```

Ils ne participent pas directement à la discussion scientifique et peuvent être ignorés en première lecture. En revanche, ils permettent de relier ce manuscrit à l'implémentation effectuée pendant la thèse et se veulent un point d'entrée pour un lecteur souhaitant utiliser la méthodologie proposée. Plus de détails sur l'implémentation logicielle sont donnés dans l'annexe G.

Chapitre 1

Inversion bayésienne efficace par régression et échantillonnage préférentiel

Sommaire

1.1 Régression inverse avec le modèle GLLiM	15
1.1.1 Définition et interprétation du modèle GLLiM	15
1.1.2 Inférence des paramètres du modèle GLLiM	18
1.1.3 Choix de l'hyper-paramètre K	24
1.1.4 Influence du niveau de bruit sur les observations	27
1.1.5 Conclusion	29
1.2 Prise en compte de solutions multiples	30
1.2.1 Prédiction par les centroïdes	30
1.2.2 Fusion d'une loi de mélange gaussien	31
1.2.3 Permutation des solutions multiples	33
1.2.4 Détection de solutions multiples	34
1.2.5 Conclusion	37
1.3 Raffinement des prédictions par échantillonnage d'importance	39
1.3.1 Échantillonnage préférentiel normalisé (IS)	39
1.3.2 Échantillonnage préférentiel autour des centroïdes	42
1.3.3 Échantillonnage préférentiel incrémental (IMIS)	43
1.3.4 Comparaison des méthodes GLLiM, IS et IMIS	45
1.3.5 Conclusion	49
1.4 Conclusion	50

Nous présentons dans ce chapitre le modèle statistique au centre de notre méthodologie. Rappelons que nous nous plaçons dans un contexte d'inversion bayésienne d'une fonctionnelle. Si \mathbf{y}_{obs} est une observation issue du modèle F , associée à une incertitude $\boldsymbol{\sigma}_{obs}$, si X est une variable aléatoire à valeurs dans \mathbb{R}^L modélisant les paramètres physiques, on pose

$$Y = F(X) + \epsilon \tag{1.1}$$

où ϵ est un bruit gaussien centré, de variance $\boldsymbol{\Sigma} := \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}_{obs}^2)$ et notre objectif est alors d'étudier la loi a-posteriori de X sachant $Y = \mathbf{y}_{obs}$. L'idée générale qui soutend la méthode proposée est de procéder en deux étapes. Une première étape, dite d'apprentissage, consiste à ajuster un modèle paramétrique modélisant la

loi du couple (X, Y) . Cette étape ne dépend pas de l’observation à inverser et peut donc être réalisée une fois pour toute. Dans un second temps, le modèle paramétrique est utilisé comme une approximation de la vraie loi pour inverser efficacement une série d’observations. Le modèle paramétrique choisi doit donc disposer d’une procédure d’inférence et, une fois ajusté, pouvoir être exploité efficacement.

Le modèle GLLiM (Gaussian Locally-Linear Mapping), qui peut être vu comme un modèle de mélange gaussien adapté à la régression, réunit ces conditions. L’algorithme EM (Expectation Maximization) peut être utilisé pour estimer ses paramètres, et une formule close pour la loi conditionnelle de X sachant Y est disponible. Ce modèle a été introduit dans [Deleforge et al., 2015] dans un contexte de régression en grande dimension en présence de variables latentes. Il est relié à plusieurs approches proposées au préalable dans la littérature : Mixture of local linear experts (MLE) [Xu et al., 1995], Probabilistic piecewise affine mapping (PPAM) [Deleforge and Horaud, 2012] ou encore aux modèles de mélange gaussien joints [Qiao and Minematsu, 2009]. La version générale du modèle GLLiM avec variables latentes, dite *hybride*, se rapproche aussi de plusieurs modèles de réduction de dimension. De plus, le modèle GLLiM a été généralisé à d’autres contextes (régression robuste avec des lois de Student [Perthame et al., 2018]; utilisation conjointe d’un réseau de neurones [Lathuiliere et al., 2017]).

Comme introduit plus haut, l’objectif de cette thèse est d’utiliser le modèle GLLiM pour résoudre un problème inverse en planétologie. Nous considérons que le modèle physique est entièrement déterminé et nous n’utilisons donc pas les variables latentes. De plus, nous ne considérons que le cas gaussien. En revanche, alors que le modèle GLLiM a jusque là surtout été utilisé comme estimateur ponctuel, nous cherchons ici à exploiter la loi a-posteriori complète prédite. En effet, alors que plusieurs méthodes d’inversion ne fournissent que des estimateurs ponctuels, le modèle GLLiM donne accès à une approximation de la loi a-posteriori sous forme d’un mélange de gaussiennes. Les contributions de ce chapitre proviennent donc de l’exploitation de cette loi a-posteriori pour améliorer le processus d’inversion. Nous présentons deux approches nouvelles : la première exploite les centroïdes du mélange obtenu par GLLiM pour prendre en charge un problème inverse présentant des solutions multiples (partie 1.2). La seconde (partie 1.3) consiste à utiliser la loi GLLiM comme distribution d’importance pour améliorer les prédictions par échantillonnage préférentiel (Importance Sampling et Incremental Mixture Importance Sampling). Nous commençons par fixer les notations utilisées dans la suite du manuscrit (table 1.1) avant de présenter en détails le modèle GLLiM (partie 1.1). La conclusion (partie 1.4) résumera la méthodologie d’inversion proposée.

$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^L$	Element de l'espace des paramètres physiques
$\mathbf{y} \in \mathbb{R}^D$	Element de l'espace des observations
$\mathbf{y}_{obs}, \boldsymbol{\sigma}_{obs}$	Vecteur des observations et leur écart-type
F	Notation générique pour la fonctionnelle à inverser
\mathcal{P}	Domaine de définition des paramètres (par exemple le pavé $[0, 1]^L$)
X	Variable aléatoire modélisant les paramètres physiques
Y	Variable aléatoire modélisant les observations
$p(\mathbf{x}), p(\mathbf{y}), p(\mathbf{x} Y = \mathbf{y})$	Densité de X , densité de Y , densité conditionnelle de X sachant Y
$\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}, \boldsymbol{\Gamma})$	Densité de la loi gaussienne de moyenne \mathbf{c} et de covariance $\boldsymbol{\Gamma}$
$M_{D,L}$	Ensemble des matrices réelles de taille $D \times L$
S_L^{++}	Ensemble des matrices symétriques définies positives de taille L
$ \mathbf{A} $	Déterminant de la matrice \mathbf{A}
${}^t\mathbf{A}$	Transposée de la matrice \mathbf{A}
K, k	Nombre et indice des composantes du modèle GLLiM
$\boldsymbol{\theta} = \{\pi_k, \mathbf{c}_k, \boldsymbol{\Gamma}_k, \mathbf{A}_k, \mathbf{b}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k\}$	Paramètres du modèle GLLiM <i>direct</i>
$\boldsymbol{\theta}^* = \{\pi_k^*, \mathbf{c}_k^*, \boldsymbol{\Gamma}_k^*, \mathbf{A}_k^*, \mathbf{b}_k^*, \boldsymbol{\Sigma}_k^*\}$	Paramètres du modèle GLLiM <i>inverse</i>
Θ	Ensemble des paramètres GLLiM possibles
$\alpha_k(\mathbf{x}), \alpha_k^*(\mathbf{y})$	Poids de la loi de mélange GLLiM directe (resp. inverse)
$p_G(\mathbf{x} Y = \mathbf{y})$	Densité conditionnelle de X sachant Y sous le modèle GLLiM
$R(\mathbf{x})$	Erreur relative de reconstruction pour une observation \mathbf{y}_{obs}
GMM	Modèle de mélange gaussien (Gaussian Mixture Model)
GLLiM	Gaussian Locally-Linear Mapping
EM	Algorithme Expectation-Maximization
IS	Échantillonnage préférentiel (Importance Sampling)
IMIS	Incremental Mixture Importance Sampling

TABLE 1.1 – Résumé des notations et abréviations utilisées dans le manuscrit

1.1 Régression inverse avec le modèle GLLiM

Cette section présente le modèle GLLiM et montre en quoi il est adapté au contexte d'inversion bayésienne. Après avoir rappelé sa définition (section 1.1.1) et les formules closes donnant les lois conditionnelles, nous présentons l'algorithme d'inférence usuel (section 1.1.2). Nous discutons ensuite de la sélection du nombre de composantes du mélange (section 1.1.3). Enfin, la section 1.1.4 étudie l'influence des niveaux de bruits sur le modèle et la loi a-priori.

1.1.1 Définition et interprétation du modèle GLLiM

Le modèle GLLiM est intimement lié aux modèles de mélanges gaussiens, dont nous rappelons la définition.

Définition 1. On dit que X suit un modèle de mélange gaussien de paramètres $(\pi_k, \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k)_{k=1..K}$ (où $\pi_k \in [0, 1]$, de somme 1, $\mathbf{c}_k \in \mathbb{R}^L$ et $\mathbf{\Gamma}_k \in S_L^{++}$) s'il admet la densité

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k)$$

On utilisera l'abréviation GMM pour parler des modèles de mélange gaussien en général. On appellera les \mathbf{c}_k les *centroïdes* du mélange.

S'appuyant sur l'idée de mélange, le modèle GLLiM est un modèle statistique paramétrique qui décrit l'interaction entre X et Y par une combinaison de transformations affines : X est représenté par un mélange, et sur chaque composante de ce mélange, Y est l'image bruitée d'une fonction affine. La définition suivante formalise cette description :

Définition 2. Soit $K \in \mathbb{N}$ et, pour $k = 1..K$, $\pi_k \in [0, 1]$ (de somme 1), $\mathbf{c}_k \in \mathbb{R}^L$, $\mathbf{\Gamma}_k \in S_L^{++}$, $\mathbf{A}_k \in M_{D,L}$, $\mathbf{b}_k \in \mathbb{R}^D$ et $\mathbf{\Sigma}_k \in S_D^{++}$.

On note $\boldsymbol{\theta} = \{\pi_k, \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k, \mathbf{A}_k, \mathbf{b}_k, \mathbf{\Sigma}_k\}_{k=1..K}$ et on dit qu'un couple de v.a. $(X, Y) \in \mathbb{R}^L \times \mathbb{R}^D$ suit la loi $GLLiM_{\boldsymbol{\theta}}$ si :

1. il existe une v.a. discrète Z à valeurs dans $\llbracket 1, K \rrbracket$ de loi $p(Z = k) = \pi_k$, et des v.a. ϵ_k de loi $\mathcal{N}(0, \mathbf{\Sigma}_k)$ indépendantes de X et Z telles que

$$Y = \sum_{k=1}^K \mathbb{I}_{Z=k} (\mathbf{A}_k X + \mathbf{b}_k + \epsilon_k)$$

2. la loi de X conditionnellement à $Z = k$ est $\mathcal{N}(\mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k)$

On remarque que dans ce cas, X suit la loi de mélange gaussien (GMM) de paramètres $(\pi_k, \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k)$. On notera dans la suite Θ l'ensemble des paramètres $\boldsymbol{\theta}$ valides.

La proposition suivante, reprise de [Deleforge et al., 2015], montre que le modèle GLLiM est étroitement lié aux modèles de mélanges gaussiens.

Proposition 1.1.1. *Le modèle GLLiM est équivalent à un modèle de mélange joint sur (X, Y) . Plus précisément,*

$$GLLiM_{\boldsymbol{\theta}} = GMM_{\boldsymbol{\psi}}$$

avec $\boldsymbol{\psi} := \Lambda(\boldsymbol{\theta}) := (\rho_k, \mathbf{m}_k, \mathbf{V}_k)_{k=1..K}$ où

$$\begin{aligned} \rho_k &= \pi_k, \\ \mathbf{m}_k &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_k \\ \mathbf{A}_k \mathbf{c}_k + \mathbf{b}_k \end{pmatrix}, \\ \mathbf{V}_k &= \begin{pmatrix} \mathbf{\Gamma}_k & \mathbf{\Gamma}_k^t \mathbf{A}_k \\ \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k & \mathbf{\Sigma}_k + \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k^t \mathbf{A}_k \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{1.2}$$

Λ est bijective sur Θ avec $\Lambda^{-1}(\psi) = (\pi_k, \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k, \mathbf{A}_k, \mathbf{b}_k, \mathbf{\Sigma}_k)$ où

$$\begin{aligned}
\pi_k &= \rho_k, \\
\mathbf{c}_k &= \mathbf{m}_k^x, \\
\mathbf{\Gamma}_k &= \mathbf{V}_k^{xx}, \\
\mathbf{A}_k &= {}^t \mathbf{V}_k^{xy} (\mathbf{V}_k^{xx})^{-1}, \\
\mathbf{b}_k &= \mathbf{m}_k^y - {}^t \mathbf{V}_k^{xy} (\mathbf{V}_k^{xx})^{-1} \mathbf{m}_k^x, \\
\mathbf{\Sigma}_k &= \mathbf{V}_k^{yy} - {}^t \mathbf{V}_k^{xy} (\mathbf{V}_k^{xx})^{-1} \mathbf{V}_k^{xy}, \\
\text{où } \mathbf{m}_k &= \begin{pmatrix} \mathbf{m}_k^x \\ \mathbf{m}_k^y \end{pmatrix} \\
\text{et } \mathbf{V}_k &= \begin{pmatrix} \mathbf{V}_k^{xx} & \mathbf{V}_k^{xy} \\ {}^t \mathbf{V}_k^{xy} & \mathbf{V}_k^{yy} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{1.3}$$

On obtient donc une équivalence des modèles : on peut exprimer le modèle GLLiM simplement à l'aide de la notion de mélange gaussien. Cela dit, le modèle GLLiM présente deux atouts majeurs. L'expression de la définition 2 est bien plus interprétable : nous y reviendrons dans la suite. De plus, la formulation GLLiM permet d'imposer simplement des contraintes sur les matrices de covariance $\mathbf{\Gamma}_k$ et $\mathbf{\Sigma}_k$: nous y reviendrons aussi dans l'inférence du paramètre θ (section 1.1.2).

L'intérêt principal d'utiliser le modèle GLLiM dans un contexte d'inversion bayésienne est qu'il fournit une formule close pour les deux lois conditionnelles $p(\mathbf{y}|X = \mathbf{x})$ et $p(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$. Commençons par l'expression du modèle direct, qui s'obtient assez facilement à partir de la définition 2 :

Proposition 1.1.2 (Modèle direct). *Si $(X, Y) \sim GLLiM_\theta$, alors*

$$p(\mathbf{y}|X = \mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \alpha_k(\mathbf{x}) \mathcal{N}(\mathbf{y}; \mathbf{A}_k \mathbf{x} + \mathbf{b}_k, \mathbf{\Sigma}_k)$$

où

$$\alpha_k(\mathbf{x}) := p(Z = k|X = \mathbf{x}) = \frac{\tilde{\alpha}_k(\mathbf{x})}{\sum_{j=1}^K \tilde{\alpha}_j(\mathbf{x})} \text{ avec } \tilde{\alpha}_k(\mathbf{x}) := \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k)$$

Corollaire 1.1.2.1. *Si $(X, Y) \sim GLLiM_\theta$, alors*

$$\mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}] = \sum_{k=1}^K \alpha_k(\mathbf{x}) (\mathbf{A}_k \mathbf{x} + \mathbf{b}_k)$$

On retrouve dans ce corollaire l'intuition évoquée plus haut : l'image par le modèle GLLiM d'un point \mathbf{x} est une combinaison convexe de transformations affines. Le poids $\alpha_k(\mathbf{x})$ sélectionne les composantes du mélange adaptée à l'entrée \mathbf{x} : celles de poids π_k important et de centre \mathbf{c}_k proche de \mathbf{x} . La figure 1.1 illustre cette formule : étant donné un modèle GLLiM à $K = 30$ composantes, représentées par K couleurs co_k , $(\mathbf{x}_n)_{n=1..N}$ points ($N = 1000$) sont tirés uniformément sur $[0, 1]^2$. On attribue à chaque point \mathbf{x}_n la couleur $\sum_{k=1}^K \alpha_k(\mathbf{x}_n) co_k$, et on affiche les points \mathbf{x}_n et leur couleur (à gauche) et les espérances $\mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}_n]$ correspondantes (à droite).

La loi a-posteriori (ou loi du modèle directe) est aussi exprimable par une formule close, qui suit une forme similaire au modèle directe. Commençons par un rappel sur le conditionnement des vecteurs gaussiens :

Proposition 1.1.3 (Conditionnement gaussien). *Si (X, Y) est un vecteur gaussien de moyenne $\begin{pmatrix} \mathbf{c}_x \\ \mathbf{c}_y \end{pmatrix}$ et de*

covariance $\begin{pmatrix} \mathbf{\Gamma}_x & \mathbf{\Gamma}_{xy} \\ {}^t \mathbf{\Gamma}_{xy} & \mathbf{\Gamma}_y \end{pmatrix}$, alors

$$p(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_x + \mathbf{\Gamma}_{xy} \mathbf{\Gamma}_y^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{c}_y), \mathbf{\Gamma}_x - \mathbf{\Gamma}_{xy} \mathbf{\Gamma}_y^{-1} {}^t \mathbf{\Gamma}_{xy})$$

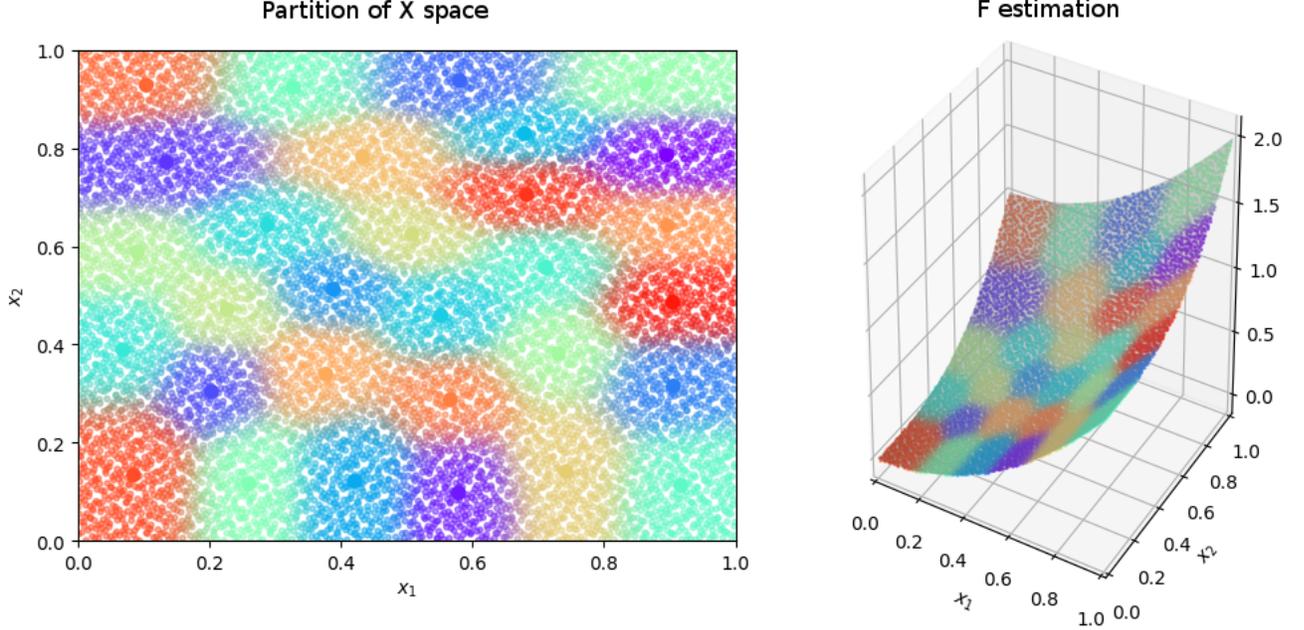


FIGURE 1.1 – Visualisation de la loi de $Y|X$ ($L = 2, D = 1, K = 30$). À gauche, la couleur d'un point $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ est obtenue par la moyenne des couleurs des composantes. Les points plus larges représentent les centres des composantes (\mathbf{c}_k). A droite, les points ont pour coordonnées $(x_1, x_2, \mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}])$, les couleurs étant inchangées.

On peut maintenant exprimer la loi a-posteriori.

Proposition 1.1.4 (Modèle inverse). *Si $(X, Y) \sim GLLiM_{\theta}$, alors*

$$p(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y}) = \sum_{k=1}^K \alpha_k^*(\mathbf{y}) \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k^*, \Sigma_k^*)$$

où

$$\tilde{\alpha}_k^*(\mathbf{y}) := \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{y}; \mathbf{c}_k^*, \Gamma_k^*), \quad \alpha_k^*(\mathbf{y}) := \frac{\tilde{\alpha}_k^*(\mathbf{y})}{\sum_{j=1}^K \tilde{\alpha}_j^*(\mathbf{y})}$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_k^* &= \mathbf{A}_k \mathbf{c}_k + \mathbf{b}_k \\ \Gamma_k^* &= \Sigma_k + \mathbf{A}_k \Gamma_k \mathbf{A}_k^t \\ \Sigma_k^* &= (\Gamma_k^{-1} + \mathbf{A}_k \Sigma_k^{-1} \mathbf{A}_k^t)^{-1} \\ \mathbf{A}_k^* &= \Sigma_k^* \mathbf{A}_k \Sigma_k^{-1} \\ \mathbf{b}_k^* &= \Sigma_k^* (\Gamma_k^{-1} \mathbf{c}_k - \mathbf{A}_k \Sigma_k^{-1} \mathbf{b}_k) \end{aligned} \tag{1.4}$$

On note, par symétrie avec le modèle directe, $\theta^* := \{\pi_k^*, \mathbf{c}_k^*, \Gamma_k^*, \mathbf{A}_k^*, \mathbf{b}_k^*, \Sigma_k^*\}$, et on désignera dans la suite cette densité conditionnelle par $p_G(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$.

Démonstration. On commence par vérifier que, si $X \sim \mathcal{N}(\mathbf{c}, \Gamma)$ et $E \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$ sont indépendants, alors $(X, \mathbf{A}X + \mathbf{b} + E)$ est un vecteur gaussien de moyenne $\begin{pmatrix} \mathbf{c} \\ \mathbf{A}\mathbf{c} + \mathbf{b} \end{pmatrix}$ et de covariance $\begin{pmatrix} \Gamma & \Gamma^t \mathbf{A} \\ \mathbf{A}\Gamma & \Sigma + \mathbf{A}\Gamma^t \mathbf{A} \end{pmatrix}$.

Ensuite, en conditionnant par rapport à Z , on a :

$$p(\mathbf{y}) = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{y}; \mathbf{A}_k \mathbf{c}_k + \mathbf{b}_k, \Sigma_k + \mathbf{A}_k \Gamma_k {}^t \mathbf{A}_k) = \sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k^*(\mathbf{y})$$

D'autre part, on peut exprimer la loi de (X, Y) , en intégrant en Z , par :

$$p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{k=1}^K \pi_k p(\mathbf{y}|Z = k) p(\mathbf{x}|Y, Z = \mathbf{y}, k)$$

Le calcul précédent a montré que $p(\mathbf{y}|Z = k) = \mathcal{N}(\mathbf{y}; \mathbf{c}_k^*, \Gamma_k^*)$. De plus, la remarque introductive et le conditionnement gaussien donnent :

$$p(\mathbf{x}|Y, Z = \mathbf{y}, k) = \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k + \Gamma_k {}^t \mathbf{A}_k \Gamma_k^{*-1} (\mathbf{y} - \mathbf{A}_k \mathbf{c}_k - \mathbf{b}_k), \Gamma_k - \Gamma_k {}^t \mathbf{A}_k \Gamma_k^{*-1} \mathbf{A}_k \Gamma_k)$$

On termine en vérifiant les égalités

$$\begin{aligned} \Gamma_k - \Gamma_k {}^t \mathbf{A}_k \Gamma_k^{*-1} \mathbf{A}_k \Gamma_k &= \Sigma_k^* \\ \mathbf{c}_k + \Gamma_k {}^t \mathbf{A}_k \Gamma_k^{*-1} (\mathbf{y} - \mathbf{A}_k \mathbf{c}_k - \mathbf{b}_k) &= \mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k^* \end{aligned}$$

par exemple en utilisant la formule de Woodbury (cf annexe B.1). □

Corollaire 1.1.4.1. *Si $(X, Y) \sim GLLiM_{\theta}$, alors*

$$\bar{\mathbf{x}}_G(\mathbf{y}) := \mathbb{E}[X|Y = \mathbf{y}] = \sum_{k=1}^K \alpha_k^*(\mathbf{y}) (\mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k^*)$$

et

$$Var(X|Y = \mathbf{y}) = \sum_{k=1}^K \alpha_k^*(\mathbf{y}) [\Sigma_k^* + (\mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k^*) {}^t (\mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k^*)] - \bar{\mathbf{x}}_G(\mathbf{y}) {}^t \bar{\mathbf{x}}_G(\mathbf{y})$$

Ce corollaire justifie l'intérêt du modèle GLLiM dans un contexte d'inversion. En effet, une fois l'inférence du paramètre θ réalisée (cf section 1.1.2), le paramètre θ^* peut être calculé simplement, puis $\bar{\mathbf{x}}_G$ peut être utilisé comme prédicteur. La variance de la loi a-posteriori peut être utilisée pour évaluer l'incertitude associée.

Dans la suite, nous exploiterons l'expression de θ pour l'adapter à l'observation à inverser (cf sections 1.1.4 et 3.3), sans avoir à effectuer à nouveau l'étape d'apprentissage. Il est alors crucial que θ^* soit exprimable directement en fonction de θ pour éviter un coût en temps de calcul trop important dans l'inversion d'un large jeu d'observations.

1.1.2 Inférence des paramètres du modèle GLLiM

Nous présentons maintenant la méthodologie utilisée pour estimer le paramètre θ . Suivant une stratégie d'apprentissage, on commence par générer un jeu d'apprentissage $\mathcal{D} := (\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n)_{n=1..N}$ suivant le modèle statistique 1.1. Dans le cas où F est calculable en temps raisonnable, cette étape ne pose pas de difficultés. Ensuite, on cherche à maximiser la vraisemblance du modèle contre ce jeu d'apprentissage. Comme l'estimateur du maximum de vraisemblance n'a pas d'expression explicite, on a recours à un algorithme de type Expectation-Maximisation (EM). Cet algorithme est couramment utilisé en statistique, notamment parce qu'il garantit la croissance de la vraisemblance au cours des itérations et que, sous des hypothèses raisonnables, la suite des paramètres $(\theta_r)_{r=1..R}$ converge vers un maximum local de la vraisemblance. Étant donnée une variable aléatoire W , de loi à densité paramétrique p_{θ} , on exploite le fait que l'introduction d'une variable dite latente (ou non-observée) Z simplifie la densité du couple (W, Z) . C'est typiquement le cas pour les lois de mélanges. Étant données des réalisations $(\mathbf{w}_n)_{n=1..N}$, l'algorithme EM consiste alors à alterner deux étapes :

Inversion du modèle GLLiM

```
# given a fitted GLLiM model theta, compute theta_star
theta_star = Gllim.inversion(theta)

# use it to compute the conditional law of X knowing Y = yobs
# where yobs is a vector of length D
# alphas has length K; centroids has size (L, K)
alphas, centroids = Gllim.conditionnal_density(theta_star, yobs)

# compute the mean and std of the posterior (inverse) GMM
mean = Probas.mean_mixture(alphas, centroids)
cov = Probas.covariance_mixture(alphas, centroids, theta_star.Sigma)
```

Etape E (Expectation) Calculer, pour un paramètre θ' , $Q(\theta') := \sum_{n=1}^N \mathbb{E} [\log p_{\theta'}(\mathbf{w}_n, Z_n) | W_n = \mathbf{w}_n; \theta']$. Intuitivement, intégrer par rapport à $Z_n | W_n = \mathbf{w}_n$ revient à choisir Z_n de façon la plus raisonnable, connaissant \mathbf{w}_n et θ . Si Z_n est une v.a. discrète, cette étape est déterminée par les poids $p(Z_n = k | W = \mathbf{w}_n)$.

Etape M (Maximization) Maximiser Q et mettre à jour θ avec $\arg \max_{\theta'} Q(\theta')$, qui est en général calculable grâce à l'introduction de Z .

Dans le cas du modèle GLLiM, l'étape E est déterminée par

$$r_{nk} := p(Z_n = k | (X_n, Y_n) = (\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n)) = \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{y}_n; \mathbf{A}_k \mathbf{x}_n + \mathbf{b}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) \mathcal{N}(\mathbf{x}_n; \mathbf{c}_k, \boldsymbol{\Gamma}_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{y}_n; \mathbf{A}_j \mathbf{x}_n + \mathbf{b}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j) \mathcal{N}(\mathbf{x}_n; \mathbf{c}_j, \boldsymbol{\Gamma}_j)}$$

De plus, en posant $r_k = \sum_{n=1}^N r_{nk}$, l'étape M est donnée par les formules de mise à jour suivantes :

$$\begin{aligned}
\pi_k &= \frac{r_k}{N} \\
\mathbf{c}_k &= \frac{1}{r_k} \sum_{n=1}^N r_{nk} \mathbf{x}_n \\
\mathbf{\Gamma}_k &= \frac{1}{r_k} \sum_{n=1}^N r_{nk} (\mathbf{x}_n - \mathbf{c}_k) (\mathbf{x}_n - \mathbf{c}_k)^\top \\
\mathbf{A}_k &= \mathbf{Y}_k^\top \mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^\top \mathbf{X}_k)^{-1} \text{ où} \\
\bar{\mathbf{x}}_k &= \frac{1}{r_k} \sum_{n=1}^N r_{nk} \mathbf{x}_n \\
\bar{\mathbf{y}}_k &= \frac{1}{r_k} \sum_{n=1}^N r_{nk} \mathbf{y}_n \\
\mathbf{X}_k &= \frac{1}{\sqrt{r_k}} [\sqrt{r_{1k}} (\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}}_k) \quad \dots \quad \sqrt{r_{Nk}} (\mathbf{x}_N - \bar{\mathbf{x}}_k)] \\
\mathbf{Y}_k &= \frac{1}{\sqrt{r_k}} [\sqrt{r_{1k}} (\mathbf{y}_1 - \bar{\mathbf{y}}_k) \quad \dots \quad \sqrt{r_{Nk}} (\mathbf{y}_N - \bar{\mathbf{y}}_k)] \\
\mathbf{b}_k &= \frac{1}{r_k} \sum_{n=1}^N r_{nk} (\mathbf{y}_n - \mathbf{A}_k \mathbf{x}_n) \\
\mathbf{\Sigma}_k &= \frac{1}{r_k} \sum_{n=1}^N r_{nk} (\mathbf{y}_n - \mathbf{A}_k \mathbf{x}_n - \mathbf{b}_k) (\mathbf{y}_n - \mathbf{A}_k \mathbf{x}_n - \mathbf{b}_k)^\top
\end{aligned} \tag{1.5}$$

Initialisation

L'algorithme EM est connu pour être sensible à l'initialisation, ce qui demande d'y prêter attention. [Deleforge et al., 2015] introduit pour cela une phase dite *marginal-EM*. Nous avons considéré deux alternatives, l'une suivant les pratiques standards en statistique, l'autre, originale, tirant parti du contexte d'inversion.

Initialisation multiple Une approche usuelle consiste à procéder à plusieurs initialisations, aléatoires, en parallèle, et conserver la meilleure, au sens de la vraisemblance. Pour le modèle GLLiM, il n'est pas évident de déterminer des valeurs raisonnables pour initialiser directement θ . On utilise donc l'équivalence avec les modèles de mélange gaussiens (1.2 et 1.3) : on est ramené à initialiser un modèle de mélange, ce qui peut se faire en initialisant les probabilités d'appartenance aux composantes, ce qui en retour peut être obtenu par l'algorithme dit *k-means*, lui même initialisé avec K éléments tirés au hasard du jeu d'apprentissage joint $(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n)_{n=1..N}$. Pour chaque initialisation, on effectue ensuite quelques itérations de l'algorithme EM pour le modèle GLLiM, avant de comparer la vraisemblance obtenue.

Initialisation avec le modèle physique L'approche précédente est générale : elle ne nécessite que le jeu d'apprentissage \mathcal{D} . Dans notre contexte d'inversion, l'hypothèse sur le modèle statistique permet de proposer une initialisation spécifique. Premièrement, X suit une loi uniforme, ce qui invite par exemple à choisir $\pi_k = \frac{1}{K}$ et à prendre \mathbf{c}_k répartis au mieux sur \mathcal{P} . Concrètement, on peut par exemple utiliser les K premiers points d'une suite dite *quasi-aléatoire*, qui minimisent l'écart moyen entre deux points, comme les séquences de Sobol [Sobol, 1967]. Ensuite, Y est une version bruitée de $F(X)$. On cherche donc \mathbf{A}_k et \mathbf{b}_k pour approcher F au voisinage de \mathbf{c}_k . Pour une fonctionnelle F régulière, on propose donc de prendre $\mathbf{A}_k := dF(\mathbf{c}_k)$ (différentielle de F au point \mathbf{c}_k) et $\mathbf{b}_k := F(\mathbf{c}_k) - dF(\mathbf{c}_k)\mathbf{c}_k$. Les matrices de covariance $\mathbf{\Gamma}_k$ et $\mathbf{\Sigma}_k$ ne semblent pas être directement reliées au modèle physique. Pour les estimer, on utilise les équations 1.5 en prenant $r_{nk} = \frac{1}{N}$, ce qui revient à considérer que tous les points du jeu d'apprentissage sont pertinents

pour la composante k .

La figure 1.2 compare ces deux schémas d'initialisation, sur un jeu d'apprentissage de taille $N = 50000$, simulé en prenant comme fonctionnelle F le modèle de Hapke (présenté dans le prochain chapitre), avec $\Sigma = (0.001)^2 I_D$. Trois critères sont mesurés :

- la log-vraisemblance, après l'initialisation, mais aussi au cours des itérations GLLiM-EM. En effet, comme la méthode d'initialisations multiples procède déjà à quelques itérations, ne comparer la vraisemblance qu'à cette étape la favoriserait nettement.
- la valeur moyenne de la trace de Σ_k :

$$\frac{1}{K} \sum_{k=1}^K \text{Trace}(\Sigma_k)$$

Intuitivement, Σ_k mesure deux incertitudes : le bruit modélisé par Σ et l'erreur d'approximation de F par la composante affine. On peut espérer que cette deuxième incertitude diminue au cours de l'apprentissage.

- l'écart entre la fonctionnelle F et son estimation $F_{est}(\mathbf{x}) := \mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}]$, moyenné sur un jeu de test pris uniformément au hasard sur \mathcal{P} .

Ces résultats ne font pas apparaître de différence flagrante : après quelques itérations, la log-vraisemblance est sensiblement égale (en haut à gauche). La valeur de la trace de Σ_k (en haut à droite) donne un léger avantage à l'initialisation multiple, mais l'écart au modèle directe (en bas à gauche) est plus faible pour l'initialisation fonctionnelle. Nous concluons donc que les deux approches sont utilisables en pratique. L'initialisation fonctionnelle à l'intérêt de ne pas nécessiter de paramètres supplémentaires, à la différence de l'initialisation par les mélanges gaussiens, qui demande de choisir notamment le nombre d'initialisations à effectuer en parallèle, le nombre d'itérations de l'algorithme EM sur le mélange gaussien et le nombre d'itérations de l'algorithme GLLiM-EM.

Terminaison

Plusieurs critères d'arrêt peuvent être choisis. Nous avons retenu un critère double : un nombre maximum d'itérations est fixé. En plus, l'algorithme s'arrête si l'évolution de la vraisemblance à l'itération courante devient négligeable. Plus précisément, si R est le nombre maximal d'itérations, $t > 0$ un ratio, si \mathcal{L}_r désigne la log-vraisemblance à l'itération r , le critère d'arrêt à l'itération r est

$$(r > R) \text{ ou } \left| \frac{\mathcal{L}_r - \mathcal{L}_{r-1}}{\mathcal{L}_{r-1}} \right| < t$$

Critère d'arrêt de l'algorithme EM pour GLLiM

```
# set up the parameters of the stopping criterion
max_iterations = 200
ratio_threshold = 1e-5
stopping_params = Gllim.DefaultStoppingParams(max_iterations, ratio_threshold)
```

Complexité et contraintes

Nous avons déjà mentionné que le modèle GLLiM peut être vu comme un GMM : cela permet d'utiliser directement l'algorithme EM pour les GMMs. En revanche, les GMMs ne permettent pas d'imposer facilement

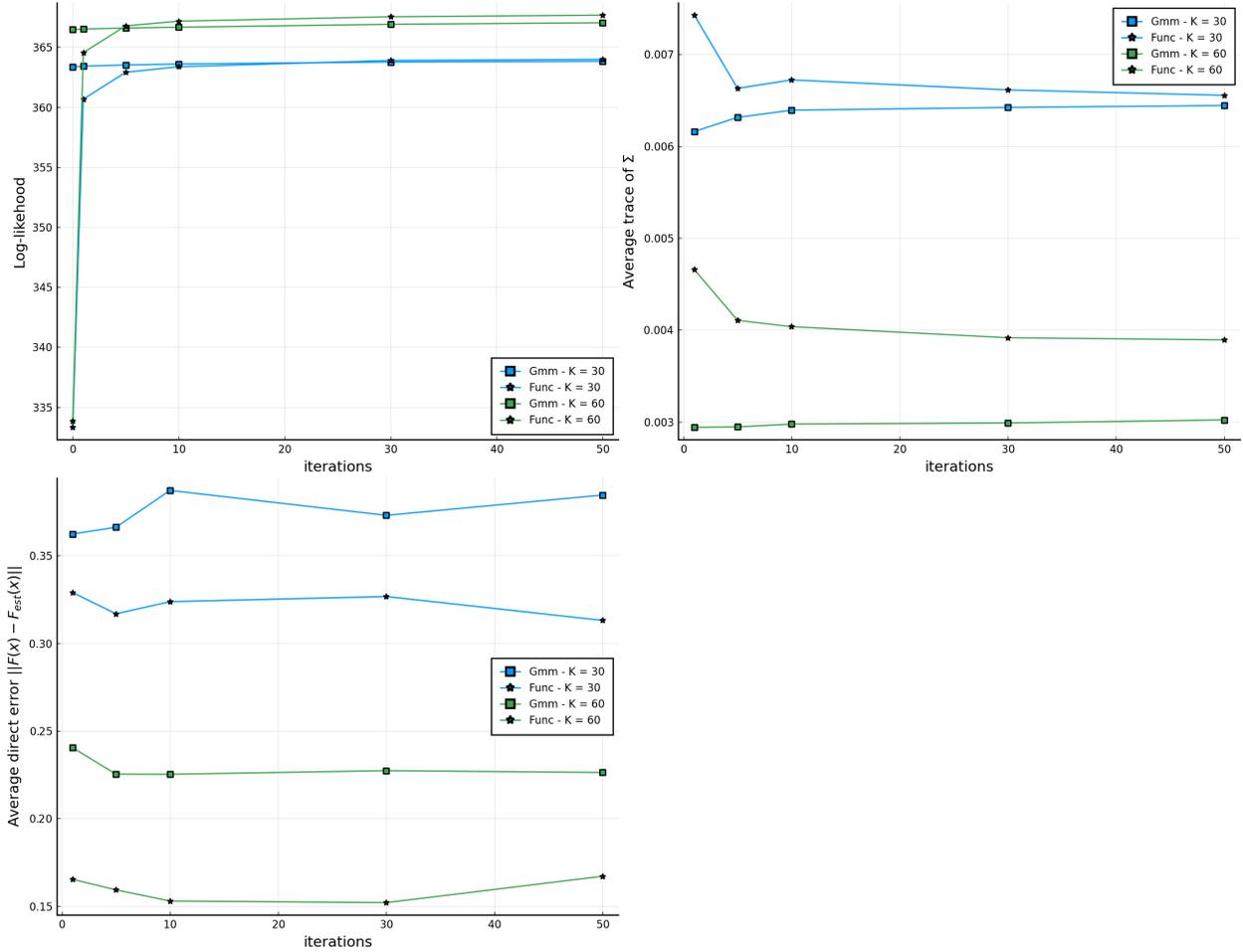


FIGURE 1.2 – Comparaison de l’initialisation multiple (GMM, carré) avec l’initialisation fonctionnelle (Func, étoile), pour deux valeurs de K (30 en bleu, 60 en vert).

une contrainte sur les matrices de covariance, alors que l’algorithme EM pour GLLiM peut être adapté pour imposer une contrainte diagonale ou isotropique sur Γ et Σ . Cela est particulièrement utile en grande dimension (pour D grand). Plus précisément, comparons la complexité du modèle GLLiM, en terme de nombre de paramètres, en fonction des contraintes.

Proposition 1.1.5. *On note $|\theta|_{full}$ le nombre de paramètre du modèle GLLiM sans contrainte, $|\theta|_{diag}$ celui avec une contrainte diagonale sur Σ_k , et $|\theta|_{iso}$ celui avec une contrainte isotropique sur Σ_k . On a alors*

$$\begin{aligned}
 |\theta|_{full} &= K \left(1 + L + \frac{L(L+1)}{2} + DL + D + \frac{D(D+1)}{2} \right) && \underset{D \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{KD^2}{2} \\
 |\theta|_{diag} &= K \left(1 + L + \frac{L(L+1)}{2} + DL + D + D \right) && \underset{D \rightarrow +\infty}{\sim} KD(L+2) \\
 |\theta|_{iso} &= K \left(1 + L + \frac{L(L+1)}{2} + DL + D + 1 \right) && \underset{D \rightarrow +\infty}{\sim} KD(L+1)
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

Quand D est grand, (1.6) montre que le nombre de paramètres pour le modèle sans contrainte est quadratique, ce qui peut rendre l’estimation de θ trop coûteuse en temps de calcul. L’utilisation d’une contrainte diagonale, qui n’est pas modélisable avec le modèle GMM joint, permet un gain drastique.

Conclusion

Pour résumer, l'inférence du paramètre θ suit ces étapes :

1. Génération du jeu d'apprentissage \mathcal{D} suivant le modèle (1.1)
2. Initialisation de l'algorithme EM, par initialisation multiple ou initialisation fonctionnelle
3. Choix d'une éventuelle contrainte sur les covariances Γ_k et Σ_k
4. Itérations de l'algorithme EM pour GLLiM (1.5) jusqu'au critère d'arrêt

Algorithme EM pour GLLiM

```
# generate a training dictionary X (matrix with size (L, N))
# and Y (matrix with size (D, N))

# choose the initialisation scheme : multiple initialisation ...
init_params = Gllim.MultiInitParams(
    10, # number of parallel runs
    Gmms.EmParams(
        K, # number of components
        30, # number of iterations for EM on GMM
        15, # number of iterations for k-means
        1e-12, # numerical regularization of covariances
    )
)

# ... or functional initialisation
init_params = Gllim.FunctionnalInitParams(
    K, # number of components
    F, # function computing F(x)
)

# choose the stopping criterion
stopping_criterion = Gllim.DefaultStoppingParams(
    200, # maximum number of iterations
    1e-5, # threshold ratio
)

# choose the covariance constraints (types)
gamma_type = FullCov{Float64} # no constraint on Gamma
sigma_type = DiagCov{Float64} # diagonal constraint on Sigma
train_params = Gllim.TrainParams{Float64, gamma_type, sigma_type}(
    stopping_criterion,
    1e-12 # numerical regularization of covariances
)

# launch the fitting (initialisation and EM algorithm)
params = Gllim.Params(init_params, train_params)
theta, log_likelihood_history = Gllim.train(params, X, Y)
```

1.1.3 Choix de l’hyper-paramètre K

Nous discutons maintenant du choix du nombre K de composantes dans le mélange. Cette question a déjà été étudiée dans des travaux antérieurs (par exemple [Deleforge et al., 2015]) qui concluent que, généralement, l’approximation par le modèle GLLiM est meilleure quand K augmente, mais n’évolue pas significativement passé un certain seuil. Une approche théorique a aussi été proposée dans [Nguyen et al., 2019, Nguyen et al., 2020], montrant que prendre K assez large permet, sous des hypothèses raisonnables, d’approcher n’importe quelle relation entre X et Y .

Nous continuons d’étudier l’influence du choix de K , en proposant une simulation qui compare les critères suivants :

(trace) la moyenne de la trace des Σ_k (cf section 1.1.2)

(modele) l’erreur moyenne d’estimation de F par $\mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}]$ (cf section 1.1.2)

(bic) le critère *Bayesian Information Criterion* (BIC), exprimé par

$$BIC(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{D}) := -2\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{D}) + |\boldsymbol{\theta}| \log(N)$$

où $\mathcal{D} = (\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n)_{n=1..N}$ est un jeu d’apprentissage de taille N , $\mathcal{L} := \sum_{n=1}^N \log(p(\mathbf{x}_n, \mathbf{y}_n; \boldsymbol{\theta}))$ est la log-vraisemblance du jeu d’apprentissage \mathcal{D} et $|\boldsymbol{\theta}|$ est le nombre de paramètres estimés.

(penalized-II) la vraisemblance pénalisée, obtenue par une heuristique de pente, qui permet généralement de choisir K de façon parcimonieuse. Une régression affine robuste estime la pente a et la valeur à l’origine b et la vraisemblance pénalisée est définie par

$$L_{pen}(|\boldsymbol{\theta}|) = L(|\boldsymbol{\theta}|) - 2a|\boldsymbol{\theta}|$$

Nous choisissons comme fonctionnelles deux modèles de Hapke (géométries de la série d’observations de *Nontronite* et de la série d’observations de *Glace Martienne*, étudiées en détails dans le prochain chapitre), un jeu d’apprentissage de taille $N = 100000$, et trois niveaux de bruit $\Sigma = \sigma^2 I_D$, avec $\sigma = 0.1, 0.01$ et 0.001 . Les figures 1.3 et 1.4 présentent les résultats obtenus et nous amènent aux conclusions suivantes. Tout d’abord, nous observons que les tendances sont similaires entre les deux fonctionnelles et nous ne les différencieront donc pas dans la suite.

Nous observons que le critère BIC montre deux comportements bien distincts suivant la valeur de σ : pour un niveau de bruit important ($\sigma = 0.1$), l’augmentation de K commence par améliorer le critère puis, passé un K optimal, le détériore. Cela signifie que le bruit sur le jeu d’apprentissage domine la qualité de l’apprentissage : le gain de précision quand K augmente devient négligeable devant la complexité additionnelle du modèle. Le niveau de bruit impose une limite sur la précision atteignable. En revanche, pour des niveaux de bruit plus faibles ($\sigma = 0.01, 0.001$), le critère BIC est décroissant et sélectionne donc le K maximal.

La moyenne de la trace des Σ_k et l’erreur moyenne d’estimation évolue de façon similaire, en favorisant un K maximal. On remarque que la variation du gain devient assez marginale autour de la plage $K \in \llbracket 40, 60 \rrbracket$. Notons aussi que, pour les valeurs de $\sigma = 0.1$ et 0.01 la trace de Σ_k prend approximativement la valeur théorique attendue $D\sigma^2$.

L’heuristique de pente favorise un choix parcimonieux de K , et globalement plus faible que les autres indicateurs.

Cette série d’indicateurs conforte les études antérieures : quand le bruit d’apprentissage n’est pas trop important, augmenter K est bénéfique. Comme le gain stagne passé un certain seuil, le choix de K dans la pratique sera aussi dicté par des contraintes de temps de calcul. Remarquons que nous n’avons pas ici exploré l’influence des dimensions L et D . Comme K peut être vu comme le nombre de points d’une grille dans un espace de dimension $L + D$, on s’attend à ce qu’une augmentation de $L + D$ entraîne une augmentation de K . Dans notre cas, nous retenons pour le modèle de Hapke à 4 paramètres ($L = 4, D = 10$) la valeur indicative de $K = 50$.

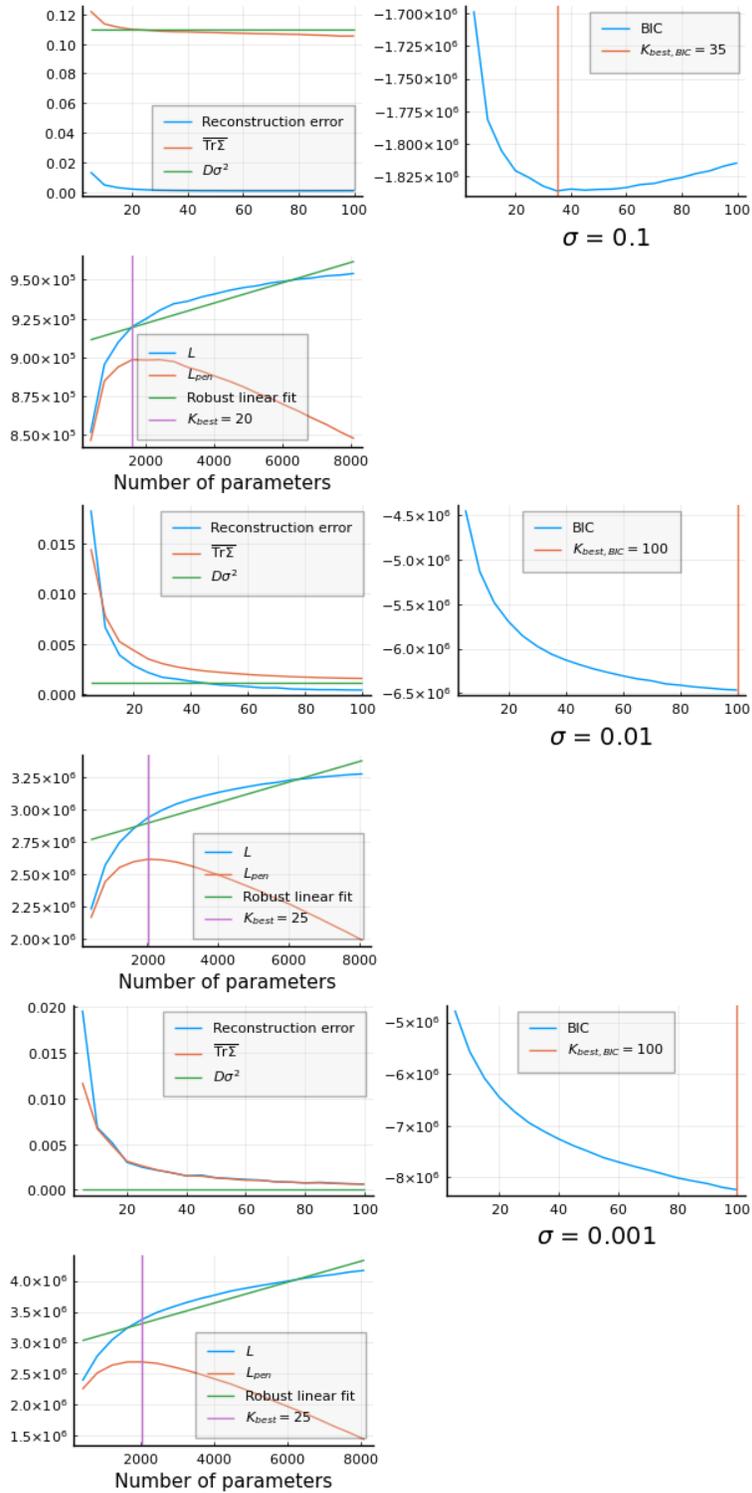


FIGURE 1.3 – Influence du choix de K . Fonctionnelle Hapke Glace Martienne. De haut en bas : $\sigma = 0.1, 0.01$ et 0.001 . De gauche à droite : indicateurs (trace) et (modele) en fonction de K , indicateur (bic) en fonction de K , indicateur (penalized-ll) en fonction du nombre de paramètres.

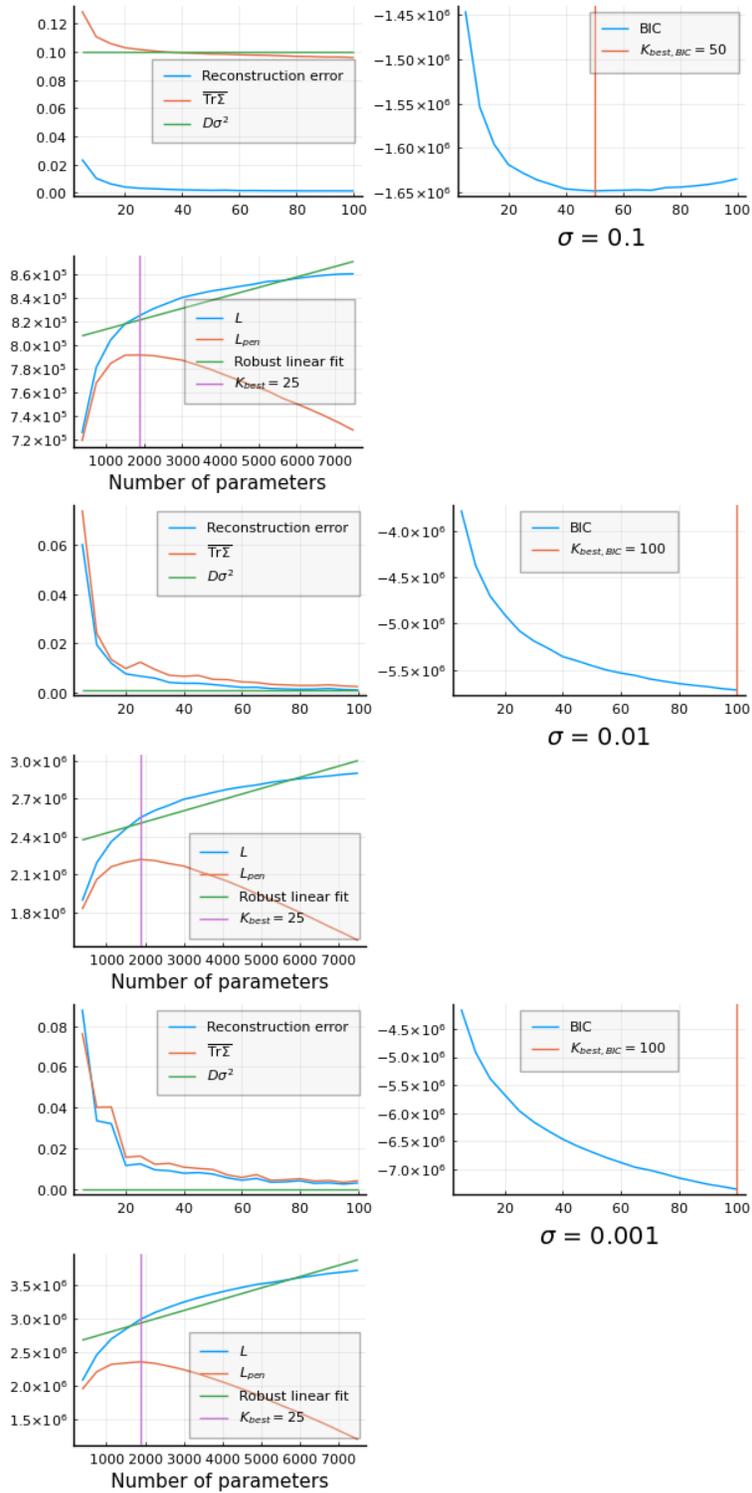


FIGURE 1.4 – Influence du choix de K . Fonctionnelle Hapke Nontronite. De haut en bas : $\sigma = 0.1, 0.01$ et 0.001 . De gauche à droite : indicateurs (trace) et (modele) en fonction de K , indicateur (bic) en fonction de K , indicateur (penalized-ll) en fonction du nombre de paramètres

1.1.4 Influence du niveau de bruit sur les observations

Prise en compte d'un bruit variable

Rappelons que, dans notre cadre de travail (1.1), une fois la fonctionnelle F et la loi a-priori sur X choisie, la loi a-posteriori à étudier est définie par l'observation \mathbf{y}_{obs} et son écart-type $\boldsymbol{\sigma}_{obs}$ (où $\boldsymbol{\Sigma} := \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}_{obs}^2)$). Or, la valeur de $\boldsymbol{\sigma}_{obs}$ peut varier avec l'observation. Pour prendre cela en compte, le jeu d'apprentissage \mathcal{D} devrait être généré à nouveau pour chaque observation, et l'apprentissage exécuté. On perdrait alors les bénéfices de l'approche en terme de temps de calcul. Heureusement, la structure du modèle GLLiM permet de s'adapter à un bruit variable, comme le montre la proposition suivante :

Proposition 1.1.6. *Soit $(X, Y) \sim GLLiM_{\boldsymbol{\theta}}$ et $\boldsymbol{\epsilon}$ un bruit gaussien indépendant, de covariance $\boldsymbol{\Sigma}$. Alors $(X, aY + \mathbf{b} + \boldsymbol{\epsilon})$ suit la loi $GLLiM_{\boldsymbol{\theta}'}$, où*

$$\begin{aligned} \mathbf{A}'_k &= a\mathbf{A}_k \\ \mathbf{b}'_k &= a\mathbf{b}_k + \mathbf{b} \\ \boldsymbol{\Sigma}'_k &= a^2\boldsymbol{\Sigma}_k + \boldsymbol{\Sigma} \end{aligned}$$

et $\pi_k, \mathbf{c}_k, \boldsymbol{\Gamma}_k$ sont inchangés.

Démonstration. Par définition,

$$\begin{aligned} aY + \mathbf{b} + \boldsymbol{\epsilon} &= a \sum_{k=1}^K \mathbb{1}_{Z=k} (\mathbf{A}_k X + \mathbf{b}_k + \boldsymbol{\epsilon}_k) + \mathbf{b} + \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \sum_{k=1}^K \mathbb{1}_{Z=k} (a\mathbf{A}_k X + (a\mathbf{b}_k + \mathbf{b}) + (a\boldsymbol{\epsilon}_k + \boldsymbol{\epsilon})) \end{aligned}$$

Comme $\boldsymbol{\epsilon}$ et $\boldsymbol{\epsilon}_k$ sont indépendants, $a\boldsymbol{\epsilon}_k + \boldsymbol{\epsilon}$ suit une loi gaussienne centrée de covariance $\boldsymbol{\Sigma}'_k$, et reste indépendante de X et Y . Le dernier terme suit donc bien une loi $GLLiM_{\boldsymbol{\theta}'}$. \square

On peut donc n'effectuer l'apprentissage qu'une seule fois. Notons $\sigma_{train} > 0$ l'écart-type choisit pour générer le jeu d'apprentissage \mathcal{D} (et $\boldsymbol{\Sigma}_{train} := \sigma_{train}^2 I_D$). Une fois l'apprentissage effectué, étant donnée une observation \mathbf{y}_{obs} et un écart-type $\boldsymbol{\sigma}_{obs}$, on applique donc la proposition précédente au modèle GLLiM avec $a = 1$, $\mathbf{b} = 0$ et $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}_{obs}^2 - \sigma_{train}^2)$, puis on calcule à nouveau le paramètre $\boldsymbol{\theta}^*$ du modèle inverse correspondant. Comme $\boldsymbol{\theta}^*$ s'exprime simplement en fonction de $\boldsymbol{\theta}$, le coût en temps de calcul de cette étape supplémentaire n'est pas pénalisant. Remarquons qu'il faut alors choisir σ_{train} inférieur à tous les écart-types $\boldsymbol{\sigma}_{obs}$. Dans la pratique, pour simplifier, nous avons préféré utiliser $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}_{obs}^2)$, ce qui entraîne que la variance réellement utilisée pour l'inversion d'une observation est $\boldsymbol{\sigma}_{obs}^2 + \sigma_{train}^2$. En général, σ_{train} est choisi pour être négligeable devant $\boldsymbol{\sigma}_{obs}$, et cela n'a donc pas d'influence majeure.

Remarques sur le comportement asymptotique du niveau de bruit

On s'intéresse maintenant à l'influence du bruit $\boldsymbol{\Sigma}$ du modèle 1.1. Ce bruit est souvent fixé par l'application, mais, comme nous le verrons plus loin (section 1.3.1), il peut aussi être intéressant de le contrôler. Le niveau de bruit influe directement sur la prédiction. On peut en avoir une première intuition en considérant les deux termes de la loi a-posteriori $p(\mathbf{x})$ et $p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{y}; F(\mathbf{x}), \boldsymbol{\Sigma})$: si le niveau de bruit est important, la valeur de $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ est faible devant $p(\mathbf{x})$ et c'est le prior qui domine. Inversement, un niveau de bruit faible donne plus d'importance à l'adéquation du modèle aux données. On propose dans ce paragraphe de vérifier cette idée, pour le modèle GLLiM. Commençons par le comportement d'une composante du mélange.

Lemme 1.1.1. *En reprenant les notations du modèle GLLiM, soit $Y = \mathbf{A}X + \mathbf{b} + \boldsymbol{\epsilon}$, où $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{\Sigma})$, $X \sim \mathcal{N}(\mathbf{c}, \boldsymbol{\Gamma})$ (X et $\boldsymbol{\epsilon}$ étant indépendants). On sait alors que $X|Y = \mathbf{y}$ suit une loi $\mu := \mathcal{N}(\mathbf{A}^*\mathbf{y} + \mathbf{b}^*, \boldsymbol{\Sigma}^*)$*

(avec les notations de 1.4). Supposons que $\mathbf{\Gamma}$ et $\mathbf{\Sigma}$ sont des homothéties : $\mathbf{\Sigma} = \sigma I_D$, $\mathbf{\Gamma} = \gamma I_L$, et que \mathbf{A} est injective. On note $\mu_{\sigma,\gamma} := \mu$. On a alors les résultats asymptotiques suivants :

$$\mu_{\sigma,\gamma} \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} \mathcal{N}(\mathbf{c}, \mathbf{\Gamma}) \quad (1.7)$$

$$\mu_{\sigma,\gamma} \xrightarrow{\gamma \rightarrow +\infty} \mathcal{N}(({}^t\mathbf{A}\mathbf{A})^{-1} {}^t\mathbf{A}(\mathbf{y} - \mathbf{b}), \sigma({}^t\mathbf{A}\mathbf{A})^{-1}) \quad (1.8)$$

On retrouve le prior pour l'équation 1.7, et la formule de régression linéaire standard pour l'équation 1.8.

Démonstration. En utilisant la forme particulière de $\mathbf{\Gamma}$ et $\mathbf{\Sigma}$, on a

$$\begin{aligned} \mathbf{\Sigma}^* &= \left(\frac{1}{\gamma} I_L + \frac{1}{\sigma} {}^t\mathbf{A}\mathbf{A}\right)^{-1} \\ \mathbf{A}^* &= \left(\frac{\sigma}{\gamma} I_L + {}^t\mathbf{A}\mathbf{A}\right)^{-1} {}^t\mathbf{A} \\ \mathbf{b}^* &= (I_L + \frac{\gamma}{\sigma} {}^t\mathbf{A}\mathbf{A})^{-1} \mathbf{c} - \mathbf{A}^* \mathbf{b} \end{aligned}$$

Donc,

$$\begin{aligned} \mathbf{\Sigma}^* &\xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} \gamma I_L = \mathbf{\Gamma} \\ \mathbf{A}^* &= \frac{1}{\sigma} \left(\frac{1}{\gamma} I_L + \frac{1}{\sigma} {}^t\mathbf{A}\mathbf{A}\right)^{-1} \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} 0 \\ \mathbf{b}^* &\xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} \mathbf{c} \end{aligned}$$

D'où 1.7. De même,

$$\begin{aligned} \mathbf{\Sigma}^* &\xrightarrow{\gamma \rightarrow +\infty} \sigma({}^t\mathbf{A}\mathbf{A})^{-1} \\ \mathbf{A}^* &\xrightarrow{\gamma \rightarrow +\infty} ({}^t\mathbf{A}\mathbf{A})^{-1} {}^t\mathbf{A} \\ \mathbf{b}^* &= \frac{1}{\gamma} \left(\frac{1}{\gamma} I_L + \frac{1}{\sigma} {}^t\mathbf{A}\mathbf{A}\right)^{-1} \mathbf{c} - \mathbf{A}^* \mathbf{b} \xrightarrow{\gamma \rightarrow +\infty} -({}^t\mathbf{A}\mathbf{A})^{-1} {}^t\mathbf{A}\mathbf{b} \end{aligned}$$

D'où 1.8. □

Revenant au mélange entier, on peut généraliser le résultat 1.7 avec une hypothèse supplémentaire.

Lemme 1.1.2. Soit $(X, Y) \sim GLLiM_\theta$. Supposons que, pour tout $k = 1 \dots K$, $\mathbf{\Sigma}_k = \sigma I_D$. Alors

$$p(X = \mathbf{x} | Y = \mathbf{y}) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k)$$

Démonstration. On a

$$\mathbf{\Gamma}_k^{*-1} = \frac{1}{\sigma} (I_D + \frac{1}{\sigma} \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k {}^t\mathbf{A}_k)^{-1}$$

Donc,

$$\mathbf{\Gamma}_k^{*-1} \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} 0$$

Et,

$$|\mathbf{\Gamma}_k^{*-1}| = \frac{1}{\sigma^D} r_k(\sigma)$$

où $r_k(\sigma) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} 1$ Donc,

$$\alpha_k^*(\mathbf{y}) = \frac{\beta_k}{\sum_{k=1}^K \beta_k} \quad , \quad \beta_k := \pi_k C \sqrt{\frac{1}{\sigma^D} \tilde{r}_k(\sigma)}$$

où C est une constante indépendante de k , et $\tilde{r}_k(\sigma) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} 1$. Finalement, $\alpha_k^*(\mathbf{y}) \xrightarrow{\sigma \rightarrow +\infty} \pi_k$. Le lemme 1.1.1 appliquée à chaque composante permet de conclure. □

1.1.5 Conclusion

Nous avons présenté le modèle GLLiM et les propriétés théoriques qui le rendent attractif dans un contexte d'inversion bayésienne. Bien que tirant son origine d'une approche statistique, ce modèle admet aussi une interprétation analytique intéressante. L'espérance conditionnelle de Y sachant X peut être vue comme une approximation déterministe de la fonctionnelle F à inverser. La théorie statistique fournit un moyen de choisir automatiquement les paramètres du modèle GLLiM, via l'algorithme EM, mais on pourrait aussi s'intéresser directement à cette approximation. On pourrait par exemple essayer de construire un jeu de paramètres θ directement à partir de F , en utilisant l'approximation locale de F par sa différentielle. En interprétant les composantes comme une partition de l'espace \mathcal{X} , on pourrait aussi étudier le comportement de l'approximation quand $K \rightarrow \infty$ et que la partition s'affine.

Dans la suite, nous nous concentrons sur l'aspect méthodologique, et nous présentons maintenant les deux principales contributions de ce manuscrit.

1.2 Prise en compte de solutions multiples

Le modèle GLLiM a déjà été utilisé dans différents contextes d'inversion de modèle ([Perthame et al., 2018, Deleforge et al., 2015]), mais ces précédents travaux utilisaient le modèle comme estimateur ponctuel (moyenne de la loi a-posteriori) et ne profitaient pas de l'information portée par la loi a-posteriori complète disponible (1.4). Dans cette section, nous exploitons la nature de cette loi (GMM) pour prendre en compte le caractère éventuellement multi-modal de notre problème. La multi-modalité peut provenir de différentes sources. Un premier exemple serait fourni par un modèle physique non injectif : dans ce cas, si X a une loi a-priori uniforme, on vérifie facilement que les extrema de la loi a-posteriori sont exactement les solutions du problème inverse (au sens usuel, déterministe). Un autre exemple de multi-modalité peut venir d'un modèle physique peu contraint : dans ce cas, la variance de la loi a-posteriori peut être importante, et même si la distribution peut rester uni-modale au sens strict du terme, son mode peut être éloigné de la moyenne. Les deux cas montrent que la prédiction par la moyenne de la loi a-posteriori n'est pas toujours pertinente, ou du moins peut être incomplète. Or, la loi a-posteriori donnée par le modèle GLLiM fournit naturellement un outil pouvant modéliser des situations multi-modales. C'est une caractéristique générale des modèles de mélanges, d'où leur utilisation courante dans des problèmes de classification. La première piste que nous développons (section 1.2.1) est donc l'utilisation des centroïdes comme prédiction complémentaire à la moyenne. Nous verrons que, si l'idée est naturelle, sa mise en pratique n'est pas si aisée. Nous proposons donc d'utiliser un algorithme de fusion (section 1.2.2) qui améliore et simplifie l'utilisation des centroïdes. La section 1.2.3 propose un post-traitement exploitant la régularité d'une série d'observations. Enfin, au-delà de l'utilisation de la variance comme mesure de l'incertitude, la section 1.2.4 étudie des indicateurs dédiés à la détection de solutions multiples.

1.2.1 Prédictions par les centroïdes

Dans le cas d'un problème inverse, la forme de la loi a-posteriori fournie par GLLiM est directement reliée aux solutions multiples. En effet, étant donnée une observation \mathbf{y}_{obs} , le centre d'une composante dans la loi a-posteriori s'obtient par l'inversion de la transformation linéaire $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{A}_k \mathbf{x} + \mathbf{b}_k$, du moins de manière approchée. La proposition 1.1.1 (cas $\Gamma \mapsto +\infty$) appuie cette idée, ainsi que l'égalité suivante :

$$\mathbf{A}_k^*(\mathbf{A}_k \mathbf{x} + \mathbf{b}_k) + \mathbf{b}_k^* = \mathbf{x} + \Sigma_k^* \Gamma_k^{-1} (\mathbf{c}_k - \mathbf{x})$$

Ainsi, au voisinage de \mathbf{c}_k , l'application affine $\mathbf{y} \mapsto \mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k^*$ est l'inverse de $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{A}_k \mathbf{x} + \mathbf{b}_k$.

De plus, le poids $\alpha_k^*(\mathbf{y})$ joue un rôle de sélection. En effet, il sera élevé pour les composantes avec un poids a-priori π_k important et proches de l'observation, au sens de la distance de Mahalanobis entre \mathbf{y}_{obs} et \mathbf{c}_k^* , pondérée par la covariance Γ_k^* . Dans un cas multi-modal, plusieurs composantes peuvent donc être activées, et les centroïdes $\mathbf{A}_k^* \mathbf{y}_{obs} + \mathbf{b}_k^*$ concernés sont alors des estimateurs des solutions multiples. A l'inverse, dans un cas uni-modal, on observe qu'une seule composante est réellement activée (c'est à dire que son poids domine largement celui des autres composantes), ce qui entraîne que le prédicteur $\bar{\mathbf{x}}_G$ est en fait sensiblement égal au centroïde de cette composante.

Prédiction par les centroïdes

On pourrait donc utiliser les centroïdes comme prédictions alternatives. Cela demande alors de fixer un critère de sélection : en effet parmi les K composantes du mélange, seul un sous-ensemble restreint va être pertinent pour une observation donnée. On peut imaginer deux approches :

- ne garder que les K_0 meilleures composantes, où K_0 est un nombre de solutions acceptables à fixer
- ne garder que les composantes avec un poids supérieur à un certain seuil.

La deuxième approche introduit un paramètre arbitraire et donne un nombre variable de solutions, ce qui ne facilite pas l'exploitation des résultats (notamment dans un contexte d'inversion massive). La première approche semble plus pertinente, surtout si l'on dispose d'une borne a-priori, dépendant du contexte d'inversion, sur le nombre de solutions multiples. Cependant, cette méthode peut en fait échouer à retrouver toutes les solutions attendues. En effet, deux composantes proches, correspondant à la même solution \mathbf{x} , peuvent

être activées simultanément. Le nombre de composantes actives dépasse alors strictement K_0 , et il n’y a pas de garantie que les K_0 meilleurs composantes fournissent les K_0 solutions distinctes. La section suivante présente un exemple simple où ce phénomène apparaît.

Prédiction par les modes

Plus généralement, on pourrait s’intéresser aux modes de la loi a-posteriori, c’est à dire aux extrema locaux de sa densité. Intuitivement, pour un modèle de mélange gaussien, centroïdes et modes sont similaires, mais ce n’est pas le cas en général. La recherche des modes d’un mélange est en fait un sujet à part entière (voir par exemple [Ray and Lindsay, 2005]). Contrairement à la moyenne, il n’y a pas de formule analytique pour les exprimer. Plusieurs heuristiques ont été proposées pour les découvrir : citons par exemple [Carreira-Perpinan, 2000] qui suggère un algorithme de point fixe, initialisé en partant de chaque centroïde. Nous n’avons pas étudié en détail cette approche, notamment car, contrairement à la méthode proposée plus loin, elle ne peut pas fournir un équivalent de la variance associée au centroïde. En plus de fournir un indicateur de l’incertitude, la variance est nécessaire pour l’étape d’échantillonnage que nous décrirons plus loin (section 1.3).

1.2.2 Fusion d’une loi de mélange gaussien

Nous proposons ici une étape supplémentaire pour exploiter la loi a-posteriori dans l’étude de solutions multiples. Comme évoqué plus haut, les deux principaux écueils rencontrés lors de l’utilisation directe des centroïdes sont :

- la difficulté de différencier les composantes actifs des composantes superflus,
- la présence potentielle de plusieurs composantes prédisant des solutions similaires.

Pour pallier ce problème, nous suggérons de transformer le mélange complet (à K composantes) en un mélange réduit à seulement K_0 composantes, K_0 étant le nombre maximal de solutions multiples attendues, fixé par le contexte. Cette opération est connue dans la littérature sous le nom de fusion de mélange (voir [Hennig, 2010] pour une vue d’ensemble). Parmi les multiples approches envisageables, nous retenons l’algorithme proposé dans [Runnalls, 2007]. L’idée générale consiste à réduire progressivement le nombre de composantes, en choisissant à chaque itération celui qui minimise une certaine mesure de la différence entre le mélange initial et le mélange obtenu après fusion de ce composant. Plus précisément, l’algorithme repose sur les étapes suivantes :

- étant données deux composantes $(\pi_i, \mathbf{c}_i, \mathbf{\Gamma}_i)$ et $(\pi_j, \mathbf{c}_j, \mathbf{\Gamma}_j)$, les fusionner en une seule gaussienne, de façon à préserver le poids, la moyenne et la covariance. Cela est donnée par les formules

$$\begin{aligned}\pi &= \pi_i + \pi_j \\ \mathbf{c} &= \frac{1}{\pi_i + \pi_j} (\pi_i \mathbf{c}_i + \pi_j \mathbf{c}_j) \\ \mathbf{\Gamma} &= \frac{1}{\pi_i + \pi_j} (\pi_i \mathbf{\Gamma}_i + \pi_j \mathbf{\Gamma}_j) + \frac{\pi_i \pi_j}{(\pi_i + \pi_j)^2} (\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j) {}^t (\mathbf{c}_i - \mathbf{c}_j)\end{aligned}$$

- à chaque itération, choisir les deux composantes à fusionner en minimisant la distance de Kullback-Leibler entre la loi courante et celle obtenue après fusion de ces deux composantes. Notons, pour être précis, que seule une majoration de la distance de Kullback-Leibler entre deux mélanges gaussiens est disponible sous forme close : cette majoration est utilisée à la place de la distance exacte.

La répétition de ces étapes permet finalement d’obtenir un mélange à K_0 composantes, de paramètres notés $(\pi_k^m, \mathbf{c}_k^m, \mathbf{\Gamma}_k^m)_{k=1..K_0}$. Nous proposons donc d’appliquer cet algorithme à la loi a-posteriori p_G donnée par GLLiM (1.4) et d’utiliser comme prédictions les centroïdes du mélange fusionné, que nous notons

$$\hat{\mathbf{x}}_{centroid,k}(\mathbf{y}) := \mathbf{c}_k^m$$

La covariance associée $\mathbf{\Gamma}_k^m$ est utilisée comme mesure d’incertitude sur la solution.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous restreindrons par la suite au cas $K_0 = 2$, qui correspond au cas le plus simple au-delà d'une loi uni-modale. Il s'agit d'une hypothèse simplificatrice, justifiée par la connaissance sur le modèle physique. De manière générale, on s'intéresse surtout à des modèles physiques raisonnablement contraints avant l'intervention d'une méthode d'inversion. On note donc dans la suite $\hat{\mathbf{x}}_{centroid,1} := \mathbf{c}_1^m$ et $\hat{\mathbf{x}}_{centroid,2} := \mathbf{c}_2^m$ les prédictions issue de la fusion (de poids et covariance respectifs $(\pi_1^m, \mathbf{\Gamma}_1^m)$ et $(\pi_2^m, \mathbf{\Gamma}_2^m)$). La comparaison entre la moyenne et ces deux centroïdes permet d'analyser la multi-modalité de la loi a-posteriori. En effet, une propriété importante de l'algorithme de fusion est qu'il préserve la moyenne, ce qui implique

$$\bar{\mathbf{x}}_G(\mathbf{y}) = \pi_1^m \hat{\mathbf{x}}_{centroid,1}(\mathbf{y}) + \pi_2^m \hat{\mathbf{x}}_{centroid,2}(\mathbf{y})$$

Ainsi, si la moyenne $\bar{\mathbf{x}}_G(\mathbf{y})$ est proche de l'un des deux centroïdes, le poids associé est proche de un et l'autre proche de zéro, ce qui suggère une distribution uni-modale. A l'inverse, un écart important entre la moyenne et les centroïdes révèle des solutions multiples.

Illustration

La figure 1.5 illustre cet algorithme sur une fonctionnelle $F : x \mapsto 0.5(1 + \cos(3\pi x))$ ($L = 1, D = 1$) présentant trois solutions sur $[0, 1]$ pour chaque observation $y \in [0, 1]$. La méthodologie décrite dans la partie précédente est appliquée (avec $K = 40$) sur une série d'observations $(y_{obs,n} = F(x_{obs,n}))_{n=1..100}$ générée synthétiquement. L'algorithme de fusion est appliqué avec $K_0 = 3$. Les 3 meilleurs centroïdes avant fusion et les 3 centroïdes après fusion sont comparés aux solutions attendues. Comme évoqué plus haut, les centroïdes sans fusion peuvent manquer une solution (indices $n \in \llbracket 50, 70 \rrbracket$) ce qui est corrigé par la fusion. On note aussi que la prédiction des solutions pour les indices $n \in \llbracket 55, 65 \rrbracket$ est améliorée par la fusion.

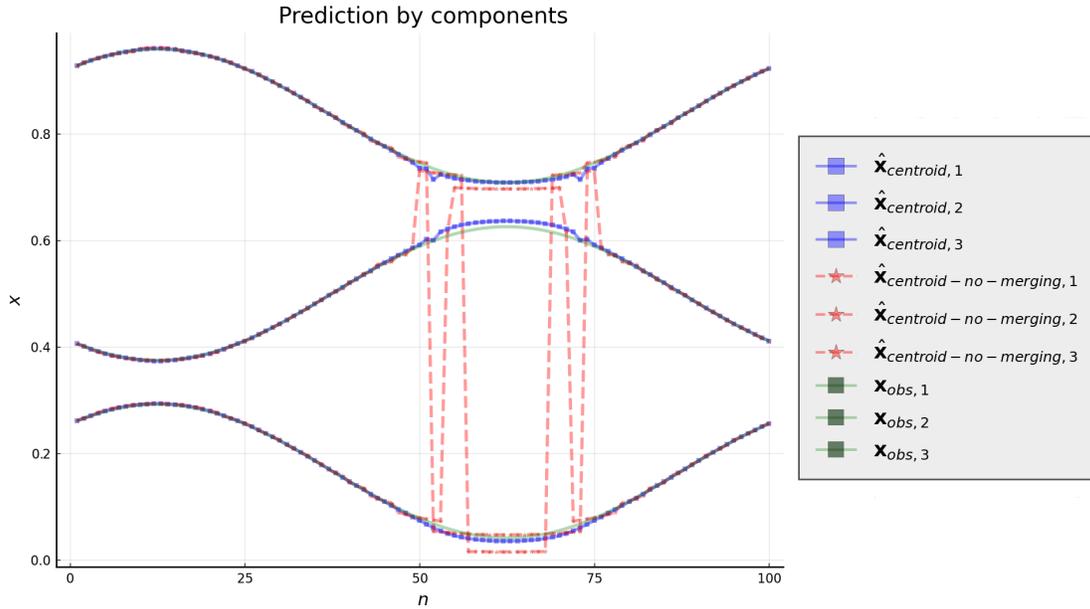


FIGURE 1.5 – Comparaison entre les centroïdes avant fusion (en rouge) et les centroïdes après fusion (en bleu). Les vraies solutions sont en vert.

Complexité de l'algorithme de fusion

L'algorithme de fusion utilisé a une complexité environ cubique en K : si K_0 est petit devant K , le nombre d'itérations est d'environ K , et chaque itération effectue environ K^2 opérations (une pour chaque

Fusion d'un mélange gaussien

```
# select K_0 and the threshold on components weights
options = Predictions.MergingOptions(2, 1e-10)

# merge the GMM given by its weights, means and covariances
Predictions.merge(options, weights, means, covariances)
```

pair de composantes). Si K est grand, comme l'algorithme doit être exécuté pour chaque observation, le coût en temps peut devenir problématique. Heureusement, on observe que parmi les K composantes du mélange, seuls une poignée sont activés pour une observation donnée. On peut donc optimiser la fusion en groupant en une étape préliminaire toutes les composantes de poids faible, inférieur à un seuil. Dans la pratique un seuil de 10^{-10} est utilisé et suffit à contrôler le temps de calcul de cette étape.

1.2.3 Permutation des solutions multiples

On s'intéresse ici à l'inversion d'une série d'observations $(\mathbf{y}_{obs,n})_{n=1..N}$ où le contexte impose une certaine régularité. Dans notre application, il s'agira d'un spectre : un même matériau observé pour des longueurs d'ondes variables. Les propriétés physiques sont alors supposées varier continûment en fonction de la longueur d'onde. Or, la méthodologie proposée plus haut ne tient pas compte de cette régularité (chaque inversion est traitée de façon indépendante) et les centroïdes prédits peuvent varier abruptement. Cela vient du fait que l'étiquette associée à chaque centroïde ($k \in \llbracket 1, K_0 \rrbracket$) est attribuée de façon arbitraire : si $(\mathbf{x}_{obs,k}^{(n)})_{k=1..K_0}$ sont les solutions attendues, l'algorithme renvoie une série d'*ensembles* de solutions $\mathcal{X}_n := \left\{ \hat{\mathbf{x}}_{centroid,k}^{(n)}, k = 1..K_0 \right\}$ sans moyen naturel d'identifier chaque solution.

On propose donc d'exploiter la régularité de la série pour permuter si nécessaire les centroïdes. Pour cela, on procède itérativement en choisissant de proche en proche la permutation qui minimise la distance dans \mathbb{R}^L entre deux voisins. Plus précisément, on choisit $\kappa_1 := id \in \mathfrak{S}_{K_0}$, on définit récursivement

$$\kappa_{n+1} = \arg \min_{\kappa \in \mathfrak{S}_{K_0}} \sum_{k=1}^{K_0} \left\| \hat{\mathbf{x}}_{centroid,\kappa(k)}^{(n+1)} - \hat{\mathbf{x}}_{centroid,\kappa_n(k)}^{(n)} \right\|$$

et on renvoie, pour chaque observation, les solutions permutées

$$\left(\hat{\mathbf{x}}_{centroid,\kappa_n(k)}^{(n)} \right)_{k=1..K_0}$$

Insistons sur le fait que cette opération ne modifie pas les valeurs numériques des solutions, mais simplement leur ordre.

La figure 1.6 illustre sur un exemple simple la méthode proposée. On considère la fonctionnelle $F : x \mapsto (x - 0.5)^2$ qui admet pour chaque observation deux solutions $\mathbf{x}_{obs,1}$ et $\mathbf{x}_{obs,2} := 1 - \mathbf{x}_{obs,1}$, et on applique la procédure d'inversion, avec fusion en $K_0 = 2$ composantes. Les deux centroïdes prédits sans permutation présentent des inversions qui détériorent la régularité de la prédiction. L'algorithme de lissage permet de corriger cela et de présenter des solutions plus cohérentes pour l'utilisateur. Remarquons que la prédiction par les centroïdes est imprécise pour x au voisinage de 0.5. Il s'agit des points où les deux solutions de $F(x) = y$ se recoupent. La loi a-posteriori devient alors uni-modale, et l'approximation par un mélange de gaussiennes ne semble pas pouvoir distinguer précisément les deux modes. Dans un tel cas, la prédiction par les centroïdes n'est pas pertinente : la moyenne de la loi a-posteriori sera utilisée.

Permutation des centroïdes

```
# select the methods to regularize, as a common prefix
method_prefixes = [ Schemes.GllimMergedCentroid("") ]

# apply the regularization on the predictions
Pipeline.regularize_inversions!(predictions, method_prefixes)
```

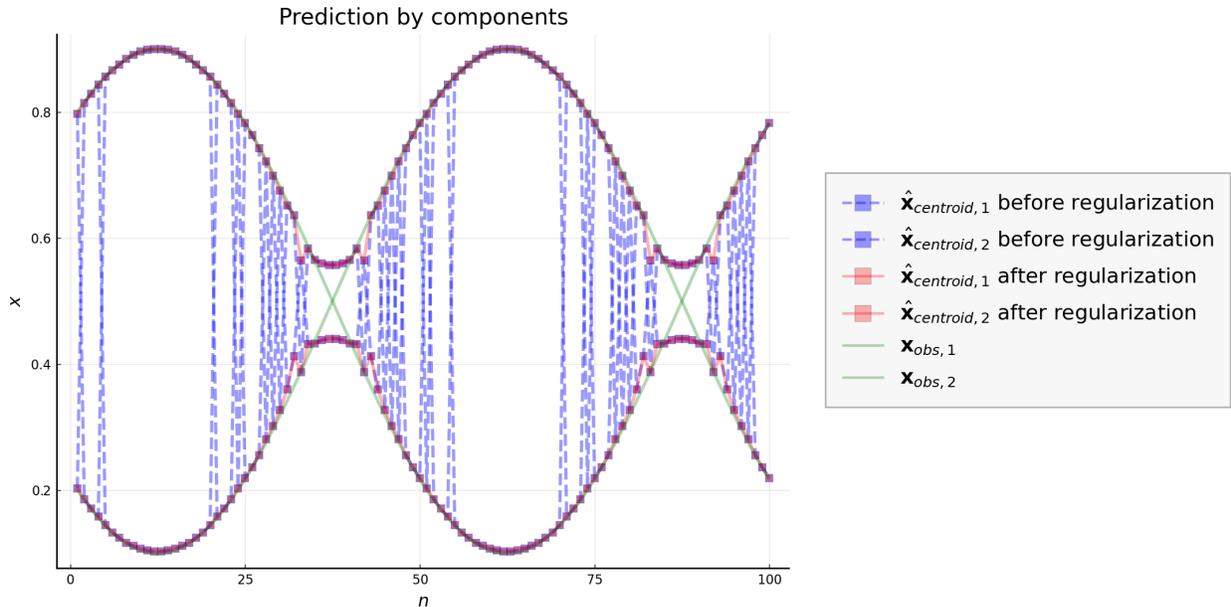


FIGURE 1.6 – Influence de la permutation des prédictions par les centroïdes (avant permutation en bleu, après permutation en rouge). Les vraies solutions sont en vert.

1.2.4 Détection de solutions multiples

Nous avons présentés plus haut une approche permettant de prendre en compte d'éventuelles solutions multiples. La comparaison entre les centroïdes ($\hat{\mathbf{x}}_{centroid,1}, \hat{\mathbf{x}}_{centroid,2}$) et la moyenne ($\bar{\mathbf{x}}_G$) permet d'évaluer qualitativement la présence d'une solution double. En restant dans cette idée, nous explorons deux approches fournissant un indicateur numérique supplémentaire pour discerner les cas multi-modaux.

Indicateur de non-uniformité

Nous commençons par reprendre un indicateur proposé dans [Schmidt and Fernando, 2015] pour comparer la loi a-posteriori à la loi uniforme. Le but ici n'est donc plus vraiment de détecter des solutions multiples, mais plutôt d'évaluer à quel point les observations et le modèle contraignent les paramètres physiques. Comme évoqué plus haut, le cas d'une distribution a-posteriori peu contrainte n'est pas rare dans un contexte d'inversion : le modèle physique peut être imparfait, et les observations peuvent être mesurées avec une incertitude assez importante. Pouvoir détecter de tels cas est donc nécessaire pour l'utilisateur. L'indicateur repose sur les cumulants de la loi a-posteriori, estimable par les k-statistiques de Fisher ([Fisher, 1930, Kenney and Keeping, 1951]). Plus précisément, si x_1, \dots, x_P est un échantillon d'une v.a. réelle X , si on note $m_1 :=$

$\frac{1}{M} \sum_{p=1}^P x_p$ la moyenne empirique et $m_i := \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P (x_p - m_1)^i$ les moments empiriques centrés, les quatre premières k-statistiques de Fisher k_i sont données par

$$\begin{aligned} k_1 &= m_1 \\ k_2 &= \frac{P}{P-1} m_2 \\ k_3 &= \frac{P^2}{(P-1)(P-2)} m_3 \\ k_4 &= \frac{P^2}{(P-1)(P-2)(P-3)} ((P+1)m_4 - 3(P-1)m_2^2) \end{aligned}$$

Comme la loi uniforme admet les quatre premiers cumulants $0.5, \frac{1}{12}, 0, -\frac{1}{120}$, l'indicateur de non-uniformité \tilde{k} est défini par

$$\tilde{k} := \max \left(\frac{|k_1 - 0.5|}{0.5}, \frac{|k_2 - \frac{1}{12}|}{\frac{1}{12}}, \frac{|k_3|}{\frac{1}{60}}, \frac{|k_4 + \frac{1}{120}|}{\frac{1}{120}} \right)$$

Un indicateur proche de zéro suggère alors que la loi a-posteriori est peu contrainte. A l'inverse, observons que, si $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ avec $\mu \in [0, 1]$ et $\sigma^2 \leq \frac{2}{12}$, alors, comme les quatre premiers cumulants de X valent $(\mu, \sigma^2, 0, 0)$, l'indicateur (théorique) de non-uniformité vaut 1. Heuristiquement, on peut donc penser qu'un indicateur proche de 1 indique une distribution plutôt bien contrainte et uni-modale, si le support de la loi a-posteriori est inclus dans $[0, 1]^L$.

Remarquons que cette indicateur nécessite de pouvoir échantillonner la loi a-posteriori. L'approche MCMC utilisée dans [Schmidt and Fernando, 2015] fournit directement des échantillons. Dans notre cas, on peut utiliser la loi GLLiM a-posteriori pour les générer facilement. Dans la pratique, on utilise plutôt le résultat de l'échantillonnage préférentiel introduit dans la prochaine section (par la méthode Sampling Importance Resampling).

Nous présentons une illustration de cet indicateur dans la section 2.3.1.

Indicateur de non uniformité de la loi a-posteriori

```
# choose the number of samples to use
params = NonUniformityParams(10_000)

# use Importance Sampling Resampling to generate J = 10_000
# samples from the posterior from weighted samples (X_is, w_is)
X = Probas.resampling(X_is, w_is, params.J)

# compute the non uniformity criterion for each variable
ks = zeros(L)
for l in 1:L
    ks[l] = Indics.non_uniformity(X[l, :])
end
```

Indicateur de dispersion

Nous cherchons ici à généraliser la discussion commencée dans la section 1.2.2 en proposant un indicateur résumant l'information portée par les centroïdes et la moyenne. La prochaine section définissant de

nouveaux estimateurs des solutions, nous étendons la donnée des centroïdes et de la moyenne à un ensemble $\mathcal{X} := \{\mathbf{x}_i\}_{i=1..I} \subset \mathbb{R}^L$ de solutions de l'inversion d'une observation donnée \mathbf{y}_{obs} . Nous souhaitons définir un indicateur dépendant de \mathcal{X} indiquant si \mathcal{X} contient ou non plusieurs solutions réellement distinctes et pertinentes. Pour cela, nous proposons d'envisager \mathcal{X} comme le support d'une loi discrète X définie par $p_i := p(X = \mathbf{x}_i)$, où p_i modélise la pertinence de la solution \mathbf{x}_i . Nous choisissons comme critère l'erreur de reconstruction :

$$p_i := \frac{\tilde{p}_i}{\sum_{i=1}^I \tilde{p}_i} \quad , \quad \tilde{p}_i := \exp\left(-\frac{1}{2} \|F(\mathbf{x}_i) - \mathbf{y}_{obs}\|^2\right)$$

Interprétant la variance de X comme une dispersion, nous proposons donc l'indicateur

$$V := \frac{1}{L} \sum_{i=1}^I p_i \|\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}}\|_2^2$$

où $\bar{\mathbf{x}} = \sum_{i=1}^I p_i \mathbf{x}_i$ est la moyenne de X . V est reliée à X par la relation $V = \frac{1}{L} \text{Trace}(\text{Var}(X))$. Dans le cas raisonnable où $\mathcal{X} \subset [0, 1]^L$, on dispose d'une majoration (prouvée par exemple dans [Lim and McCann, 2020])

$$V \leq \frac{1}{4} - \frac{\|\bar{\mathbf{x}} - 0.5\|_2^2}{L}$$

ce qui incite à utiliser plutôt l'indicateur normalisé à valeurs dans $[0, 1]$

$$\tilde{V} := \frac{V}{\frac{1}{4} - \frac{\|\bar{\mathbf{x}} - 0.5\|_2^2}{L}}$$

Intuitivement, V sélectionne les solutions acceptables (au sens de la reconstruction de l'observation) et indique si elles sont en accord ou non : V est proche de zéro si et seulement si le problème est uni-modal.

Dans le cas où V est élevé, on est en présence de plusieurs solutions physiquement acceptables. En revanche, V ne permet pas de distinguer le cas de plusieurs solutions réellement distinctes et bien déterminées du cas pour lequel nous avons une seule solution mal déterminée, au sens où l'erreur de reconstruction varie peu autour de cette solution (par exemple quand la densité a-posteriori est localement approximativement uniforme). Nous proposons alors d'utiliser la moyenne (pondérée) $\bar{\mathbf{x}}$ des prédictions pour prendre ce phénomène en compte. Intuitivement, dans le cas d'un problème réellement multi-modal, la moyenne aura une forte erreur de reconstruction tandis qu'elle sera du même ordre de grandeur que les autres prédictions dans le cas d'une solution peu déterminée. Ainsi, nous retenons comme indicateur définitif

$$V_{disp} := \frac{\|F(\bar{\mathbf{x}}) - \mathbf{y}_{obs}\|}{\|\mathbf{y}_{obs}\|} \tilde{V}$$

Illustration Les figures 1.7 et 1.8 illustre le comportement de l'indicateur proposé sur deux fonctionnelles simples. La procédure d'inversion décrite plus haut est appliquée sur un jeu d'observations synthétiques. Les modes de prédictions retenus sont la prédiction par la moyenne GLLiM ($\bar{\mathbf{x}}_G$), la prédiction par les centroïdes ($\hat{\mathbf{x}}_{centroid,1}$ et $\hat{\mathbf{x}}_{centroid,2}$) et leur amélioration par échantillonnage préférentiel ($\bar{\mathbf{x}}_{IS-G}$, $\bar{\mathbf{x}}_{IS-centroid,1}$ et $\bar{\mathbf{x}}_{IS-centroid,2}$) définis plus loin (section 1.3), entraînant $I = 6$. La première fonctionnelle est $F(x) = \exp(x)$ ($L = D = 1$), donc injective, et \tilde{V} prend bien les valeurs faibles attendues. Le deuxième exemple reprend la fonctionnelle introduite dans la section 1.2.3, qui présente deux solutions pour chaque observation, à part en deux points de croisement. \tilde{V} retrouve bien cette disposition : on note la variation brusque autour des croisements.

Indicateur de dispersion des solutions

```
# given some predictions X_pred with associated reconstruction errors err_pred,
# form an array of weighted predictions
weighted_predictions = [ Indics.WeightedMean(x, err)
                        for (x,err) in zip(X_pred, err_pred) ]

# compute the dispersion and the weighted mean
dispersion, mean = Indics.dispersion(weighted_predictions)

# scale by the relative reconstruction error (context defines the physical model F)
v = Y_relative_err(context, jobs, mean, 1., 0.) * dispersion
```

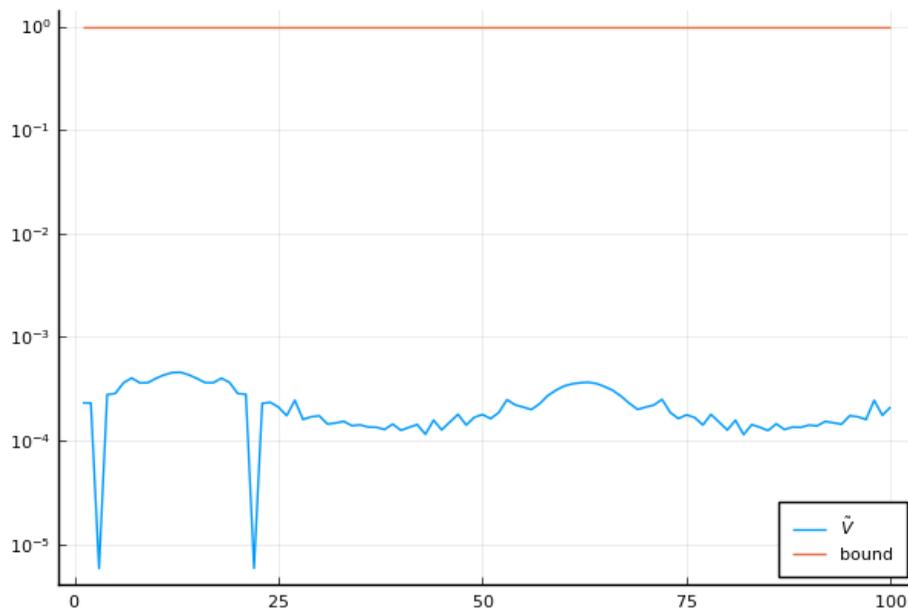


FIGURE 1.7 – Indice de dispersion dans un cas uni-modal. \tilde{V} est en bleu, la borne théorique (de valeur 1) est en orange. Le niveau général de l'indice est faible devant la valeur 1.

1.2.5 Conclusion

Nous avons présenté dans cette section comment exploiter le mélange GLLIM a-posteriori pour détecter et prédire des solutions multiples. Au lieu de se restreindre à une prédiction ponctuelle, l'approche générale proposée est donc de résumer l'information portée par la loi a-posteriori à un ensemble fini de solutions \mathcal{X} (qui sera étendu dans la prochaine section). On peut considérer qu'il s'agit d'un compromis entre exactitude mathématique et utilisation pratique : la prédiction la plus précise est en fait donnée par la loi a-posteriori complète, mais elle n'est pas exploitable telle quelle, surtout dans un cadre d'inversion massive. A l'opposé, la prédiction par la moyenne seule est simple et pratique, mais se révèle dans certains cas être trop grossière. La taille de \mathcal{X} est donc suffisante pour capter l'essentiel de la distribution tout en restant exploitable.

Dans la suite, on utilisera l'erreur de reconstruction relative comme critère pour évaluer la pertinence

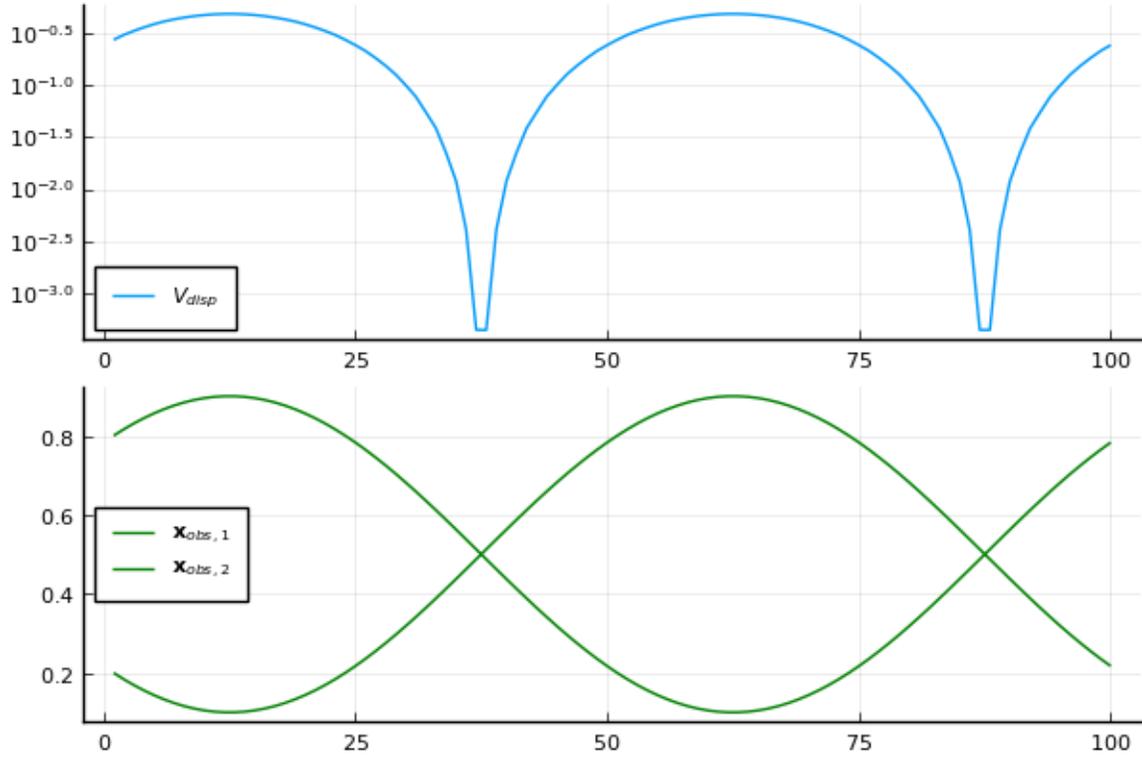


FIGURE 1.8 – Indice de dispersion dans un cas bi-modal. V_{disp} est en bleu, les solutions sont en verts. L'indice alterne entre des valeurs importantes (cas multi-modal) et plus faibles (cas uni-modal).

d'une solution dans \mathcal{X} , définie par

$$R(\mathbf{x}) = \frac{\|F(\mathbf{x}) - \mathbf{y}_{obs}\|}{\|\mathbf{y}_{obs}\|}$$

qui reste calculable même si on ne dispose plus de la solution véritable.

1.3 Raffinement des prédictions par échantillonnage d'importance

Nous proposons dans cette section une autre exploitation de la loi GLLiM a-posteriori : l'utiliser comme loi de proposition dans une méthode d'échantillonnage préférentiel. Cette idée est motivée par deux remarques : tout d'abord, on observe expérimentalement que, sur un modèle complexe, très non linéaire, l'estimation paramétrique donnée par GLLiM n'est pas toujours suffisamment précise et entraîne des prédictions trop éloignées de la réalité. On souhaite donc pouvoir améliorer les résultats, tout en profitant de la première approximation fournie par GLLiM. D'un autre côté, les méthodes MCMC fournissent des résultats très précis, mais nécessitent d'échantillonner un grand nombre de points. On aimerait donc conserver la précision des méthodes d'échantillonnage, tout en diminuant le nombre de simulations requises pour rester attractif dans un contexte d'inversion massive. Ces deux remarques trouvent un écho naturel dans la famille des méthodes dites d'échantillonnage préférentiel. L'idée générale est d'utiliser une loi d'importance (ou de proposition) pour laquelle il est facile d'obtenir un échantillon. Cet échantillon est ensuite pondéré pour obtenir un échantillon de la loi cible.

L'échantillon préférentiel (Importance Sampling, IS) est une méthode bien connue en statistique, introduite dans [Marshall, 1956, Kloek and van Dijk, 1978] dans un contexte d'inférence bayésienne, puis développée plus tard dans [van Dijk and Kloek, 1980, Geweke, 1989]. Elle permet de calculer numériquement une espérance contre une loi complexe ou de générer des échantillons suivant une telle loi (méthode Importance Sampling Resampling, introduite dans [Rubin, 1987]). Elle peut être utilisée en temps que telle ou incluse dans un schéma plus général, comme dans les filtres particulières (voir [Gordon et al., 1993]). Elle est facile à implémenter et efficace en temps calcul, puisque tous les échantillons sont générés en parallèle, sans procédure itérative.

Depuis, plusieurs méthodes cherchent à améliorer l'efficacité d'IS en considérant une approche récursive : on les regroupe sous l'appellation d'échantillonnage préférentiel adaptatif (Adaptative Importance Sampling, AIS). L'idée générale est de procéder itérativement et d'introduire à chaque étape une modification de la loi de proposition pour prendre en compte la connaissance de loi cible gagnée à l'étape précédente. Plusieurs approches ont été proposées (voir [Bugallo et al., 2015] pour une vue d'ensemble exhaustive) : Population Monte-Carlo ([Cappe et al., 2004]), Adaptative Multiple Importance Sampling ([Cornuet et al., 2012]) ou Adaptative Population Importance Sampling ([Martino et al., 2015]) en sont des exemples. D'autres approches utilisent un modèle de mélange comme loi de proposition. Parmi elles, nous considérons la méthode *Incremental Mixture Importance Sampling* (IMIS), introduite dans [Steele et al., 2006] puis dans [Raftery and Bao, 2010, Fasiolo et al., 2018], qui ajoute séquentiellement au mélange une composante dans le voisinage du point de poids maximal.

Nous commençons par formaliser la méthode IS (section 1.3.1), avant de montrer comment l'adapter au cas de solutions multiples (section 1.3.2). Nous montrons ensuite comment adapter facilement la méthode proposée pour utiliser IMIS (section 1.3.3). La section 1.3.4 compare les deux méthodes et étudie numériquement leur performances respectives.

1.3.1 Échantillonnage préférentiel normalisé (IS)

On considère ici une loi à densité ϕ de laquelle on ne sait pas générer directement des échantillons, dite loi *cible*. On souhaite malgré tout calculer son espérance, et plus généralement les quantités de la forme $\mathbb{E}[f(X)]$, où $X \sim \phi$. La technique d'Importance Sampling repose sur l'observation suivante : si ψ est une autre densité (non nulle sur le support de ϕ), alors

$$\mathbb{E}[f(X)] = \int f(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int \frac{\phi(\mathbf{x})}{\psi(\mathbf{x})}f(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \mathbb{E}\left[\frac{\phi(X')}{\psi(X')}f(X')\right]$$

où $X' \sim \psi$. Dans le cas où on sait échantillonner ψ , la loi des grands nombres donne donc un estimateur simple de $\mathbb{E}[f(X)]$: si $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ est un échantillon de la loi ψ

$$\sum_{n=1}^N \frac{\phi(\mathbf{x}_n)}{\psi(\mathbf{x}_n)} f(\mathbf{x}_n) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}[f(X)] \quad (1.9)$$

On peut généraliser ce résultat même quand ϕ n'est connue qu'à une constante multiplicative près : $\phi(\mathbf{x}) = c\tilde{\phi}(\mathbf{x})$. En effet, on dispose de la proposition suivante :

Proposition 1.3.1 (Self Normalized Importance Sampling). *Si $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ est un échantillon de la loi ψ , en notant $w_i := \frac{\tilde{\phi}(\mathbf{x}_i)}{\psi(\mathbf{x}_i)}$, on a encore*

$$\frac{\sum_{n=1}^N w_i f(\mathbf{x}_n)}{\sum_{n=1}^N w_i} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mathbb{E}[f(X)]$$

Démonstration. On multiplie le numérateur et le dénominateur par c , puis on applique 1.9 au numérateur avec f et au dénominateur avec $f = 1$. \square

En pratique, l'efficacité de l'estimateur obtenu reste très dépendant du choix de ψ . [Kahn and Marshall, 1953] a montré que la densité qui minimise la variance de l'estimateur doit être proportionnelle à $\|f(\mathbf{x})\| \phi(\mathbf{x})$: il s'agit donc de trouver une loi de proposition proche de la loi cible, ce qui est en général difficile. Justement, dans notre cadre d'inversion bayésienne où $\phi = p(\mathbf{x} | \mathbf{y}) \propto p(\mathbf{y} | X = \mathbf{x})p(\mathbf{x})$, la loi GLLiM a-posteriori, qui est une bonne approximation de la loi cible, fournit un candidat naturel pour la loi de proposition. On propose donc d'appliquer 1.3.1 avec $\tilde{\phi}(\mathbf{x}) := p(\mathbf{y} | X = \mathbf{x})p(\mathbf{x})$ et $\psi(\mathbf{x}) = p_G(\mathbf{x} | Y = \mathbf{y})$ la loi a-posteriori obtenue dans 1.4. Comme ψ est alors une loi de mélange gaussien, il est facile de générer un échantillon $(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_I)$ de taille I suivant ψ , et de calculer l'estimateur de la moyenne (par Importance Sampling (IS), à l'aide de la loi GLLiM (G))

$$\bar{\mathbf{x}}_{IS-G}(\mathbf{y}) := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i \mathbf{x}_i \quad , \quad \text{avec } w_i := \frac{p(\mathbf{y} | X = \mathbf{x}_i)p(\mathbf{x}_i)}{p_G(\mathbf{x}_i | Y = \mathbf{y})}$$

De plus, en prenant $f : \mathbf{x} \mapsto (\mathbf{x} - \mu)^t(\mathbf{x} - \mu)$, où $\mu := \bar{\mathbf{x}}_{IS-G}(\mathbf{y})$, on obtient aussi un estimateur de la variance de la loi a-posteriori :

$$var(\mathbf{y}) := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i (\mathbf{x}_i - \mu)^t (\mathbf{x}_i - \mu)$$

En pratique, le choix de I permet un compromis entre précision mathématique et coût en temps de calcul (cf section 1.3.4 pour une comparaison entre la prédiction GLLiM seule, avec IS et avec IMIS). La durée de cette étape d'échantillonnage domine en effet le reste de la procédure, car, pour chaque observation, le calcul des poids demande d'évaluer I fois la fonctionnelle F et la loi de mélange GLLiM. En comparaison, la prédiction par la moyenne GLLiM simple ne demande qu'un calcul de moyenne et aucune évaluation de F .

Modification du bruit sur la loi de proposition

Nous nous intéressons à un cas extrême où la procédure décrite plus haut peut échouer. Si l'approximation GLLiM est trop éloignée de la vraie loi, par exemple sur un modèle complexe en très grande dimension, il peut arriver que la loi a-posteriori GLLiM concentre sa masse en dehors de $[0, 1]^L$. La figure 1.9 illustre ce problème : on considère comme fonctionnelle le modèle de Hapke F_D , paramétré par un jeu de géométries de taille D , et on mesure le taux de succès de l'inversion GLLiM quand D croît (c'est à dire quand les géométries choisies varient). Plus précisément, étant donnée une série d'observations $(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N \in \mathbb{R}^D)$ ($N = 1000$), et un rapport signal sur bruit $\alpha \in \{1, 5, 10, 50\}$, on prend comme écart-type pour l'observation n $\sigma_n = \frac{1}{\alpha} \mathbf{y}_n$, on calcule l'estimateur $\bar{\mathbf{x}}_G$ (le nombre de composants K du modèle GLLiM est fixé à 50) et on le considère comme valide quand il reste dans $[0, 1]^L$. Cette simulation montre deux tendances claires :

- l'augmentation de la dimension complexifie le modèle direct, ce qui en retour rend plus difficile l'inversion,
- un niveau de bruit plus fort (ratio signal sur bruit plus faible) améliore le taux de succès.

Importance Sampling (IS)

```
# choose the number of samples
params = Is.IsParams(10_000)

# choose the non uniformity parameters
non_uniformity_params = Is.NonUniformityParams(1_000)

# perform importance sampling
# model defines the proposition and target density
result, non_uniformity = Is.importance_sampling(model, params, non_uniformity_params)

# exploit the mean and the covariance of the target density
mean, cov = result.mean, result.cov
```

On peut expliquer ce phénomène en utilisant le lemme 1.1.1 : quand la dimension D augmente, le terme dans la prédiction lié à la regression linéaire de \mathbf{y}_{obs} peut s'éloigner de la valeur réelle, jusqu'à sortir de \mathcal{P} . Augmenter le bruit permet alors de donner plus d'importance à la loi a-priori (uniforme sur $[0, 1]^L$) et donc d'éviter des prédictions hors de \mathcal{P} .

Dans ce cas de figure, l'échantillonnage préférentiel peut échouer : si tous les échantillons de la loi GLLiM sont en dehors de \mathcal{P} (ne serait-ce que légèrement), les poids w_i seront nuls, ce qui donnera un estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IS-G}$ invalide. Pour pallier ce problème, on propose donc, comme évoqué plus haut, d'ajouter si nécessaire un bruit artificiel sur la loi de proposition. Plus précisément, en notant σ_{add} un tel niveau de bruit, étant donné une observation \mathbf{y}_{obs} et un écart-type σ_{obs} , on propose de calculer la loi GLLiM a-posteriori pour l'observation \mathbf{y}_{obs} et l'écart-type $\sigma_{obs} + \sigma_{add}$ et d'utiliser cette loi modifiée comme loi de proposition. Rappelons que, d'après la section 1.1.4, ce changement n'introduit pas de coût majeur en temps de calcul. De plus, comme seule la loi de proposition est modifiée, on conserve bien les propriétés théoriques de l'estimateur IS.

Ajout d'un bruit sur la loi de proposition

```
# the modification of the std is activated via the field 'additional_proposition_std'
# of the inversion options
mutable struct InversionParams
    # ... ignored fields

    # optional additional std to be add to the direct GLLiM model
    # used as proposition law in sampling steps (both mean and centroids).
    # Does not change the GLLiM standalone predictions nor the target posterior.
    # A zero value has no influence, which is the default.
    additional_proposition_std::Float64
end
```

Cette adaptation de la loi de proposition est utilisée dans le prochain chapitre pour l'inversion du modèle de Hapke en grande dimension (2.2.2).

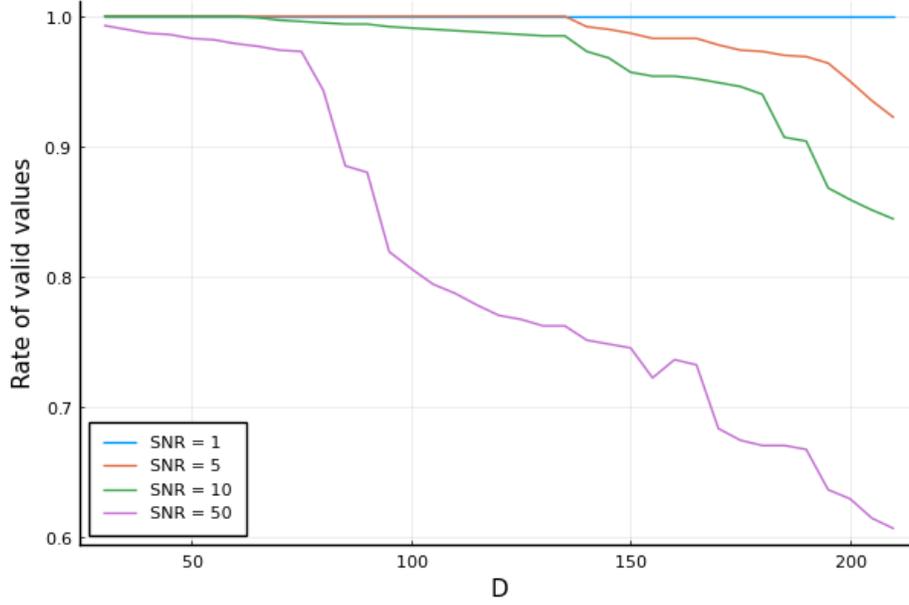


FIGURE 1.9 – Evolution du taux de validité de la prédiction par la moyenne GLLiM, pour 4 rapports signal sur bruit ($\alpha = \frac{\sigma_n}{\sigma_n}$).

1.3.2 Échantillonnage préférentiel autour des centroïdes

Nous avons proposé ci-dessus une amélioration de la prédiction par la moyenne par Importance Sampling. Comme décrit dans la section précédente, le modèle GLLiM permet de traiter le cas de solutions multiples. Nous montrons donc ici comment adapter l'IS à un cas multi-modal. Une première idée vient de la remarque que l'estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IS-G}$ est une combinaison convexe des échantillons générés selon la loi de proposition. On aimerait donc modifier la loi de proposition pour se concentrer autour d'un mode de la loi cible. Cela dit, cette idée seule ne suffit pas : en effet, le fondement théorique de l'échantillonnage préférentiel 1.9 montre que, asymptotiquement, changer la loi de proposition n'a pas d'influence. On propose donc d'aller plus de loin et de modifier aussi la loi cible. Commençons par étudier le cas très simplifié d'un modèle de mélange gaussien dont les composantes ont la même covariance :

Proposition 1.3.2. *Soit ϕ la densité d'un GMM de paramètres $(\pi_k, \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma})_{k=1..K}$, et $i \in \llbracket 1, K \rrbracket$. On suppose que les poids π_k sont tous non nuls, et que les centroïdes \mathbf{c}_k sont distincts deux à deux. On considère une v.a. X_i de loi à densité $\phi_i(\mathbf{x}) \propto \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_i, \mathbf{\Gamma}) \phi(\mathbf{x})$. Alors*

$$\mathbb{E}[X_i] \xrightarrow{\mathbf{\Gamma} \rightarrow 0} \mathbf{c}_i$$

Démonstration. La formule du produit de deux densités gaussiennes B.2.1 montre que X_i est un GMM de paramètres $(\alpha_k, \mathbf{x}_k, \mathbf{S})$, où

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= (\mathbf{\Gamma}^{-1} + \mathbf{\Gamma}^{-1})^{-1} = \frac{1}{2} \mathbf{\Gamma} \\ \mathbf{x}_k &= \mathbf{S} (\mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{c}_k + \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{c}_i) = \frac{1}{2} (\mathbf{c}_k + \mathbf{c}_i) \\ \alpha_k &\propto \pi_k \beta_k \\ \beta_k &= \mathcal{N}(\mathbf{c}_k; \mathbf{c}_i, \mathbf{B}^{-1}) \\ \mathbf{B} &= (\mathbf{\Gamma} + \mathbf{\Gamma})^{-1} = \frac{1}{2} \mathbf{\Gamma}^{-1} \end{aligned}$$

En normalisant α_k , le terme au dénominateur en $|\Gamma|$ se simplifie, et on obtient

$$\alpha_k = \frac{1}{\sum_{k=1}^K \tilde{\alpha}_k} \tilde{\alpha}_k, \text{ où } \tilde{\alpha}_k := \pi_k \exp\left(-\frac{1}{4} \|\mathbf{c}_k - \mathbf{c}_i\|_{\Gamma^{-1}}^2\right)$$

Comme $\tilde{\alpha}_i = \pi_i$ et $\tilde{\alpha}_k \xrightarrow{\Gamma \rightarrow 0} 0$ si $k \neq i$, on obtient bien

$$\mathbb{E}[X_i] = \sum_{k=1}^K \alpha_k \mathbf{x}_k \xrightarrow{\Gamma \rightarrow 0} \mathbf{c}_i$$

□

Cette proposition montre qu'on peut retrouver de manière approchée un centroïde, qu'on assimile à un mode, en filtrant la densité cible par un prior centré autour de ce centroïde. Dans le cas général, on propose de suivre cette heuristique en utilisant les centroïdes $\hat{\mathbf{x}}_{centroid,k}$, issus de la fusion de la loi GLLiM (section 1.2.2). Pour le centroïde k , on applique donc l'IS en prenant comme loi cible $\tilde{p}_k(\mathbf{x}) \propto \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k^m, \Gamma_k^m) p(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$. La distance entre le mode cherché et le centre du prior \mathbf{c}_k^m doit être relativement faible : la covariance Γ_k^m du prior traduit la confiance qu'on a dans cette première estimation du mode. Comme la région d'intérêt est restreinte autour du centroïde k , on propose aussi de restreindre la loi de proposition à $\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k^m, \Gamma_k^m)$. L'estimateur du centroïde k par Importance Sampling $\bar{\mathbf{x}}_{IS-centroid,k}$ est donc obtenu en générant un échantillon $(\mathbf{x}_1^k, \dots, \mathbf{x}_I^k)$ suivant la loi $\mathcal{N}(\mathbf{c}_k^m, \Gamma_k^m)$ et en calculant

$$\bar{\mathbf{x}}_{IS-centroid,k}(\mathbf{y}) := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i^{(k)}} \sum_{i=1}^I w_i^{(k)} \mathbf{x}_i^k, \quad \text{avec } w_i^{(k)} := p(\mathbf{y}|X = \mathbf{x}_i^k) p(\mathbf{x}_i^k)$$

La variance associée est donnée par

$$var(\mathbf{y}) := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i^{(k)}} \sum_{i=1}^I w_i^{(k)} (\mathbf{x}_i^{(k)} - \mu)^t (\mathbf{x}_i^{(k)} - \mu)$$

où $\mu := \bar{\mathbf{x}}_{IS-centroid,k}(\mathbf{y})$.

Remarquons que, dans ce cas, les poids sont proportionnels à la densité cible : un poids fort indique donc que le point échantillonné est proche d'un mode, et on espère donc que l'estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IS-centroid,k}(\mathbf{y})$ obtenu puisse retrouver ce mode. Comme pour la moyenne, on dispose maintenant d'un nouvel estimateur qui affine la prédiction par les centroïdes. La section 1.3.4 montre que cet estimateur permet en effet de retrouver plus précisément les modes quand la loi a-posteriori est multi-modale.

1.3.3 Échantillonnage préférentiel incrémental (IMIS)

Nous avons présenté l'utilisation d'une phase d'échantillonnage préférentiel pour améliorer la prédiction GLLiM. Le mécanisme utilisé est courant et simple ; plusieurs autres méthodes plus poussées existent dans la littérature pour améliorer les performances de l'estimateur. Comme évoqué plus haut, nous explorons donc une méthode d'échantillonnage préférentiel adaptatif. Parmi ce vaste champ, nous retenons l'approche appelée Incremental Mixture Importance Sampling (IMIS), notamment pour sa simplicité et son coût en temps de calcul raisonnable. Au lieu de générer I points d'une traite, IMIS commence par une étape d'IS classique qui produit I_0 points (avec typiquement I_0 un ordre de grandeur plus faible que I). Ensuite, J itérations sont exécutées, chacune générant B nouveaux points, fournissant au total un échantillon de taille

$I = I_0 + BJ$. A chaque itération, la loi de proposition est modifiée de la façon suivante : si ψ_0 est la loi de proposition initiale, on définit récursivement

$$\psi_{j+1} = \frac{I_j}{I_{j+1}}\psi_j + \frac{B}{I_{j+1}}\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{i+1}, \boldsymbol{\Sigma}_{i+1}) \quad (1.10)$$

où $I_j := I_0 + jB$ est le nombre de points à l'étape j , et $\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i$ sont à choisir (cf ci-dessous). Les poids des points déjà générés sont mis à jour, de sorte que après la dernière itération, les poids des I points sont ceux d'une procédure IS standard avec comme loi de proposition ψ_J . La méthode tire son nom du fait que les lois de proposition ψ_j sont des lois de mélanges (même si ψ_0 n'en est pas un).

La pertinence de l'algorithme est largement liée au choix de $\boldsymbol{\mu}_i$. L'idée étant d'explorer une zone où la densité cible est importante mais jusque là peu atteinte par la loi de proposition, $\boldsymbol{\mu}_i$ est choisi comme le point de plus haut poids. Cela s'explique par le fait que le poids d'un point $\frac{\phi}{\psi_j}$ est maximal quand la densité cible ϕ est forte, mais aussi que la densité de proposition ψ_j est faible, ce qui correspond bien à une zone intéressante mais non explorée. Le choix de $\boldsymbol{\Sigma}_i$ semble moins crucial : (au moins) deux variantes existent dans la littérature. [Raftery and Bao, 2010] utilise les B points les plus proches de $\boldsymbol{\mu}_i$, au sens de la distance de Mahalanobis pour la covariance de loi de proposition initiale ψ_0 , et forme la covariance empirique de ces points pondérées par $\frac{1}{2}(\frac{1}{I_j} + \frac{\phi}{\psi_j})$. [Fasiolo et al., 2018] utilise comme distance la distance de Mahalanobis avec la covariance empirique de tous les échantillons courants et ne pondère pas la covariance empirique $\boldsymbol{\Sigma}_i$, afin d'améliorer la stabilité numérique de l'algorithme. Nous retenons l'argument de stabilité cité dans [Fasiolo et al., 2018], mais nous préférons utiliser dans la distance de Mahalanobis la covariance de la loi de proposition (ce qui évite de re-calculer à chaque itération la covariance de l'échantillon) ce qui conduit à l'algorithme présenté dans l'encart 1 ci-après.

Prédiction par la moyenne avec IMIS

IMIS peut être utilisé comme un remplaçant direct d'IS, puisque les deux algorithmes ont les mêmes dépendances (une loi cible calculable à une constante près et une loi de proposition) et produisent les mêmes quantités : un échantillon pondéré approchant la loi cible. Suivant la même procédure qu'à la section 1.3.1, on utilise IMIS pour générer un échantillon $(\mathbf{x}_i^{IMIS}, w_i^{IMIS})$ et on définit donc l'estimateur de la moyenne avec IMIS $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ par

$$\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}(\mathbf{y}) := \sum_{i=1}^I w_i^{IMIS} \mathbf{x}_i^{IMIS}$$

La variance associée est donnée par

$$var(\mathbf{y}) := \sum_{i=1}^I w_i^{IMIS} (\mathbf{x}_i^{IMIS} - \boldsymbol{\mu})^t (\mathbf{x}_i^{IMIS} - \boldsymbol{\mu})$$

où $\boldsymbol{\mu} := \bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}(\mathbf{y})$.

Prédiction par les centroïdes avec IMIS

De même, IMIS peut être utilisé pour raffiner la prédiction par les centroïdes. Pour le centroïde k , on utilise les même lois cible et de proposition qu'à la section 1.3.1 pour générer avec IMIS un échantillon $(\mathbf{x}_i^{IMIS,k}, w_i^{IMIS,k})$ et on définit l'estimateur du centroïde k avec IMIS $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,k}$ par

$$\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,k}(\mathbf{y}) := \sum_{i=1}^I w_i^{IMIS,k} \mathbf{x}_i^{IMIS,k}$$

de variance associée

$$var(\mathbf{y}) := \sum_{i=1}^I w_i^{IMIS,k} (\mathbf{x}_i^{IMIS,k} - \boldsymbol{\mu})^t (\mathbf{x}_i^{IMIS,k} - \boldsymbol{\mu})$$

où $\boldsymbol{\mu} := \bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,k}(\mathbf{y})$.

Algorithme 1 : Algorithme IMIS (cf [Raftery and Bao, 2010, Fasiolo et al., 2018] pour plus de détails)

Result : $I = I_0 + BJ$ points pondérés $\{(\mathbf{x}_i^{IMIS}, w_i^{IMIS}), i = 1 : I\}$

Commencer par une étape IS standard (suivant 1.3.1), produisant I_0 points pondérés

$\{(\mathbf{x}_i, w_i), i = 1 : I_0\}$.

while $j \leq J$ **do**

Sélectionner $i_{max} := \arg \max_i w_i$ et choisir

$$\boldsymbol{\mu}_i := \mathbf{x}_{i_{max}}$$

Si \mathbf{M} est la matrice de covariance de la loi de proposition initiale, choisir $(\mathbf{x}'_i)_{i=1..B}$ les B plus proches voisins de $\boldsymbol{\mu}_i$ au sens de $\|\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_i\|_{\mathbf{M}}$, et calculer la covariance empirique $\boldsymbol{\Sigma}_i$ de ces B points (pour la moyenne $\boldsymbol{\mu}_i$) :

$$\boldsymbol{\Sigma}_i := \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B (\mathbf{x}'_i - \boldsymbol{\mu}_i) (\mathbf{x}'_i - \boldsymbol{\mu}_i)^\top$$

Générer B nouvelles simulations suivant la loi $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$ et les ajouter aux points courants (\mathbf{x}_i) , formant ainsi $I_j = I_0 + jB$ points au total.

Mettre à jour la loi de proposition en ajoutant cette gaussienne (suivant 1.10).

Calculer les nouveaux poids (modifiant le poids des points précédents) $(w_i)_{i=1..I_j}$ en utilisant la loi de proposition mise à jour :

$$w_i = \frac{1}{\sum_{r=1}^{I_j} \tilde{w}_r} \tilde{w}_i, \text{ où } \tilde{w}_i := \frac{\tilde{\phi}(\mathbf{x}_i)}{\psi_j(\mathbf{x}_i)}$$

end

Choix des hyper-paramètres I_0, B, J

Le choix des paramètres I_0, B, J dépend en général du contexte. Remarquons que, une fois I_0 fixé, le choix de B et J oscille entre deux alternatives. Prendre B grand et J petit revient à s'approcher de la méthode IS simple (c'est d'ailleurs exactement le cas si $J = 0$). À l'inverse, choisir B petit et J grand rejoint d'une certaine manière les méthodes MCMC, où beaucoup d'itérations sont nécessaires pour générer des points représentatifs de la distribution cible.

Dans la pratique, on propose une sélection semi-automatique de I_0, B, J . Étant donné un petit jeu d'observations $\mathbf{y}_{obs,n}$ et une valeur de référence $\mathbf{x}_{obs,n}$, on se fixe un budget de temps calcul (par exemple en mesurant le temps de calcul de IS pour un paramètre I donné), et on essaye plusieurs combinaisons de paramètres. Parmi les valeurs donnant un temps de calcul inférieur au budget, on retient les paramètres minimisant l'écart à la référence. On est alors certain de ne pas dépasser le temps de calcul que prendrait la procédure IS, tout en améliorant en général la prédiction. Dans un contexte d'inversion massive, cette phase de sélection peut être effectuée une fois sur une dizaine d'observations, représentatives de la série, avant d'utiliser les paramètres IMIS optimaux sur le jeu de données complet.

1.3.4 Comparaison des méthodes GLLiM, IS et IMIS

On propose dans cette section de vérifier expérimentalement l'apport des méthodes d'échantillonnage pour la prédiction. Une comparaison avec les méthodes de référence MCMC sera fournie dans le prochain chapitre. Nous considérons ici des exemples synthétiques simples et nous comparons les méthodes GLLiM

Incremental Mixture Importance Sampling (IMIS)

```
# choose the IMIS parameters
params = Is.ImisParams(I0, B, J)

# choose the non uniformity parameters
non_uniformity_params = Is.NonUniformityParams(1_000)

# perform incremental mixture importance sampling
# model defines the proposition and target density
result, non_uniformity = Is.importance_sampling(model, params, non_uniformity_params)

# exploit the mean and the covariance of the target density
mean, cov = result.mean, result.cov
```

Sélection semi-automatique des paramètres IMIS

```
# use a storage to re-use previously computed GLLiM if run_gllim is false,
# whose learning is defined by 'training_params'
storage = Store.Storage(directory)
run_gllim = false

# given a subset of the observations Yobs (with std Yobs_std),
# compute a reference value X_refs (for example with MCMC methods)

# choose the equivalent IS budget
Ns = 20_000

# select the best configuration
imis_params = TuneImis.tune(storage, context, Yobs, Yobs_std, X_refs,
                             training_params, Ns, run_gllim)
```

(seul), GLLiM avec IS, et GLLiM avec IMIS; pour la moyenne et pour les centroïdes.

Prédiction par la moyenne

Nous commençons par un exemple uni-modal : la fonctionnelle à inverser est construite pour être injective, mais non-linéaire pour présenter un challenge. Plus précisément, nous prenons $L = 4$ et $D = 9$ et nous posons $F(\mathbf{x})_d = (\mathbf{A} \exp(\mathbf{x}))_d + 5(\exp(x_d) + 0.5)^2$ si $d \in \llbracket 1, 4 \rrbracket$, $F(\mathbf{x})_d = (\exp(x_{d-4}) + 0.5)^2$ si $d \in \llbracket 5, 8 \rrbracket$ et $F(\mathbf{x})_9 = (\mathbf{A} \exp(\mathbf{x}))_9$, où \mathbf{A} est une matrice injective. Nous apprenons le modèle GLLiM avec un bruit sur le jeu d'entraînement $\Sigma = (0.001)^2 I_D$ et $K = 50$. Nous générons ensuite une série d'observations synthétiques $(\mathbf{x}_{obs,n}, \mathbf{y}_{obs,n} = F(\mathbf{x}_{obs,n}))_{n=1..100}$, nous prenons comme écart-type associé à l'observation n $\sigma_n = \frac{\mathbf{y}_{obs,n}}{50}$ et nous appliquons la procédure d'échantillonnage préférentiel, pour plusieurs valeurs des paramètres I et (I_0, B, J) . Étant donné l'indice $r \in \llbracket 1, 20 \rrbracket$ d'une expérience, nous prenons comme paramètre pour la méthode IS $I_r = 100(1 + 5(r - 1))$. Pour la méthode IMIS, nous considérons deux séries de paramètres définies par $I_{0,r}^1 = \frac{I_r}{10}$, $B_r^1 = \frac{I_r}{20}$ et $J^1 = 18$ d'une part (IMIS-1); $I_{0,r}^2 = \frac{I_r}{20}$, $B_r^2 = \frac{I_r}{40}$ et $J^2 = 9$ d'autre part (IMIS-2). La

première série a un nombre total de points générés égal au nombre de points générés par IS. La deuxième série correspond à une approche nettement plus parcimonieuse, obtenue en divisant par 2 le nombre d'échantillons et d'itérations de la première série.

Pour chaque expérience et chaque méthode de prédiction, nous mesurons les trois critères suivants

Erreur sur la variable \mathbf{x} : moyenne sur la série d'observations de la différence

$$E(\mathbf{x}_{pred}) = \|\mathbf{x}_{pred} - \mathbf{x}_{obs}\|_{\infty}$$

Erreur de reconstruction : moyenne sur la série d'observations de l'erreur de reconstruction relative

$$R(\mathbf{x}_{pred}) = \frac{\|F(\mathbf{x}_{pred}) - \mathbf{y}_{obs}\|_2}{\|\mathbf{y}_{obs}\|_2}$$

Temps de calcul : temps de calcul de la phase de prédiction (la phase d'apprentissage étant commune à toutes les répétitions) pour toutes les observations

Les résultats de cette simulation (cf figure 1.10) mettent bien en valeur l'intérêt des méthodes d'échantillonnage : la précision de la prédiction par rapport à GLLiM seul est nettement améliorée. La méthode IMIS est aussi largement plus performante que la méthode IS standard. On note que, sans surprise, pour un même nombre d'échantillons générés, la méthode IMIS est plus lente que la méthode IS. La figure 1.10 montre que l'efficacité de la méthode IMIS vient réellement de la qualité des échantillons générés : il en suffit de beaucoup moins pour obtenir une précision similaire à IS.

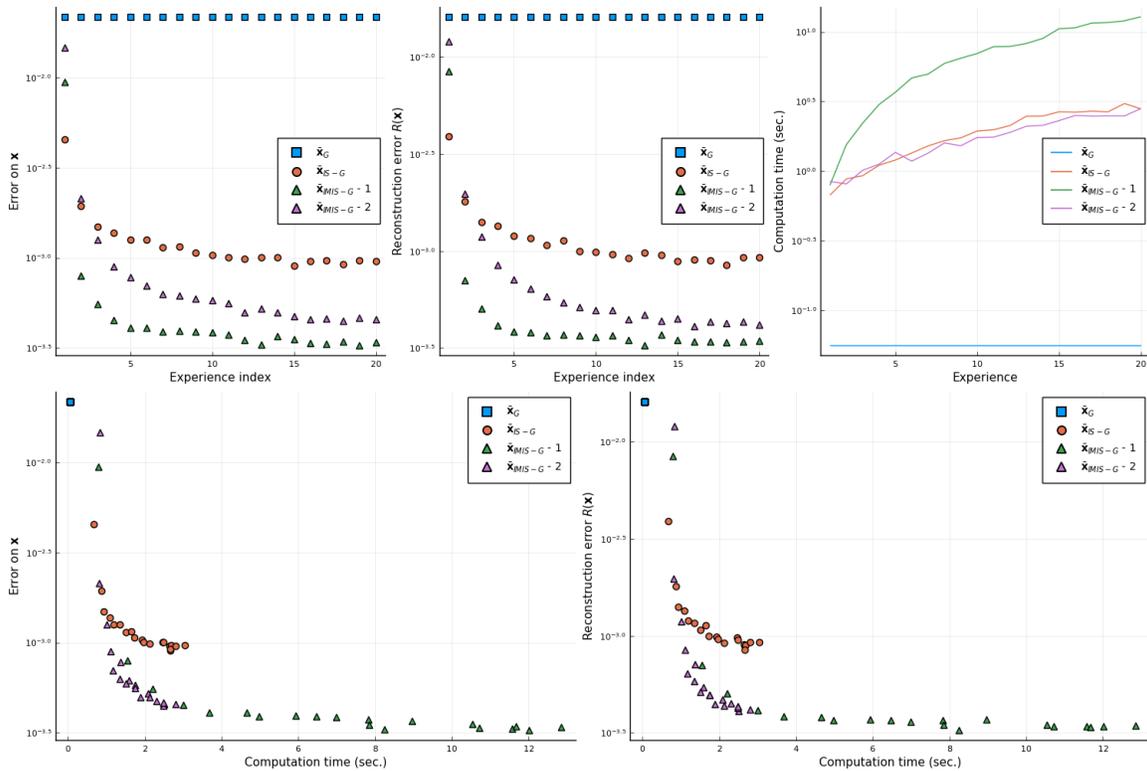


FIGURE 1.10 – Comparaison des méthodes GLLiM (en carrés bleus), IS (en ronds oranges) et IMIS (en triangles verts et violets) pour la prédiction par la **moyenne**; fonctionnelle synthétique. Première ligne, de gauche à droite : erreur sur \mathbf{x} , erreur de reconstruction et temps de calcul. Deuxième ligne : erreur sur \mathbf{x} en fonction du temps de calcul (à gauche) et erreur de reconstruction en fonction du temps de calcul (à droite)

La figure 1.11 montre la même expérience, réalisé cette fois en prenant comme fonctionnelle le modèle de Hapke, avec les géométries de mesures de l'expérience *Ceres* (voir 2.3.1). La tendance générale est similaire : IMIS obtient un meilleur rapport précision / temps de calcul.

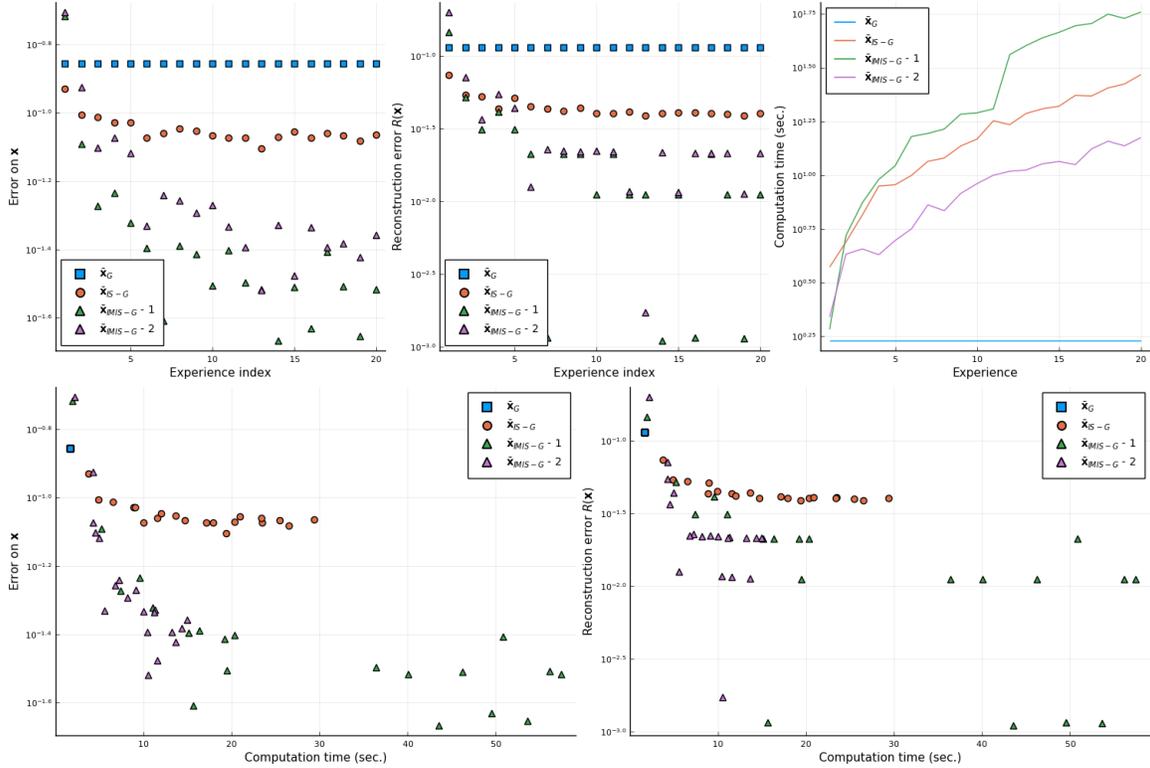


FIGURE 1.11 – Comparaison des méthodes GLLiM (en carrés bleus), IS (en ronds oranges) et IMIS (en triangles verts et violets) pour la prédiction par la **moyenne**; fonctionnelle Hapke (*Ceres*). Première ligne, de gauche à droite : erreur sur \mathbf{x} , erreur de reconstruction et temps de calcul. Deuxième ligne : erreur sur \mathbf{x} en fonction du temps de calcul (à gauche) et erreur de reconstruction en fonction du temps de calcul (à droite)

Prédiction par les centroïdes

Nous comparons ici la prédiction par les centroïdes sur un exemple bi-modal : nous prenons à nouveau $L = 4$ et $D = 9$ et nous posons $F = \mathbf{A} \circ G \circ H$, où \mathbf{A} est une matrice injective de taille $D \times L$, $G(\mathbf{x}) = (\exp(x_1), \exp(x_2), \exp(x_3), \exp(x_4))$, et $H(\mathbf{x}) = (x_1, x_2, 4(x_3 - 0.5)^2, x_4)$. Ainsi, F est non-linéaire et admet deux antécédents dans $[0, 1]$ pour chaque observation, notés $\mathbf{x}_{obs,1}$ et $\mathbf{x}_{obs,2} = 1 - \mathbf{x}_{obs,1}$. Nous suivons la même procédure que ci-dessus, seulement, nous adaptons le critère d'erreur sur la variable \mathbf{x} au cas bi-modal : étant donné un ensemble de deux prédictions (par les centroïdes), nous le comparons terme à terme à la sous-partie des solutions de références ($\mathbf{x}_{obs,1}, \mathbf{x}_{obs,2}$) la plus avantageuse. La moyenne des deux erreurs est conservée. De même, la moyenne des deux erreurs de reconstruction (une pour chaque centroïde) est conservée.

La figure 1.12 montre des résultats similaires à l'étude du cas uni-modal, ce qui valide l'utilisation de l'échantillonnage autour des centroïdes.

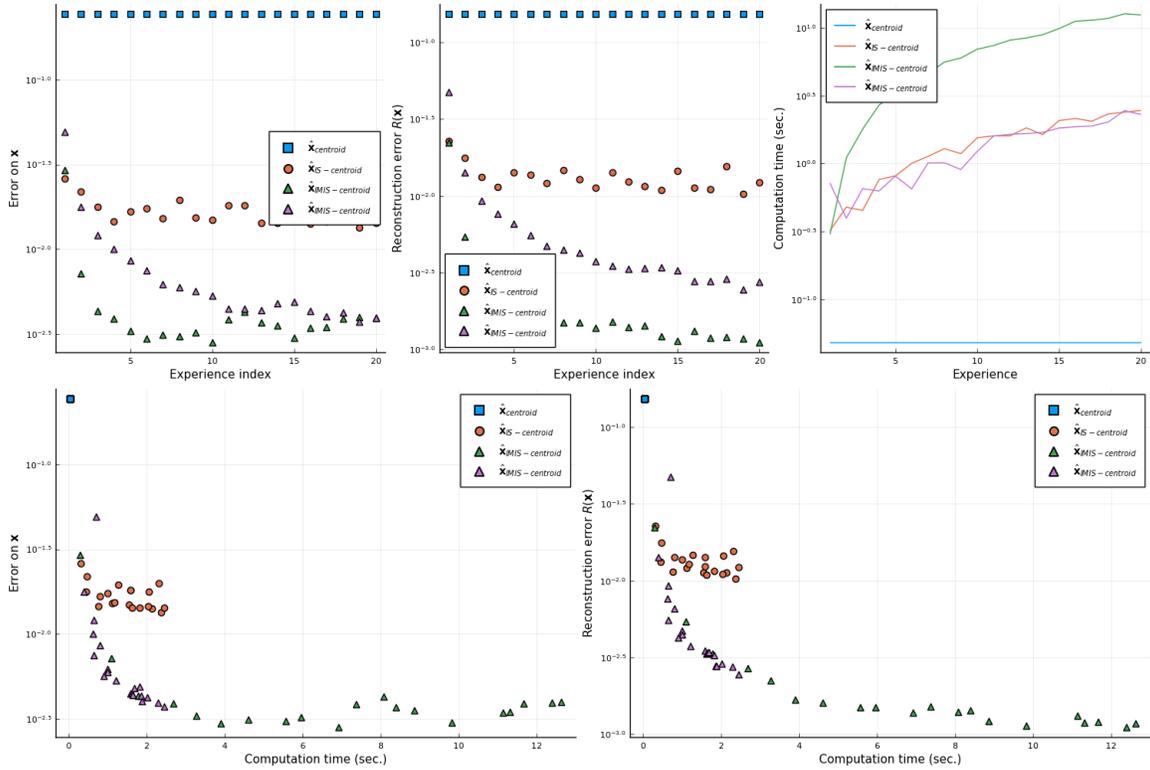


FIGURE 1.12 – Comparaison des méthodes GLLiM (en carrés bleus), IS (en ronds oranges) et IMIS (en triangles verts et violets) pour la prédiction par les **centroïdes**. Première ligne, de gauche à droite : erreur sur \mathbf{x} , erreur de reconstruction et temps de calcul. Deuxième ligne : erreur sur \mathbf{x} en fonction du temps de calcul (à gauche) et erreur de reconstruction en fonction du temps de calcul (à droite). L'erreur sur \mathbf{x} et l'erreur de reconstruction sont moyennées sur les deux centroïdes.

1.3.5 Conclusion

Nous avons montré dans cette partie comment utiliser la loi a-posteriori GLLiM comme loi de proposition dans une méthode d'échantillonnage préférentiel, que ce soit pour l'estimation de la moyenne ou des modes de la loi d'intérêt. Cette approche introduit un compromis entre précision numérique et temps de calcul, puisque, contrairement à l'utilisation de la loi GLLiM seule, la phase de prédiction n'est plus immédiate. La comparaison avec les méthodes MCMC du prochain chapitre montrera que cette méthode reste très attractive en terme de rapport entre temps de calcul et exactitude mathématique.

On pourrait ici s'interroger sur la nécessité d'utiliser le modèle GLLiM comme loi d'importance : ne pourrait-on pas simplement utiliser une loi uniforme ? Prendre comme loi de proposition la loi a-posteriori GLLiM présente deux intérêts principaux :

- profiter d'une première approximation pour n'avoir à générer qu'un petit nombre de points
- permettre de traiter des solutions multiples, ce qui serait difficile avec une autre loi de proposition.

1.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthodologie d'inversion bayésienne reposant sur le modèle GLLiM et des techniques d'échantillonnage préférentiel. A la suite de la discussion proposée plus haut, nous retenons comme procédure d'inversion les étapes suivantes :

Etape d'apprentissage : Pour une fonctionnelle F donnée,

- Générer un jeu d'apprentissage \mathcal{D} , de niveau de bruit σ_{train} négligeable devant l'écart-type des observations. En pratique, nous prenons σ_{train} deux ordres de grandeur plus faible que le niveau de bruit moyen des observations (voir la partie 2.3).
- Initialiser les paramètres GLLiM avec l'une des deux méthodes proposées (section 1.1.2).
- Choisir si nécessaire une contrainte sur les covariances $\mathbf{\Gamma}_k$ et $\mathbf{\Sigma}_k$. Par défaut, nous prenons les $\mathbf{\Gamma}_k$ non contraintes et les $\mathbf{\Sigma}_k$ diagonales.
- Appliquer l'algorithme EM pour GLLiM (section 1.1.2).

Etape de prédiction : Pour une observation \mathbf{y}_{obs} et un écart-type σ_{obs} ,

- Ajuster le bruit du modèle GLLiM pour prendre σ_{obs} en compte (section 1.1.4).
- Inverser le modèle pour calculer la loi a-posteriori GLLiM (1.4).
- Appliquer l'algorithme de fusion pour simplifier le modèle de mélange gaussien obtenu (section 1.2.2).
- Utiliser une technique d'échantillonnage préférentiel pour améliorer les prédictions obtenues, à la fois pour la moyenne et pour les centroïdes. (section 1.3.3).
- Exploiter l'ensemble des solutions pour déterminer la multi-modalité et sélectionner la ou les méthodes de prédictions les plus pertinentes en fonction de l'objectif (voir la partie 2.3).

Ce procédé répond aux exigences suivantes :

Problème en grande dimension Le modèle GLLiM est adapté à des observations de grande dimension. En effet, contrairement au modèle de mélange gaussien, on peut imposer des contraintes sur les matrices de covariances du modèle GLLiM pour rendre l'estimation des paramètres faisable en temps raisonnable.

Nombre massif de données à inverser L'approche proposée est divisée en deux étapes. L'étape d'apprentissage est commune à toutes les observations et n'est effectuée qu'une seule fois. L'étape de prédiction est à exécuter pour chaque observation, mais le modèle appris dans la première étape permet d'obtenir un compromis temps de calcul / précision de l'inversion très compétitif.

Evaluation de l'incertitude S'inscrivant dans un cadre bayésien, la méthodologie fournit naturellement un indicateur de l'incertitude sur la prédiction, via le calcul de la variance de la loi a-posteriori.

Prise en compte de solutions multiples Le caractère global de l'estimation GLLiM permet de traiter le cas où la loi a-posteriori est multi-modale. En plus de la prédiction par la moyenne, la prise en compte des centroïdes permet de décrire des lois a-posteriori plus complexes, qui présentent des régions de forte densité éloignées de la moyenne.

Cette approche est avant tout destinée aux problèmes d'inversion massive, où il est nécessaire de pouvoir fournir à l'utilisateur un résultat facilement exploitable, en un temps de calcul raisonnable. Cette contrainte justifie les idées proposées. Par exemple, simplifier un modèle physique complexe en un modèle paramétrique général permet de l'inverser rapidement. De même, résumer la multi-modalité d'un modèle de mélange gaussien à une poignée de centroïdes par une opération de fusion est certainement une approximation, mais cela simplifie l'étude de solutions multiples. Enfin, les approches MCMC fournissent certainement des résultats aussi précis que l'approche par échantillonnage présentée, mais le surcoût en temps de calcul est rédhibitoire.

Remarquons que le cadre de ce premier chapitre est très large et peut s'appliquer à tout problème d'inversion. La prédiction par l'estimateur GLLiM ne requiert qu'un jeu d'apprentissage, qui peut être généré facilement si l'on dispose d'un modèle direct analytique, mais qui pourrait aussi être construit par un procédé plus complexe. La prédiction par échantillonnage préférentiel demande qu'on puisse évaluer efficacement le modèle direct, ce qui restreint généralement l'approche aux modèles analytiques, en opposition par exemple

aux modèles résultant d'un processus itératif lourd, comme la résolution numérique d'équations différentielles. L'objet du prochain chapitre est maintenant d'appliquer cette méthodologie sur un problème de planétologie et d'en évaluer la pertinence dans ce contexte.

Chapitre 2

Application à l'analyse de données de planétologie : mesures de laboratoire et images hyperspectrales de télédétection

Sommaire

2.1	Présentation du modèle de Hapke	54
2.1.1	Géométries de mesure	54
2.1.2	Espace des paramètres physiques	55
2.1.3	Relation dite du <i>hockey-stick</i>	56
2.1.4	Incertitude sur les mesures	56
2.1.5	Choix d'implémentation	56
2.1.6	Conclusion	58
2.2	Comparaison avec les méthodes de référence MCMC	59
2.2.1	Inversion du modèle de Hapke à quatre paramètres	59
2.2.2	Inversion du modèle de Hapke à six paramètres	63
2.2.3	Conclusion	63
2.3	Analyse spectro-photométrique de mesures de réflectance	65
2.3.1	Mesures de laboratoire	65
2.3.2	Images hyper-spectrales satellitaires	82
2.4	Conclusion	86

Nous passons maintenant d'un travail général sur l'inversion bayésienne à l'étude d'un problème en particulier. Nous nous plaçons dans un contexte de planétologie où l'objectif général est d'accroître la connaissance sur la composition de la surface des planètes qui nous entourent. Étudier la texture d'un matériau est capital pour le planétologue, puisqu'elle peut révéler notamment les processus géologiques à l'origine de la formation et de l'évolution de la surface. Comme les mesures de terrains sont complexes et coûteuses, plusieurs technologies de télédétection ont été développées pour étudier un matériau indirectement, via une mesure à distance d'une quantité observable. Citons par exemple les méthodes LiDAR (Light Detection and Ranging) ([Haubrock et al., 2009, Eitel et al., 2011]), Radar ([Campbell and Shepard, 1996, Bondarenko et al., 2006]) ou encore la photogrammétrie ([Chandler et al., 2005]). Nous nous concentrons ici sur une quatrième approche, dite photométrique, qui repose sur l'idée que la lumière pénétrant une surface est réfléchi partiellement par l'interaction avec ses composants internes et sa structure. L'intensité du signal réfléchi varie en fonction des caractéristiques du matériau, mais aussi de la longueur d'onde et de la configuration géométrique de

la mesure. La prise en compte de ces variations peut être exploitée pour remonter à la composition de la surface.

Différentes études ont été conduites sur divers corps célestes comme la lune, par exemple dans [Shkuratov et al., 1999], Mars, dans [Fernando et al., 2013], les astéroïdes, dans [Helfenstein and Veverka, 1989]), ou les météorites ([Beck et al., 2012]), révélant une forte diversité spectro-photométrique. Pour en déduire une analyse sur la micro-texture, plusieurs modèles de la diffusion lumineuse ont été proposés, par exemple dans [Hapke, 1981, Douté and Schmitt, 1998, Shkuratov et al., 1999, Pilorget et al., 2013]. Chacun de ces modèles relie un ensemble de paramètres, dits physiques, à la fonction de distribution de la réflectance bidirectionnelle (BRDF), quantité qui peut être mesurée aussi bien en laboratoire qu'à partir d'instruments embarqués. Remarquons que les paramètres choisis diffèrent d'un modèle à l'autre. En fait, ils sont même intrinsèquement liés au modèle, puisqu'ils ne sont en général pas mesurables indépendamment. Leur intérêt vient du fait que, même s'ils ne représentent que des quantités abstraites, ils permettent néanmoins une interprétation physique et une comparaison entre plusieurs matériaux. Notamment, ces espaces de paramètres physiques sont indépendants des conditions géométriques de mesure, ce qui permet de rapprocher des résultats expérimentaux obtenus dans des contextes différents. Déterminer les paramètres physiques à partir des observations présente donc plusieurs intérêts :

- dans le cas d'un modèle interprétable, pouvoir étudier les caractéristiques intrinsèques d'un matériau,
- classifier un matériau inconnu en le rapprochant d'échantillons analysés dans des travaux précédents,
- reconstruire la réflectance d'une surface pour un ensemble de géométries arbitraires, et parfois non atteignables par les outils de mesure existants.

Dans cette thèse, nous nous concentrons sur un des modèles de transfert radiatif les plus couramment utilisés en planétologie : le modèle introduit par B. Hapke dans [Hapke, 1981, Hapke, 1984, Hapke, 1986, Hapke, 2002, Hapke, 2012]. Ce modèle est analytique, ce qui permet de l'évaluer efficacement. De plus, ses paramètres sont suffisamment concrets pour pouvoir être reliés aux propriétés physiques du matériau. Comme alternatives que nous aurions pu considérer, le modèle de Shkuratov, proposé dans [Shkuratov et al., 1999] pour analyser des surfaces minérales de la lune, est un modèle similaire au modèle de Hapke, dans le sens où il introduit aussi un ensemble de 5 paramètres, physiquement interprétables mais non mesurables, et les relie à la réflectance par une formule analytique, complexe et non linéaire. D'autre part, si l'on souhaite exclusivement reconstruire la réflectance pour n'importe quelle géométrie, on peut aussi considérer le modèle RTLS (Ross-Thick Li-Sparse, [Lucht et al., 2000]) : il s'agit d'un modèle linéaire simple, dont les paramètres n'ont pas d'interprétation physique directe. Notons qu'étant linéaire, un tel modèle ne requiert pas de technique d'inversion évoluée. Finalement, certains modèles reposent sur une simulation numérique (comme celui proposé dans [Pilorget et al., 2013]), ce qui entraîne un coût important lors de l'inversion par appels multiples, comme pour les méthodes d'échantillonnage.

L'inversion du modèle de Hapke a été réalisée dans plusieurs travaux : [Cord et al., 2003] propose un algorithme génétique, utilisé ensuite dans [Pinet et al., 2004] et [Souchon et al., 2009]. Une méthode également basée sur l'évolution d'une population, la méthode Particle Swarm Optimization ([Kennedy et al., 2001]), a été utilisée dans [Beck et al., 2012]. Une méthode d'optimisation par descente de gradient est utilisée dans [Shepard and Helfenstein, 2007] et [Helfenstein and Shepard, 2011]. Le formalisme bayésien a aussi été employé dans [Schmidt and Fernando, 2015], [Pilorget et al., 2016] et amélioré dans [Schmidt and Bourguignon, 2019] avec une approche par chaînes de Markov, mais limité à quelques centaines d'observations. Comme discuté dans l'introduction, les méthodes citées ci-dessus ne réunissent pas toutes les conditions nécessaires à une inversion bayésienne massive. Les méthodes MCMC bénéficient d'une garantie théorique qui les rend très attractives, mais leur coût en temps de calcul est prohibitif pour l'analyse d'un large jeu d'observations.

Le chapitre précédent a introduit une méthodologie qui se veut une alternative efficace pour résoudre un problème inverse dans un cadre bayésien. La suite de ce chapitre est donc consacrée à son application au modèle de Hapke. Nous commençons par rappeler la définition du modèle et de ses paramètres (section 2.1), puis nous précisons la nature des observations. Nous comparons ensuite les performances de l'approche proposée avec les méthodes de référence MCMC (section 2.2), sur données synthétiques. Après avoir ainsi validé notre méthode, nous présentons et analysons le résultat de l'inversion de plusieurs jeux d'observations, provenant de mesures en laboratoire ainsi que de mesures satellitaires (section 2.3).

2.1 Présentation du modèle de Hapke

Le modèle de Hapke est un modèle de transfert radiatif introduit par B. Hapke dans [Hapke, 1981, Hapke, 1984, Hapke, 1986] qui modélise l'interaction de la lumière dans un milieu particulaire et fournit une expression analytique de la réflectance. Ce modèle permet de décrire une mesure photométrique avec relativement peu de paramètres et de les relier à l'absorptivité des particules, à leur capacité de diffusion, à leur fonction de phase et à la rugosité macroscopique du matériau. Plusieurs versions et raffinements du modèle ont été proposés. La version proposée dans [Hapke, 2002] relie les paramètres physiques $\omega, \bar{\theta}, b, c, h, B_0$ à la réflectance bidirectionnelle par la formule suivante

$$f_{BRDF,G}(\omega, \bar{\theta}, b, c, h, B_0) = \frac{\omega}{4\pi} \frac{\mu_{0e,G}(\bar{\theta})}{\mu_{0e,G}(\bar{\theta}) + \mu_{e,G}(\bar{\theta})} S_G(\bar{\theta}) \\ ([1 + B_G(h, B_0)] P_G(b, c) + H(w, \mu_{0e,G}(\bar{\theta})) H(w, \mu_{e,G}(\bar{\theta})) - 1)$$

G encode la configuration géométrique de mesure, qui est décrite dans la section 2.1.1. Les paramètres physiques et les quantités liées $\mu_{0e,G}, \mu_{e,G}, S_G, B_G, P_G$ et H sont explicitées dans la section 2.1.2. Nous présenterons ensuite la relation empirique dite du *hockey-stick* (section 2.1.3) et discuterons de l'incertitude des mesures (section 2.1.4).

2.1.1 Géométries de mesure

La réflectance dépend fondamentalement de la configuration géométrique de la mesure, qui est définie par trois angles : l'angle d'incidence θ_0 , l'angle d'émergence θ et l'azimut φ (illustrés par la figure 2.1). La donnée de l'angle azimutal peut être remplacée par celui de l'angle de phase g (angle entre les directions de la source lumineuse et du capteur), défini par la relation :

$$\cos g = \cos \theta_0 \cos \theta + \sin \theta_0 \sin \theta \cos \varphi$$

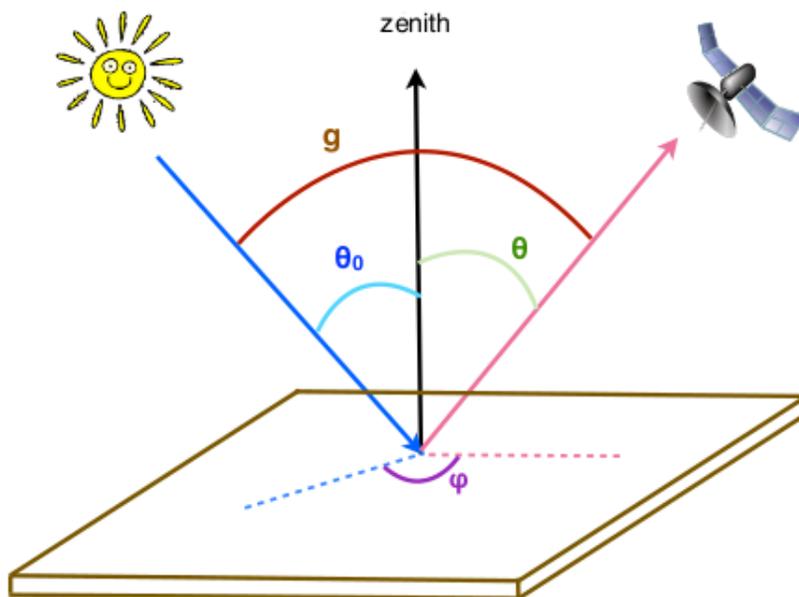


FIGURE 2.1 – Géométries de mesure de la réflectance. θ_0 est l'angle d'incidence, θ l'angle d'émergence, φ l'azimut et g l'angle de phase.

Nous notons donc $G = (\theta_0, \theta, \varphi)$, et nous considérons que G est connu précisément, fixé par le contexte de mesure. Les observations traitées sont multi-angulaires : pour un même échantillon (ou un même point spatial), on dispose d’une mesure de réflectance pour chaque configuration géométrique G_d d’une série de D géométries. Ainsi, dans notre contexte d’inversion, la fonctionnelle à considérer est à valeurs vectorielles et est définie par un D -uplet de configurations géométriques. Dans le cadre de données réelles, ces configurations sont fixées par l’expérimentateur : un satellite, sujet à des contraintes opérationnelles, couvre en général une dizaine de configurations ; en laboratoire, on peut en obtenir plus (de l’ordre de 70 dans les mesures étudiées ici). Dans la suite, on référencera dans ce cas un ensemble de géométries par l’appellation de l’expérience conduite. En revanche, dans le cadre d’expériences numériques, on peut choisir à loisir les configurations à utiliser, comme dans les sections 1.3.1 ou 2.2.2. Nous reviendrons justement sur l’influence du choix des géométries de mesure dans le prochain chapitre (section 3.2).

2.1.2 Espace des paramètres physiques

Nous détaillons maintenant les paramètres physiques du modèle de Hapke, résumés dans la tableau 2.1. Ces paramètres ne sont pas mesurables directement, mais peuvent être reliés aux propriétés du matériau étudié, comme décrit ci-dessous.

Variable	Description	Domaine de variation
ω	albedo de diffusion simple	$[0, 1]$
c	paramètre d’asymétrie de la fonction de phase	$[0, 1]$
b	paramètre d’anisotropie de la fonction de phase	$[0, 1]$
$\bar{\theta}$	rugosité macroscopique	$[0, 30]$
B_0	amplitude du pic de l’effet d’opposition	$[0, 1]$
h	largeur angulaire du pic de l’effet d’opposition	$[0, 1]$

TABLE 2.1 – Paramètres du modèle de Hapke

Albedo de diffusion simple ω et fonction de diffusion multiple H L’albedo ω décrit la brillance d’une particule et représente la proportion du rayonnement diffusé par une seule particule par rapport au rayonnement incident. Il intervient dans la fonction de diffusion multiple H , qui est définie (dans la version de [Hapke, 2002]) par

$$H(\omega, x) = \frac{1 + 2x}{1 + 2x\sqrt{1 - \omega}}$$

où x est $\mu_{0e,G}$ ou $\mu_{e,G}$.

Paramètres b et c de la fonction de phase P_G La fonction de phase P_G caractérise la distribution angulaire de l’énergie d’une particule. Elle dépend du paramètre b qui est relié à l’anisotropie du lobe diffusant et du paramètre c qui définit la direction principale de diffusion. Elle est définie par

$$P_G(b, c) = (1 - c) \frac{1 - b^2}{(1 + 2b \cos g + b^2)^{\frac{3}{2}}} + c \frac{1 - b^2}{(1 - 2b \cos g + b^2)^{\frac{3}{2}}}$$

Remarquons que nous choisissons ici $[0, 1]$ comme domaine de variation de c , ce qui correspond à la convention de [Schmidt and Fernando, 2015]. [Hapke, 2002], quant à lui, utilise $[-1, 1]$.

Rugosité macroscopique $\bar{\theta}$ Le facteur de rugosité macroscopique S_G est construit à partir d’une description de la topographie de surface comme un ensemble de facettes où la tangente des pentes suit une distribution gaussienne, d’angle de pente moyen $\bar{\theta}$. Le paramètre de rugosité macroscopique $\bar{\theta}$ intervient aussi dans l’expression de $\mu_{0e,G}$ et $\mu_{e,G}$ qui correspondent au cosinus de l’angle d’incidence et d’émergence équivalent d’une surface rugueuse. Nous renvoyons à [Hapke, 1993] pour l’expression exacte de S_G , $\mu_{0e,G}$ et $\mu_{e,G}$.

Paramètres B_0 et h de l’effet d’opposition La contribution B_G de l’effet d’opposition correspond à l’augmentation de l’intensité lumineuse diffusé par un milieu granulaire, à petits angles de phase ([Hapke, 1986, Hapke, 2002, Hapke, 2021]). Dans le modèle de [Hapke, 2002], elle est paramétrée par l’amplitude B_0 et la largeur du pic d’opposition h , reliées par l’équation :

$$B_G(h, B_0) = \frac{B_0}{1 + \frac{1}{h} \tan g}$$

Ce phénomène est maximal pour des angles de phases proches de zéro, mais devient négligeable passé 20° . Comme il est difficile d’obtenir des mesures pour des petits angles de phases, il est courant de ne pas chercher à contraindre B_0 et h et de les fixer à une valeur par défaut. On obtient alors un modèle de Hapke à 4 paramètres $(\omega, \bar{\theta}, b, c)$. Dans cette thèse, nous adoptons ce modèle partiel, sauf mention explicite du contraire, comme dans l’expérience décrite dans la section 2.2.2.

2.1.3 Relation dite du *hockey-stick*

Plusieurs travaux (comme [McGuire and Hapke, 1995, Souchon et al., 2011]) ont suggéré que les deux paramètres b et c de la fonction de phase sont fortement reliés. Cela conduit à une relation empirique proposée dans [Hapke, 2012] sous l’appellation relation du *hockey-stick* (exprimée avec la convention $c \in [-1, 1]$) :

$$c = 3.29 \exp(-17.4b^2) - 0.908$$

Cette relation est obtenue par régression de plusieurs résultats d’expériences de laboratoire réalisées sur différents matériaux. Elle pourrait être utilisée pour réduire le nombre de paramètres du modèle, en ne considérant plus c comme un paramètre indépendant à retrouver. Réduire la dimension de l’espace des paramètres pourrait généralement faciliter le processus d’inversion. Cependant, cette relation a été déterminée sur des matériaux de type régolithe (couche granulaire très fine produite par l’impact de météorites à la surface d’un corps sans atmosphère) et la question de sa généralisation à d’autres milieux est encore ouverte. Pour rester général, nous choisissons donc de ne pas encoder cette relation dans la fonction à inverser, mais nous l’utiliserons comme outil de vérification et d’analyse des résultats d’inversion.

2.1.4 Incertitude sur les mesures

Un des intérêts majeurs de l’approche bayésienne est de pouvoir naturellement prendre en compte une incertitude sur les observations. En effet, comme tout processus expérimental, les mesures de réflectance sont nécessairement entachées d’une certaine incertitude. [Souchon, 2012] en cite plusieurs facteurs, comme l’imprécision sur les bras des instruments de mesure en terme de configuration géométrique, les variations temporelles de l’éclairement ou les bruits instrumentaux. Dans le cas d’un pré-traitement complexe produisant les observables à inverser, comme c’est le cas notamment pour les observations satellitaires ([Ceamanos et al., 2013], cf section 2.3.2), chaque étape du processus peut ajouter une incertitude. Dans notre formalisme, cette incertitude est modélisée par l’écart-type σ_{obs} associé à chaque observation. Dans la suite, il sera soit fourni directement par l’expert avec les mesures \mathbf{y}_{obs} (comme par exemple dans la section 2.3.1), ou défini en terme de rapport signal sur bruit (comme dans la section 2.3.1).

Remarquons que, suivant par exemple [Tarantola et al., 1982], notre formalisme ne distingue pas l’incertitude sur les mesures d’une éventuelle incertitude sur le modèle lui-même. On peut comprendre ce formalisme de deux manières équivalentes : on peut considérer que σ_{obs} est la somme de ces deux incertitudes ; ou alors supposer que le modèle physique est considéré comme parfait. Nous reviendrons sur cette question dans le prochain chapitre, section 3.1.

2.1.5 Choix d’implémentation

La fonctionnelle réellement utilisée dans la suite de ce chapitre diffère du modèle présenté plus haut par trois aspects mineurs. Tout d’abord, nous utilisons le *facteur de réflectance* (quantité relative sans dimension)

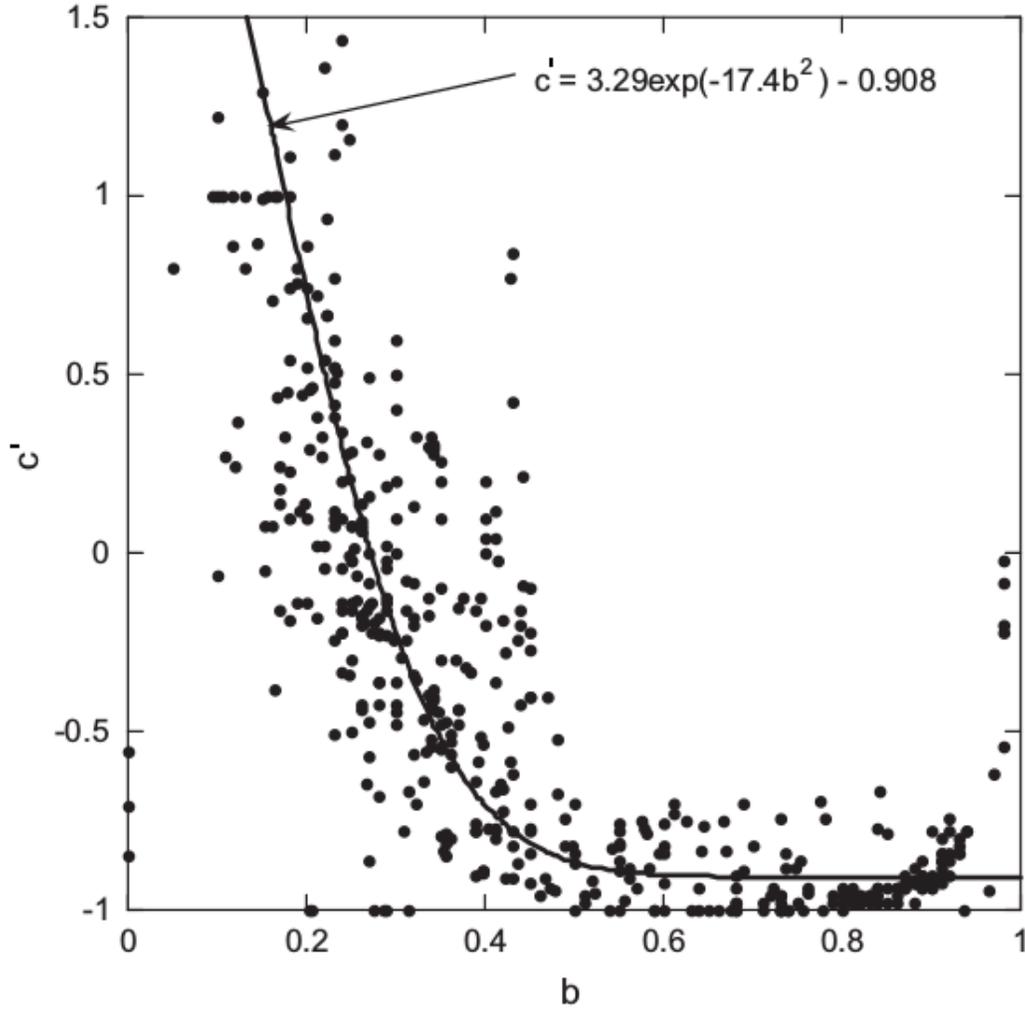


FIGURE 2.2 – Relation empirique du hockey-stick entre les paramètres b et c (graphe extrait de [Hapke, 2012]).

à la place de la réflectance, qui est défini par

$$r_G(\omega, \bar{\theta}, b, c, h, B_0) = \frac{\pi}{\cos \theta_0} f_{BRDF,G}(\omega, \bar{\theta}, b, c, h, B_0)$$

De plus, nous appliquons le changement de variable $\gamma = 1 - \sqrt{1 - \omega}$ afin d'éviter une forte non linéarité de $f_{BRDF,G}$ au voisinage de $\omega = 1$. En effet, on observe que $f_{BRDF,G}$ est équivalent à $\sqrt{1 - \omega}$ quand ω est proche de 1, ce qui suggère que la dérivée partielle de $f_{BRDF,G}$ en ω diverge, faisant de $f_{BRDF,G}$ une fonctionnelle difficilement approximable par un modèle localement linéaire. Nous avons observé une amélioration pour certains matériaux très brillants, et ce changement n'impacte pas le reste des inversions. Enfin, suivant une pratique courante en statistique, nous travaillons dans un espace \mathcal{X} normalisé, c'est à dire que nous considérons en fait, pour $\mathbf{x} \in [0, 1]^6$,

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = f_{BRDF,G}(x_1, 30x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$$

Par ailleurs, pour le modèle de Hapke réduit à 4 paramètres, nous fixons les valeurs par défaut de B_0 et

h (paramètres non estimés) à 0 et 0.1 respectivement.

Modèle de Hapke

```
# pre-compute some geometrical constants needed to
# evaluate the Hapke's model
incidence, emergence, azimuth = 40, 20, 0
geometry_details = HapkeFunc.GeometryInfos(incidence, emergence, azimuth)

# choose the variant for the multiple diffusion function
# between Hapke1993 and Hapke2002
variant = HapkeFunc.Variant2002()

# compute the reflectance factor from the physical parameters
r = HapkeFunc.hapke(omega, theta_bar, b, c, h, B0, geometry_details, variant)

# -- an higher-level model object -- #

# define the geometries of the measurements
incidences = [10,20,20,30]
emergences = [20, 20, 50, 50]
azimuths = [0,0,0,30]
geometries = Models.HapkeGeometries(incidences, emergences, azimuths)

# choose whether to use only the 4 first x parameters (default is true)
partiel = true

# choose whether to use the linearized version of F (default is true)
w_linear = true

# 'model' satisfies a common interface defining the actual
# function to invert (see the details in annexe)
model = Models.Hapke("experience label", geometries;
    partiel = partiel, w_linear = w_linear)
```

2.1.6 Conclusion

Nous avons présenté dans les grandes lignes le modèle de Hapke, qui est utilisé dans la suite de ce chapitre pour analyser des observations photométriques. Une fois les géométries d'observations $(G_d)_{d=1..D}$ fixées, la fonctionnelle à inverser est donc donnée par :

$$F_{hapke}(\mathbf{x}) = (r_{G_1}(\mathbf{x}), \dots, r_{G_D}(\mathbf{x}))$$

Dans cette thèse, nous ne discutons pas de la pertinence du modèle de Hapke sur le plan physique : bien que certains travaux ([[Shepard and Helfenstein, 2007](#), [Helfenstein and Shepard, 2011](#)]) montrent que les paramètres du modèle sont parfois difficilement reliables à des propriétés physiques, ce modèle est couramment utilisé en planétologie. Cela dit, nous explorerons tout de même dans le chapitre suivant (section [3.1](#)) une approche permettant de tester la capacité d'un modèle physique à reconstruire une série d'observations.

2.2 Comparaison avec les méthodes de référence MCMC

Nous comparons maintenant la méthodologie proposée dans le chapitre précédent à des méthodes de l'état de l'art en inversion bayésienne. Comme présenté en introduction, la famille de méthodes la plus directement comparable à notre approche est la famille des méthodes MCMC. Nous considérons le très répandu algorithme de Metropolis-Hastings et nous nous comparons aussi à la plus récente méthode *Hamiltonian Monte Carlo*, dans sa version *No U-Turn* ([Homan and Gelman, 2014]). Nous utilisons les implémentations fournies par les packages Julia *KissMCMC* et *Mamba* avec leurs paramètres par défaut.

L'objectif de cette section est de valider l'approche sur le modèle de Hapke, en terme de précision numérique et de temps de calcul. Nous utilisons des géométries réalistes, provenant d'expériences que nous présenterons en détails dans la section 2.3, et nous utilisons uniquement des données synthétiques, pour lesquelles nous connaissons donc une vérité de terrain. Les $N_{obs} = 100$ observations sont générées en prenant \mathbf{x}_{obs} suivant des courbes sinusoïdales, balayant l'espace des paramètres, et en calculant $\mathbf{y}_{obs} = F(\mathbf{x}_{obs})$. L'écart-type associé aux observations est défini par $\sigma_{obs} = \frac{\mathbf{y}_{obs}}{\alpha}$, où α est un rapport signal sur bruit précisé ci-dessous. Nous reprenons les trois critères utilisés dans la section 1.3.4 :

Erreur sur la variable \mathbf{x} (\bar{E}) : moyenne sur la série d'observations de la différence

$$E(\mathbf{x}_{pred}) = \|\mathbf{x}_{pred} - \mathbf{x}_{obs}\|_{\infty}; \bar{E} = \frac{1}{N_{obs}} \sum_{n=1}^{N_{obs}} E(\mathbf{x}_{pred,n})$$

Erreur de reconstruction (\bar{R}) : moyenne sur la série d'observations de l'erreur de reconstruction relative

$$R(\mathbf{x}_{pred}) = \frac{\|F(\mathbf{x}_{pred}) - \mathbf{y}_{obs}\|_2}{\|\mathbf{y}_{obs}\|_2}; \bar{R} = \frac{1}{N_{obs}} \sum_{n=1}^{N_{obs}} R(\mathbf{x}_{pred,n})$$

Temps de calcul : temps de calcul de la phase de prédiction pour toutes les observations. Le temps de calcul de la phase d'apprentissage n'est pas pris en compte, puisque les méthodes MCMC n'ont pas d'étape équivalente et qu'il ne dépend pas du nombre d'observations à inverser.

2.2.1 Inversion du modèle de Hapke à quatre paramètres

Nous considérons ici deux ensembles de géométries (définissant deux fonctionnelles à inverser) : la série des géométries de mesure de l'expérience *Nontronite* ($D = 10$, section 2.3.1) et la série des géométries de mesure de l'expérience *MukundpuraBloc* ($D = 70$, section 2.3.1). Pour bien distinguer cette expérience sur des données synthétiques de l'inversion des mesures présentées plus loin, nous nommons ces deux ensembles *set-G10* et *set-G70* respectivement. Ces géométries ne permettant pas de contraindre l'effet d'opposition, nous utilisons le modèle de Hapke réduit à quatre paramètres. Pour chacun, nous comparons les résultats pour plusieurs estimateurs et valeurs de paramètres, choisies pour obtenir des erreurs comparables (tout en minimisant les temps de calcul) :

MCMC - Metropolis - Hastings (MH) nombre d'itérations : $10^4, 10^5, 10^6$

MCMC - Hamiltonian Monte Carlo (HMC) nombre d'itérations : 1000, 10^4 et 10^5 pour la série *Nontronite*, $2 \cdot 10^4$ pour la série *MukundpuraBloc*.

Importance Sampling (IS) nombre d'échantillons : $2 \cdot 10^4, 2 \cdot 10^5, 2 \cdot 10^6$

Incremental Mixture Importance Sampling (IMIS) (I_0, J, B) : (1200, 200, 25), (2000, 400, 10), (2000, 400, 25)

Dans cet exemple synthétique, nous cherchons à éviter le cas difficile où la loi a-posteriori est peu contrainte. Pour cela, nous choisissons donc un rapport signal sur bruit des observations de $\alpha = 1000$. Le nombre de composantes est fixé à $K = 50$ et le bruit sur le jeu d'apprentissage vaut $\sigma_{train} = 0.0001$. En plus des tableaux 2.2 et 2.3 présentant une information moyennée, les figures 2.3 et 2.4 détaillent les résultats observation par observation. Pour une question de lisibilité, nous nous restreignons dans ces figures aux estimateurs $\bar{\mathbf{x}}_G$, $\bar{\mathbf{x}}_{IS-G}$ ($I = 2 \cdot 10^6$), $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ ($I_0 = 2000, B = 4000, J = 25$) et $\bar{\mathbf{x}}_{MCMC-HMC}$ ($I = 10^4$).

Série set-G10 Les résultats de l'inversion de cette série sont présentés dans le tableau 2.2 et la figure 2.3. Concernant les méthodes GLLiM, IS et IMIS, on retrouve la tendance présentée dans le chapitre précédent : le temps de calcul de la méthode GLLiM seule est extrêmement compétitif, mais l'erreur de prédiction reste importante. L'Importance Sampling simple permet une certaine amélioration, mais reste encore loin de la précision des méthodes MCMC. A temps de calcul égal, c'est à dire pour $I = 2 \cdot 10^5$ pour IS et $I = 1000$ pour HMC, l'erreur \bar{E} pour IS est environ 4 fois supérieure et l'erreur de reconstruction environ 10 fois supérieure.

L'algorithme HMC obtient de meilleures performances que MH : pour un même nombre d'itérations, l'erreur est presque un ordre de grandeur plus faible (\bar{E} est environ 2 fois plus faible, \bar{R} environ 4 fois plus faible). Cette amélioration se fait au prix d'un temps de calcul largement plus important : la méthode HMC est environ 400 fois plus lente que la méthode MH. Pour la méthode HMC, on remarque que le gain de précision en fonction du nombre d'échantillons stagne à $I = 1000$. A l'inverse, la précision de la méthode MH augmente avec le nombre d'échantillons générés.

Les performances de la méthode IMIS augmentent avec le nombre de points générés. On remarque que le nombre d'itérations J est le paramètre le plus déterminant. Finalement, les algorithmes MCMC-MH ($I = 10^6$), MCMC-HMC ($I = 1000$) et IMIS ($I_0 = 2000, B = 400, J = 25$) présentent un niveau d'erreur similaire, et le temps de calcul pour IMIS est 7 à 9 fois plus faible.

La figure 2.3 montre en effet que les méthodes HMC et IMIS retrouvent très précisément les paramètres physiques. On note cependant une exception pour la variable $\bar{\theta}$ et les indices $n \in \llbracket 30, 60 \rrbracket$. Comme les deux méthodes concordent et prédisent une moyenne décalée de la valeur \mathbf{x}_{obs} initiale, il s'agit certainement d'un cas où le mode et la moyenne de la loi a-posteriori ne sont pas confondus. Cela peut en retour s'expliquer par le fait que les données simulées ne correspondent pas forcément à des valeurs physiques réalistes.

Prediction scheme	\bar{E}	\bar{R}	Time
$\bar{\mathbf{x}}_{MCMC-MH} - I : 10^4$	0.091 (0.114)	0.0036 (0.0033)	3.7 s
$\bar{\mathbf{x}}_{MCMC-MH} - I : 10^5$	0.0281 (0.0406)	0.0009 (0.0007)	20.4 s
$\bar{\mathbf{x}}_{MCMC-MH} - I : 10^6$	0.0125 (0.0201)	0.0004 (0.0003)	3 m 17 s
$\bar{\mathbf{x}}_{MCMC-HMC} - I : 10^3$	0.011 (0.0218)	0.0002 (0.0003)	2 m 27 s
$\bar{\mathbf{x}}_{MCMC-HMC} - I : 10^4$	0.011 (0.0222)	0.0002 (0.0003)	24 m
$\bar{\mathbf{x}}_{MCMC-HMC} - I : 10^5$	0.0108 (0.0221)	0.0002 (0.0003)	3 h 44 m
$\bar{\mathbf{x}}_G$	0.1432 (0.1272)	0.0614 (0.0592)	0.05 s
$\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G} - I_0 : 1000, B : 200, J : 25$	0.0203 (0.0433)	0.0004 (0.001)	10.3 s
$\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G} - I_0 : 2000, B : 400, J : 10$	0.0293 (0.0674)	0.0005 (0.0007)	6.2 s
$\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G} - I_0 : 2000, B : 400, J : 25$	0.0136 (0.0261)	0.0002 (0.0004)	20.8 s
$\bar{\mathbf{x}}_{IS-G} - I : 2 \cdot 10^4$	0.0684 (0.0943)	0.0059 (0.0068)	11.5 s
$\bar{\mathbf{x}}_{IS-G} - I : 2 \cdot 10^5$	0.052 (0.0625)	0.0035 (0.0043)	1 m 53 s
$\bar{\mathbf{x}}_{IS-G} - I : 2 \cdot 10^6$	0.0364 (0.0493)	0.0025 (0.0035)	18 m

TABLE 2.2 – Géométries de la série *Nontronite*. Comparaison des performances avec les méthodes MCMC en termes de temps de calcul, d'erreur de prédiction et d'erreur de reconstruction. Les valeurs optimales sont en gras et les écart-types entre parenthèses.

Série set-G70 Les résultats de l'inversion de cette série sont présentés dans le tableau 2.3 et la figure 2.4. On retrouve les mêmes tendances que précédemment, mais on note que la méthode IMIS est cette fois moins performante que la méthode HMC. L'erreur de prédiction \bar{E} est environ 2 fois plus importante pour IMIS ($I_0 = 2000, B = 400, J = 25$) que pour HMC ($I = 1000$). Cela dit, l'erreur pour IMIS reste acceptable (environ 2%) et la rapidité d'exécution est préservée (environ 20 fois plus rapide). De même, IMIS atteint le même niveau d'erreur de reconstruction que MCMC-MH ($I = 10^6$) en étant environ 20 fois plus rapide.

La figure 2.4 montre que l'estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ retrouve généralement bien les paramètres physiques, avec l'exception notable du paramètre $\bar{\theta}$ entre les indices 30 et 75.

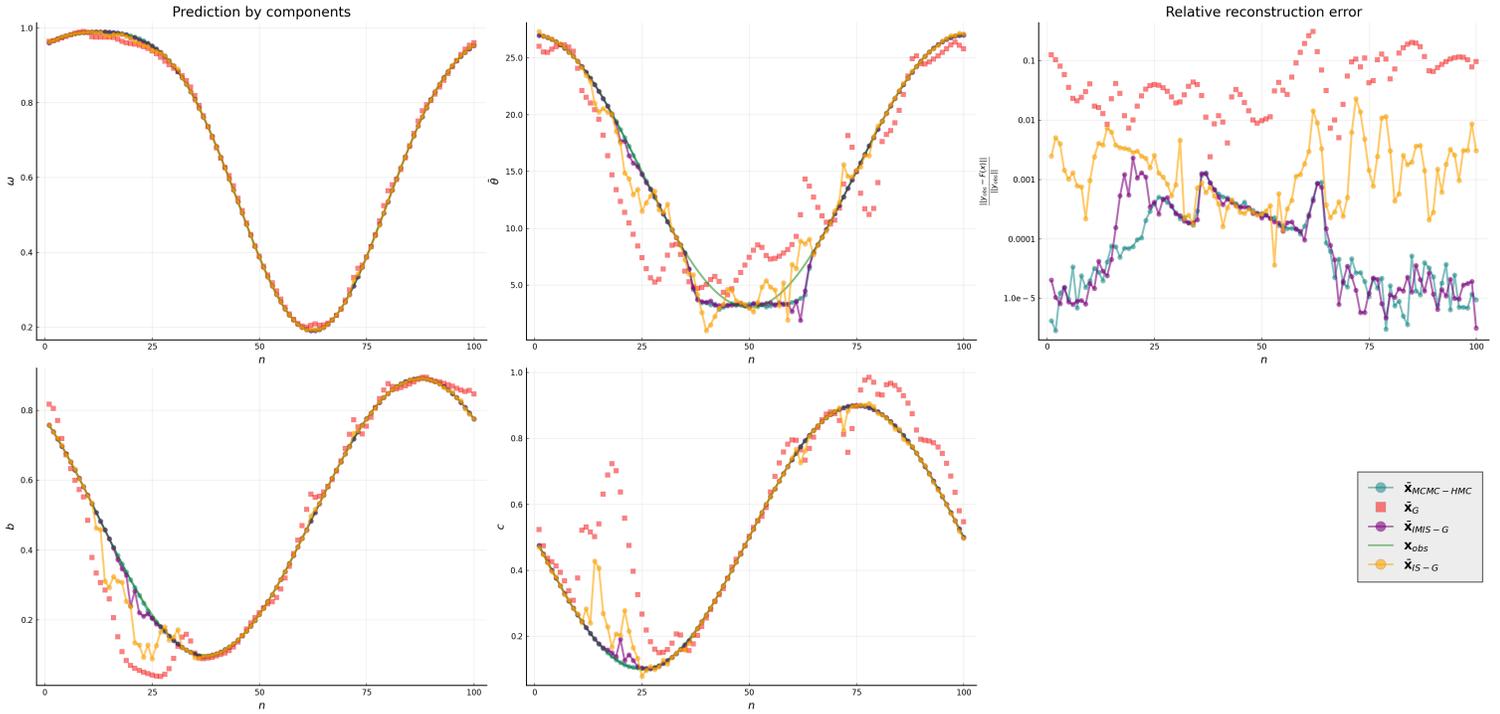


FIGURE 2.3 – Géométries de la série *set-G10*. Inversion d’observations synthétiques avec les estimateurs $\bar{x}_{MCMC-HMC}$ (en bleu sarcelle), \bar{x}_G (en rouge), \bar{x}_{IS-G} (en orange) et \bar{x}_{IMIS-G} (en violet).

Prediction scheme	\bar{E}	\bar{R}	Time
$\bar{x}_{MCMC-MH} - I : 10^4$	0.0613 (0.0806)	0.0036 (0.0037)	10.3 s
$\bar{x}_{MCMC-MH} - I : 10^5$	0.0243 (0.039)	0.0012 (0.0009)	1 m 46 s
$\bar{x}_{MCMC-MH} - I : 10^6$	0.0122 (0.0209)	0.0005 (0.0005)	17 m
$\bar{x}_{MCMC-HMC} - I : 10^3$	0.0092 (0.0199)	0.0001 (0.0001)	18 m
$\bar{x}_{MCMC-HMC} - I : 10^4$	0.0086 (0.0185)	0.0001 (0.0001)	3 h 35 m
$\bar{x}_{MCMC-HMC} - I : 2 \cdot 10^4$	0.0085 (0.0185)	0.0001 (0.0001)	7 h 7 m
\bar{x}_G	0.189 (0.1585)	0.1174 (0.1685)	0.48 s
$\bar{x}_{IMIS-G} - I_0 : 1000, B : 200, J : 25$	0.0462 (0.0718)	0.0015 (0.0032)	28.4 s
$\bar{x}_{IMIS-G} - I_0 : 2000, B : 400, J : 10$	0.0629 (0.0927)	0.0044 (0.0049)	24.7 s
$\bar{x}_{IMIS-G} - I_0 : 2000, B : 400, J : 25$	0.0224 (0.0434)	0.0004 (0.0009)	54.0 s
$\bar{x}_{IS-G} - I : 2 \cdot 10^4$	0.1209 (0.1141)	0.0219 (0.0148)	58.5 s
$\bar{x}_{IS-G} - I : 2 \cdot 10^5$	0.0794 (0.0767)	0.0115 (0.0071)	9 m 15 s
$\bar{x}_{IS-G} - I : 2 \cdot 10^6$	0.0501 (0.0499)	0.0067 (0.0046)	1 h 32 m

TABLE 2.3 – Géométries de la série *MukundpuraBloc*. Comparaison des performances avec les méthodes MCMC en termes de temps de calcul, d’erreur de prédiction et d’erreur de reconstruction. Les valeurs optimales sont en gras et les écart-types entre parenthèses.

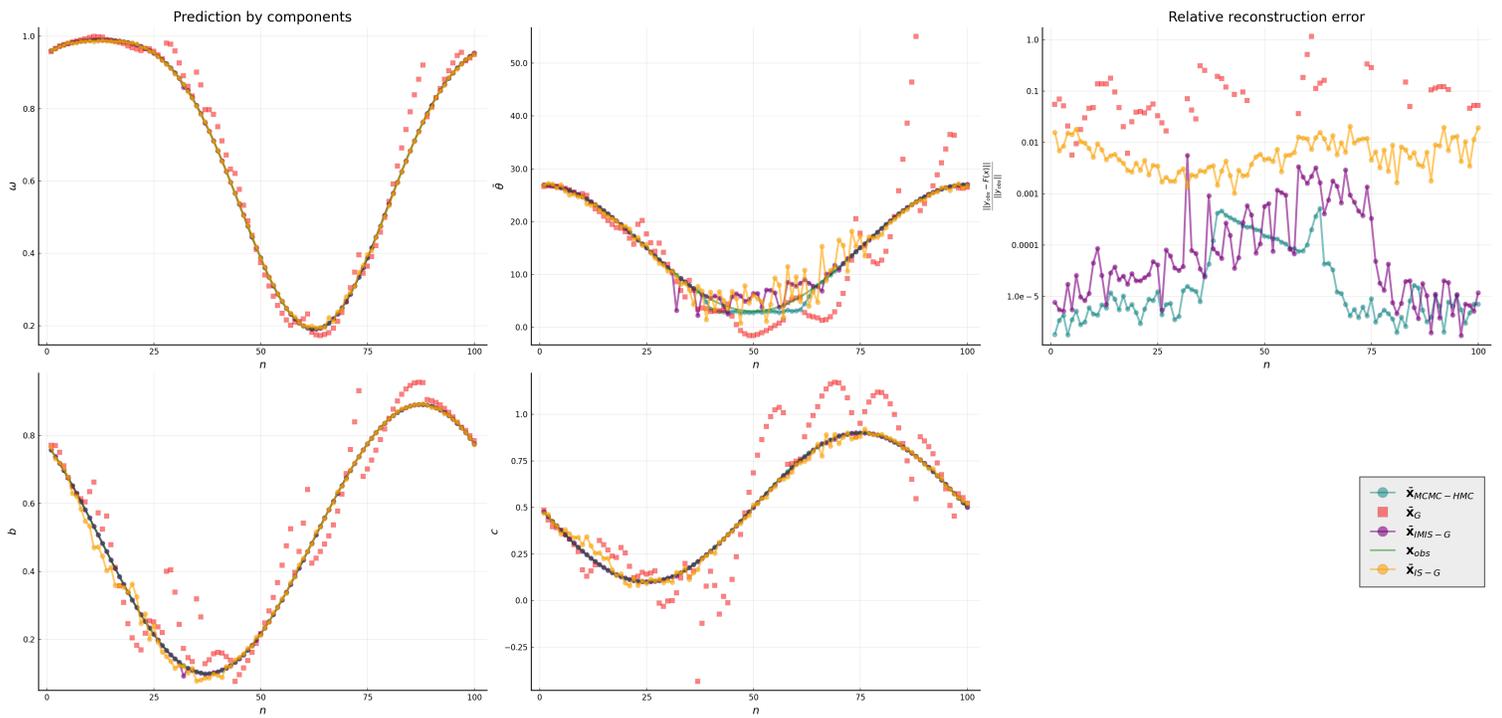


FIGURE 2.4 – Géométries de la série *set-G70*. Inversion d'observations synthétiques avec les estimateurs $\bar{x}_{MCMC-HMC}$ (en bleu sarcelle), \bar{x}_G (en rouge), \bar{x}_{IS-G} (en orange) et \bar{x}_{IMIS-G} (en violet).

2.2.2 Inversion du modèle de Hapke à six paramètres

On s'intéresse ici au modèle de Hapke complet, à 6 paramètres, qui prend en compte l'effet d'opposition. On considère un ensemble de géométries plus large ($D = 336$, décrit en annexe C.4) que ce que permettent en général les conditions de mesure. L'intérêt est double : on souhaite d'une part étudier le comportement de la méthode en grande dimension et d'autre part vérifier si ce choix de géométries permet effectivement de déterminer les paramètres B_0 et h de l'effet d'opposition. Le bruit sur les observations est ici défini par $\sigma_{obs} = \max(\frac{y_{obs}}{50}, 0.05)$, le jeu d'entraînement est bruité avec $\sigma_{train} = 0.005$ et le nombre de composants est fixé à $K = 100$. Les paramètres des méthodes comparées sont

- pour la méthode MCMC - MH, $I = 10^6$
- pour la méthode MCMC - HMC, $I = 1000$
- pour la méthode IMIS, $I_0 = 2500, B = 1000, J = 20$

La figure 2.5 montre le résultat de la procédure d'inversion. Comme évoqué dans la section 1.3.1, plusieurs prédictions \bar{x}_G tombent en dehors de l'intervalle théorique retenu. En conséquence, les échantillons générés selon la loi de proposition sont tous rejetés, et la prédiction \bar{x}_{IMIS-G} est invalide. Pour palier cette difficulté, nous appliquons l'idée décrite dans la section 1.3.1 en ajoutant un bruit $\sigma_{add} = 5$ à la loi de proposition. La figure 2.6 montre que les points invalides ont bien été corrigés. L'estimateur \bar{x}_{IMIS-G} est globalement proche de $\bar{x}_{MCMC-HMC}$, et ces deux estimateurs retrouvent de manière satisfaisante les 4 paramètres $\omega, \bar{\theta}, b, c$, l'estimation du paramètre $\bar{\theta}$ étant tout de même dégradée par rapport aux autres. En revanche, malgré le choix éduqué des géométries, l'effet d'opposition (variables B_0 et h) est nettement moins bien contraint (variance plus importante et fluctuations importantes des estimateurs) et interfère avec l'estimation de $\bar{\theta}$. Le tableau 2.4 montre que l'erreur \bar{E} est assez importante, ce qui est certainement dû à la prise en compte de B_0 et h . L'erreur de reconstruction \bar{R} est quant à elle beaucoup plus acceptable, ce qui confirme l'idée que les paramètres B_0 et h ont une influence limitée sur la valeur de réflectance prédite par le modèle de Hapke.

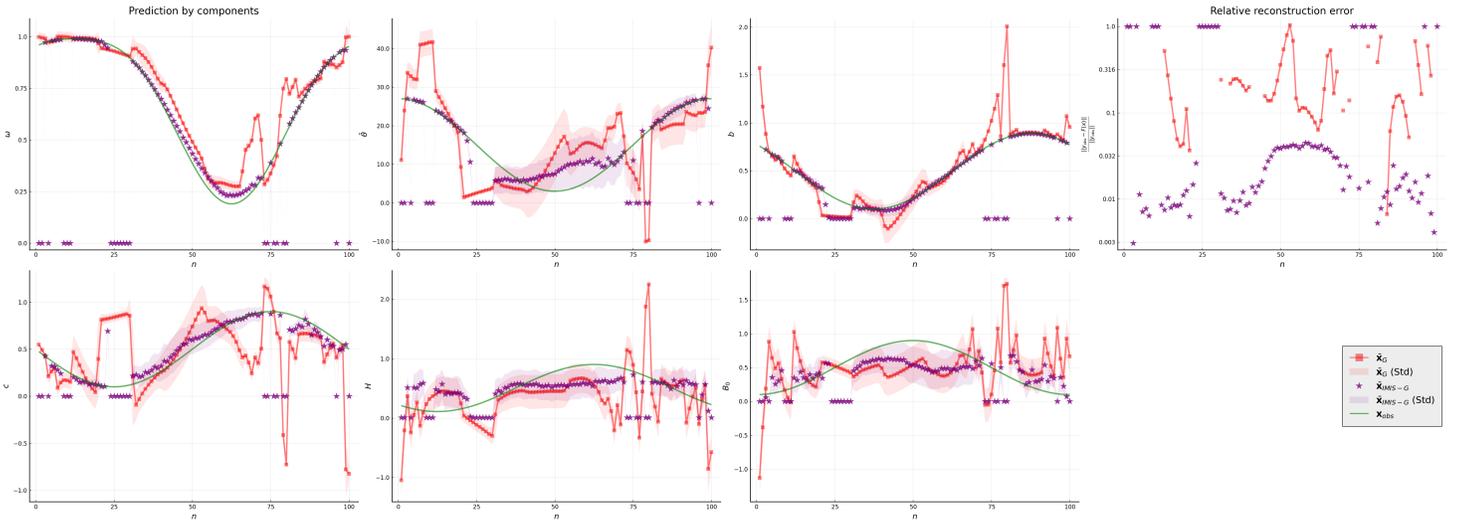


FIGURE 2.5 – Inversion du modèle de Hapke complet ($D = 336$). \bar{x}_G est en rouge, \bar{x}_{IMIS-G} en violet. Les points invalides ont pour coordonnées la valeur $(0, 0, 0, 0, 0, 0)$.

2.2.3 Conclusion

Cette série d'expériences numériques montre que l'approche par apprentissage et échantillonnage d'importance est une alternative viable aux méthodes MCMC. L'erreur de prédiction de l'estimateur \bar{x}_{IMIS-G} est acceptable (et même comparable à celle de $\bar{x}_{MCMC-HMC}$ pour deux des trois expériences) et le gain en temps de calcul est significatif (entre 7 et 20 fois plus rapide). Au-delà de cette comparaison, nous avons

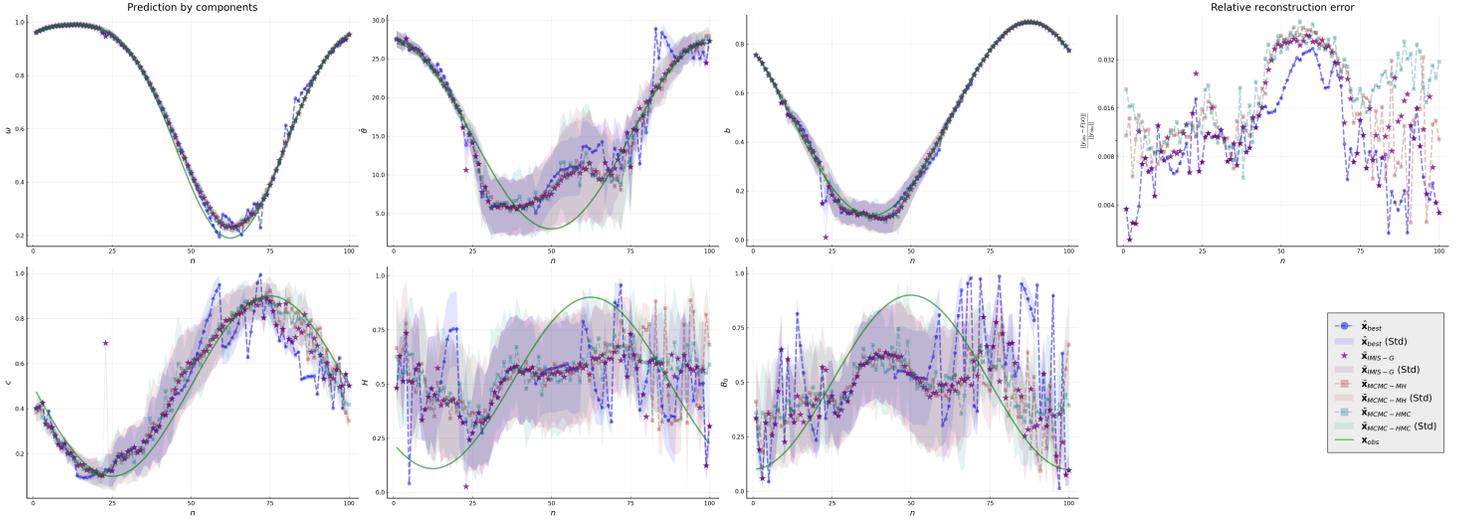


FIGURE 2.6 – Inversion du modèle de Hapke complet ($D = 336$), avec ajout de bruit sur la loi de proposition. \bar{x}_{IMIS-G} est en violet, \hat{x}_{best} en bleu, $\bar{x}_{MCMC-MH}$ en marron et $\bar{x}_{MCMC-HMC}$ en bleu sarcelle.

Prediction scheme	\bar{E}	\bar{R}	Time
$\bar{x}_{MCMC-MH} - I : 10^6$	0.2795 (0.1241)	0.0195 (0.0136)	1 h 21 m
$\bar{x}_{MCMC-HMC} - I : 10^3$	0.259 (0.1051)	0.0233 (0.0125)	3 h 18 m
$\bar{x}_{IMIS-G} - I_0 : 2500, B : 1000, J : 20$	0.271 (0.1109)	0.0172 (0.0127)	9 m
\hat{x}_{best} (idem)	0.3403 (0.166)	0.0124 (0.0089)	9 m

TABLE 2.4 – Modèle de Hapke en grande dimension ($D = 336$). Comparaison des performances avec les méthodes MCMC en termes de temps de calcul, d'erreur de prédiction et d'erreur de reconstruction. Les valeurs optimales sont en gras et les écart-types entre parenthèses.

aussi mis en lumière deux difficultés liées au modèle de Hapke : la variable $\bar{\theta}$ peut être peu contrainte (même avec une observation très précise) et l'effet d'opposition (variable B_0 et h) est lui aussi difficile à caractériser, même avec des géométries adaptées. Cela justifie notre choix de conserver la version réduite du modèle de Hapke dans la suite.

2.3 Analyse spectro-photométrique de mesures de réflectance

La section précédente a montré que la méthodologie GLLiM avec échantillonnage permet d’obtenir des résultats comparables aux méthodes MCMC. Nous l’employons donc maintenant pour analyser plusieurs jeux de données. Nous avons aussi montré que la méthode IMIS est de manière générale plus performante que IS, ce qui nous incite à ne conserver que les estimateurs $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$, $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,1}$, $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,2}$ et $\hat{\mathbf{x}}_{best}$. Comme discuté dans le chapitre précédent, $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ et $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ permettent de rapidement distinguer les cas uni-modaux des cas bi-modaux. Le cas échéant, l’analyse des estimateurs $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,2}$ permet d’affiner l’exploration de la loi a-posteriori. Nous séparons dans la suite les jeux de données issus d’expériences en laboratoire des observations satellitaires. Les premiers prennent la forme d’un spectre : un même échantillon est examiné à différentes longueurs d’onde (dépendance spectrale). Les secondes présentent deux dimensions : chaque point spatial est observé à différentes longueurs d’onde (dépendance spatial et spectrale). Dans les deux cas, chaque observation est inversée indépendamment des autres : la potentielle structure spectrale (ou spatiale) n’est pas directement exploitée. Elle sert plutôt de critère d’évaluation de la qualité de l’inversion.

2.3.1 Mesures de laboratoire

Echantillons minéraux

Nous reprenons ici les mesures présentées dans [Pilorget et al., 2016]. Cette expérience étudie 5 minéraux de propriétés chimiques et physiques diverses :

- un basalte (de *Medecine Lake Oregon*)
- un verre basaltique anhydre (de *Big Island, Hawaii*)
- une olivine (de la formation *San Carlos*)
- une nontronite
- une magnésite

Un goniomètre a été utilisé pour analyser un échantillon de ces matériaux concassés et mesurer leur réflectance. L’angle d’incidence est constant, fixé à 45° . Les $D = 10$ géométries de mesure sont ensuite réparties suivant deux azimuts : pour $\varphi = 0^\circ$, les angles d’émergences sont $(0^\circ, 15^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 70^\circ)$; pour $\varphi = 180^\circ$, $(15^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ, 70^\circ)$ (voir l’annexe C). Notons que la géométrie $(45^\circ, 70^\circ, 0^\circ)$ n’est pas disponible pour la magnésite. La réflectance est mesurée pour chaque géométrie et pour une série de longueurs d’onde allant de 400 à 2500 nm. Suivant [Pilorget et al., 2016], l’écart-type associé à chaque observation \mathbf{y}_{obs} est défini par $\sigma_{obs} = \max(\frac{y_{obs}}{20}, 0.01)$. Cela correspond la plupart du temps à une erreur relative de 5%. Dans le cas d’un matériau très sombre, la réflectance \mathbf{y}_{obs} est très basse. La formule ci-dessus permet donc d’assurer un bruit minium de 0.01 unité de réflectance. Nous appliquons la méthodologie proposée dans le chapitre précédent : le bruit sur le jeu d’apprentissage est fixé à $\sigma = 0.0001$ et le nombre de composants du mélange à $K = 50$. Les paramètres IMIS sont fixés à $(I_0, B, J) = (2500, 1000, 20)$. A titre de comparaison, la méthode MCMC (Metropolis-Hastings) avec un nombre d’itérations $I = 1000000$ est aussi appliquée. Les résultats de l’inversion sont présentés et commentés ci-dessous, échantillon par échantillon.

Verre basaltique (figure 2.7) L’estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ présente une bonne régularité spectrale, en accord avec [Pilorget et al., 2016] pour la variable ω . En revanche, on observe nettement que les lois a-posteriori ne sont pas très contraintes : la variabilité de $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ indique des zones larges de forte densité. Cela est confirmé par les centroïdes, pour lesquels l’erreur de reconstruction est généralement plus faible que la moyenne. Le critère de non-uniformité montre que les lois a-posteriori sont quand même éloignés de la loi uniforme. On observe la même hiérarchie que pour l’indice de dispersion : ω et c sont mieux déterminés que $\bar{\theta}$ et b . Remarquons aussi le changement de comportement en fonction de la longueur d’onde, bien marqué par l’indice de dispersion : on passe d’un cas bi-modal (400-800 nm) à un cas uni-modal (800-1300 nm), puis de nouveau à un cas bi-modal (1300-2500 nm).

Magnésite (figure 2.8) Là aussi, on retrouve les tendances spectrales de [Pilorget et al., 2016] : ω , $\bar{\theta}$ et b sont stationnaires, tandis que c décroît linéairement. L'estimateur $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ et les centroïdes montrent que deux solutions sont manifestement acceptables : on observe une nette différence pour la variable $\bar{\theta}$, surtout sur certaines fenêtres (1100-1500 et 1700-2400 nm), confirmée par l'augmentation de la dispersion. On penche ici pour un cas bi-modal car l'erreur de reconstruction des centroïdes est jusqu'à deux fois inférieure à celle de la moyenne.

Nontronite (figure 2.9) Le profil spectral du paramètre ω est bien retrouvé, et les tendances sont aussi en accord avec [Pilorget et al., 2016]. La variabilité de l'estimateur $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ est expliquée par le comportement des centroïdes, qui révèle un plateau dans la loi a-posteriori des trois paramètres $(\bar{\theta}, b, c)$. En effet, les centroïdes sont assez espacés et leur erreur de reconstruction est similaire à celle de la moyenne.

Olivine (figure 2.10) Les résultats sont conformes à [Pilorget et al., 2016]. On note que la prédiction par la moyenne est ici suffisante, puisque l'erreur de reconstruction de $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ n'est pas meilleure. Les paramètres ω et c sont très bien déterminés, à l'inverse de $\bar{\theta}$ et b qui présentent une variance plus importante.

Basalt (figure 2.11) En terme d'inversion, la série a un comportement similaire à l'échantillon d'olivine : la prédiction par la moyenne est en accord avec [Pilorget et al., 2016] et la prédiction par la moyenne minimise généralement l'erreur de reconstruction. On note cependant quelques observations pour lesquelles $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ diffère sensiblement de $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$: l'irrégularité engendrée ne semble pas faire sens physiquement, ce qui pourrait s'expliquer par exemple par un biais de mesure.

Relation hockey-stick Nous comparons nos résultats à la relation empirique du hockey-stick (figure 2.12). Sans surprise, l'estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ est conforme à [Pilorget et al., 2016]. L'estimateur $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ est moins régulier, et diffère surtout pour les séries Nontronite et Magnésite, tandis que les échantillons de Basalt, Verre basaltique et d'Olivine sont quasiment identiques.

Conclusion Les résultats de ces inversions sont globalement cohérents avec l'approche MCMC utilisée dans [Pilorget et al., 2016]. En revanche, les outils de diagnostics proposés ici révèlent que les lois a-posteriori ne sont pas toujours extrêmement précises, certainement du fait du nombre relativement faible de géométries ou de l'incertitude de la mesure. On peut globalement distinguer trois cas de figure :

- la loi a-posteriori est quasi uni-modale, avec $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ et $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ confondus (comme dans les figures 2.10 et 2.11)
- la loi a-posteriori est nettement bi-modale : les deux centroïdes $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,2}$ sont distincts de la moyenne (avec $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ oscillant entre les deux), et l'erreur de reconstruction pour $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ est plus importante que pour $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ (exemple en figure 2.8)
- la loi a-posteriori est assez peu contrainte, avec une forme "en plateau" : les deux centroïdes peuvent encore être distincts de la moyenne, mais cette fois les erreurs de reconstruction sont comparables (comme dans la figure 2.7)

Dans le troisième cas, les résultats pour les variables $\bar{\theta}$, b et c sont donc à interpréter avec prudence. Remarquons aussi que cette diversité de comportement est observé alors même que l'ensemble de géométries de mesures est fixé.

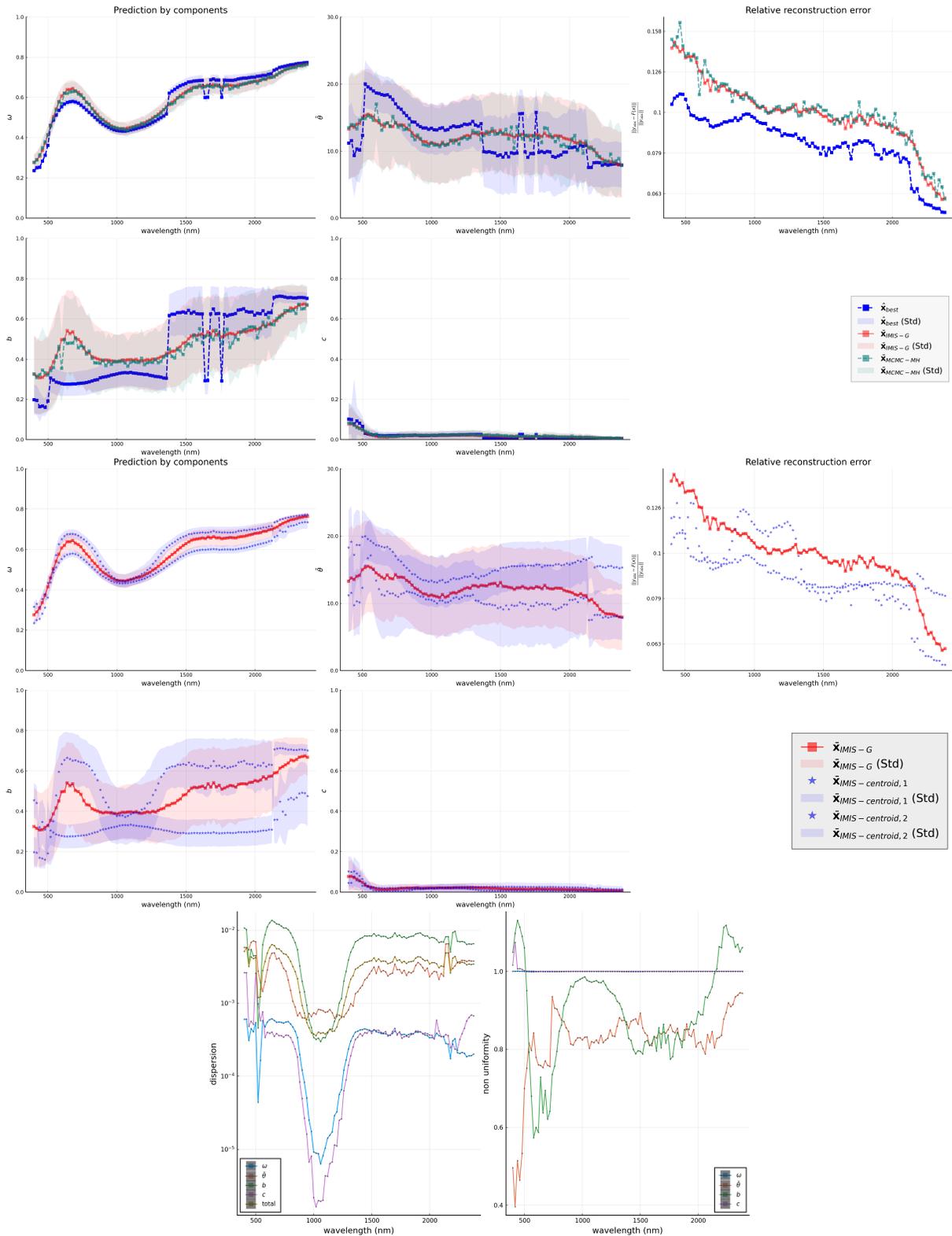


FIGURE 2.7 – Inversion de la série d’observations *Verre basaltique*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu, $\bar{x}_{MCMC-MH}$ en bleu sarcelle. Au milieu : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroides $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. Ordre des paramètres physiques, de gauche à droite puis de haut en bas : ω, θ, b, c . En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite). ω est en bleu, θ en orange, b en vert et c en violet.

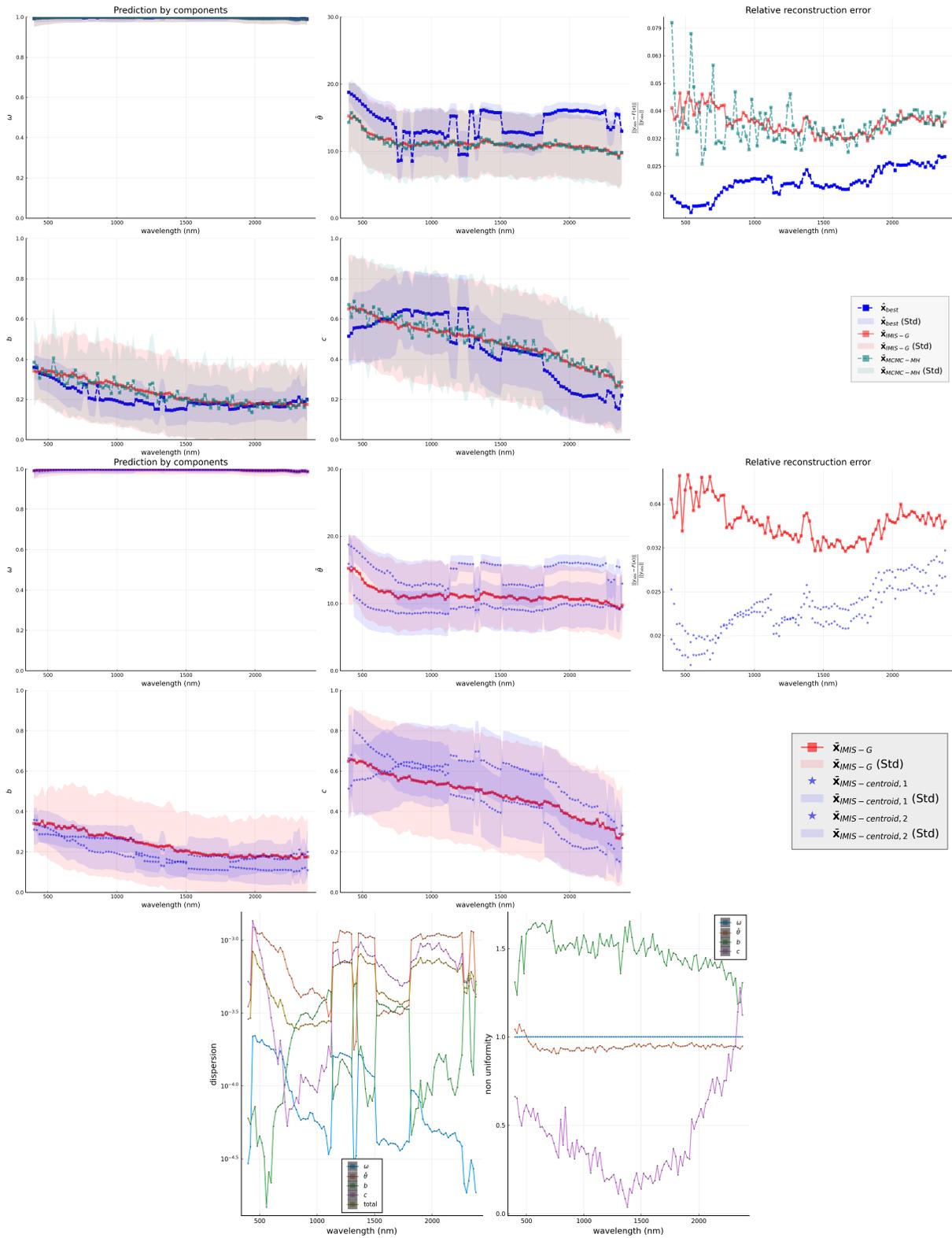


FIGURE 2.8 – Inversion de la série d’observations *Magnésite*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu, $\bar{x}_{MCMC-MH}$ en bleu sarcelle. Au milieu : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroides $\hat{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\hat{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite). Ordre des paramètres physiques, de gauche à droite puis de haut en bas : $\omega, \bar{\theta}, b, c$.

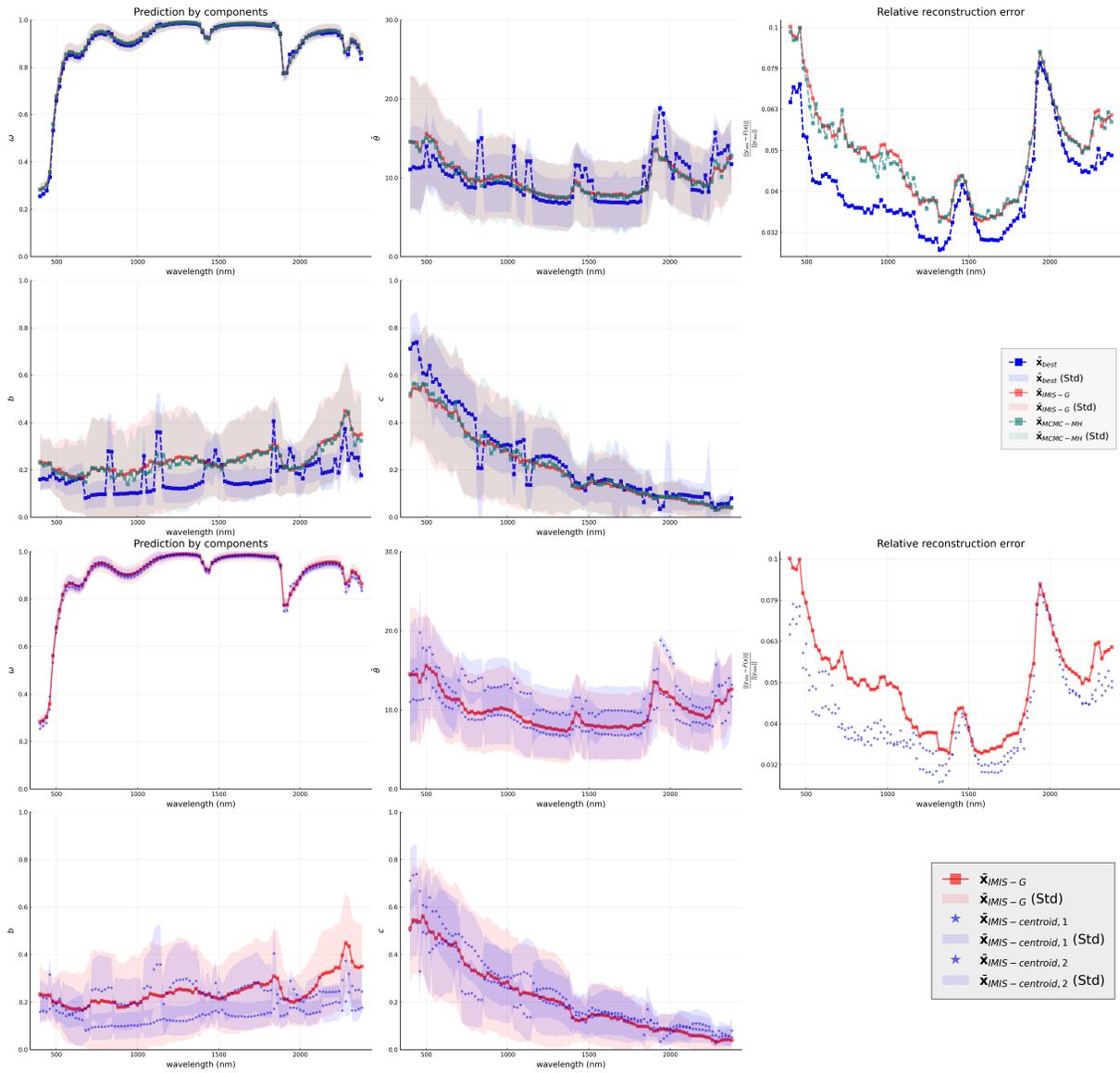


FIGURE 2.9 – Inversion de la série d’observations *Nontronite*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu, $\bar{x}_{MCMC-MH}$ en bleu sarcelle. En bas : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroides $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. Ordre des paramètres physiques, de gauche à droite puis de haut en bas : ω, θ, b, c . Les indices de variabilité sont en annexe D.1.

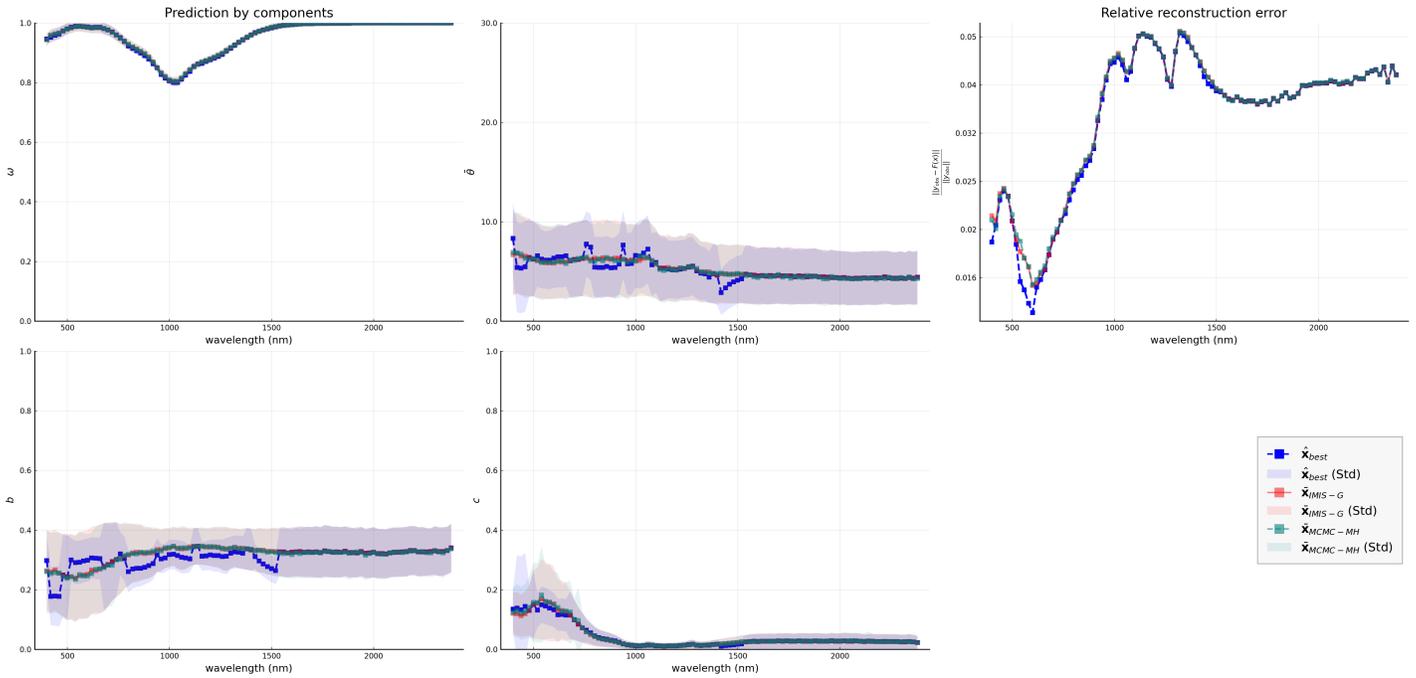


FIGURE 2.10 – Inversion de la série d’observations *Olivine*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu, $\bar{x}_{MCMC-MH}$ en bleu sarcelle. Ordre des paramètres physiques, de gauche à droite puis de haut en bas : $\omega, \bar{\theta}, b, c$. Les centroïdes et indices de variabilité sont en annexe D.1

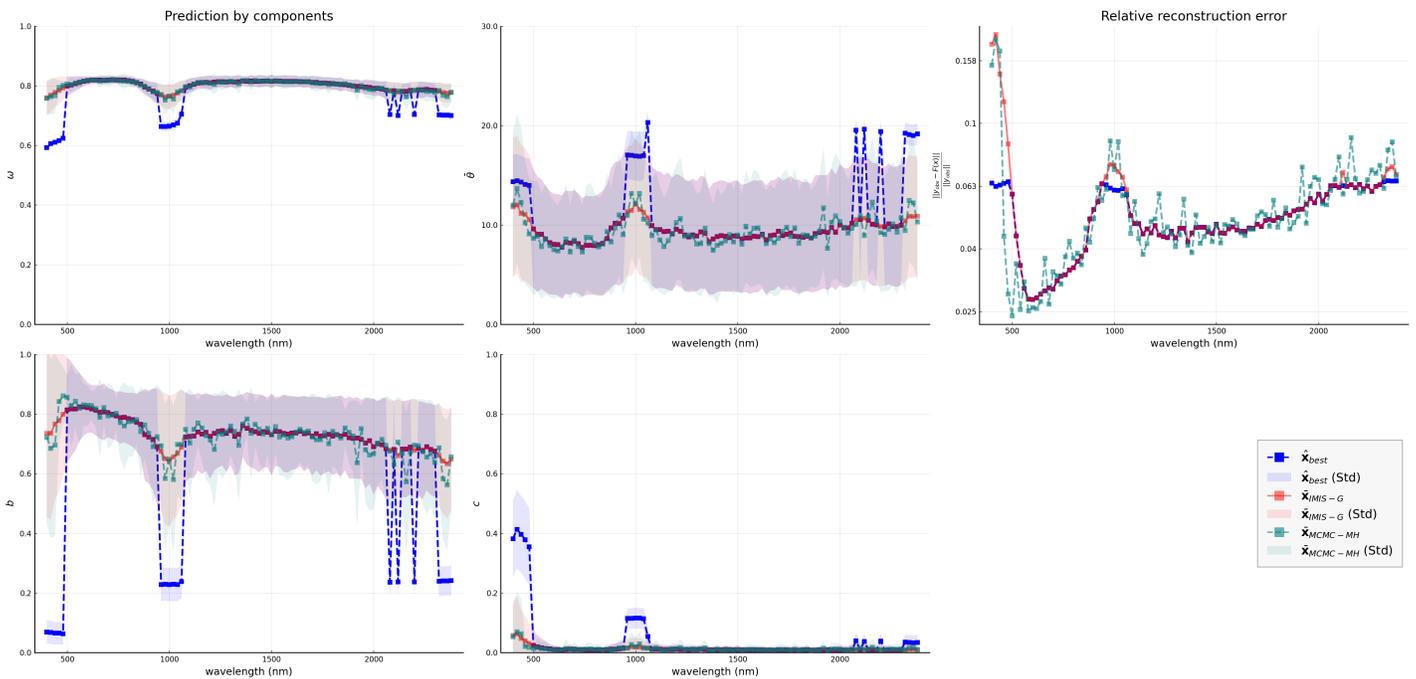


FIGURE 2.11 – Inversion de la série d’observations *Basalt*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu, $\bar{x}_{MCMC-MH}$ en bleu sarcelle. Ordre des paramètres physiques, de gauche à droite puis de haut en bas : $\omega, \bar{\theta}, b, c$. Les centroïdes et indices de variabilité sont en annexe D.1.

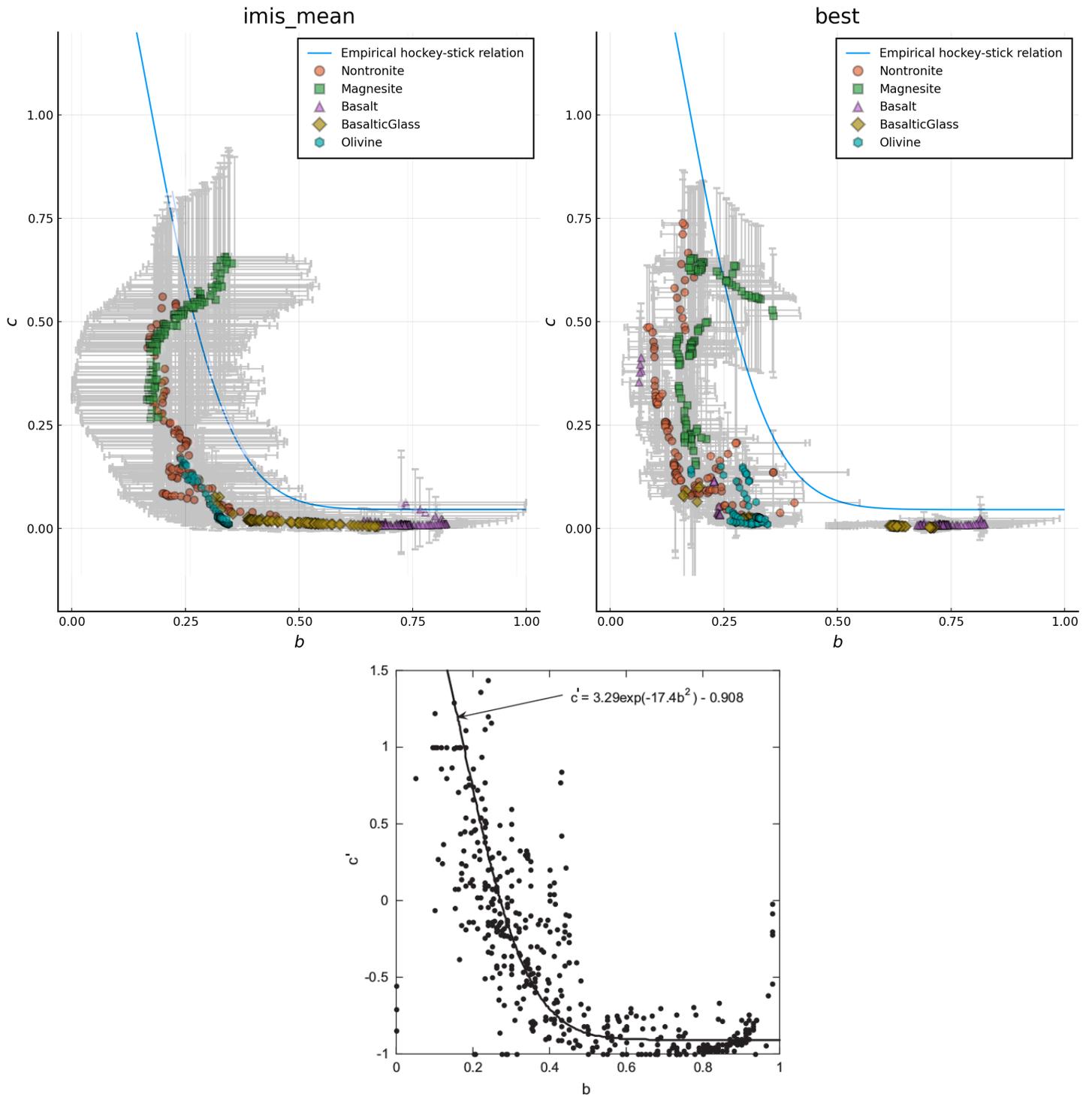


FIGURE 2.12 – Relation du hockey-stick dans l'espace (b, c) , pour les cinq échantillons. L'estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ est à gauche, $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ à droite. En bas : relation empirique de référence.

Météorites

On s'intéresse ici à une série de mesures effectuées à l'IPAG par S. Potin. Quatre échantillons sont étudiés :

- un fragment de la météorite Mukundpura (MukundpuraBloc) et une poudre obtenue en concassant cet échantillon (MukundpuraPoudre). La météorite Mukundpura est tombée en Inde en Juin 2017, et a été étudiée par exemple dans [Tripathi et al., 2018] et [Potin et al., 2019].
- un fragment de chondrite non classée (BlackyBloc) et sa version concassée (BlackyPoudre), photographié en figure 2.13.



FIGURE 2.13 – Échantillon d'une chondrite carbonnée non classée

On dispose cette fois de 70 géométries de mesures, dont les valeurs précises sont données en annexe C. Là aussi, pour chaque géométrie, la réflectance est mesurée pour environ 170 longueurs d'onde variant entre 500 et 4000 nm. Les mesures sont très précises : les rapports signal sur bruit (rapport entre l'observable et l'écart-type associé, moyenné sur les géométries et longueurs d'onde) sont de 341 pour MukundpuraBloc, 319 pour MukundpuraPoudre, 570 pour BlackyBloc et 605 pour BlackyPoudre, ce qui à titre de comparaison, est entre 15 et 30 fois plus précis que les mesures étudiées dans la section précédente. La figure 2.14 montre un sous-ensemble des courbes photométriques pour un choix de 4 géométries. On remarque que la valeur moyenne des réflectances est faible (< 0.07), ce qui est attendu pour un matériau sombre. La figure 2.15 représente la valeur moyenne de l'écart-type des observations.

Le bruit sur le jeu d'apprentissage est cette fois fixé à $\sigma = 0.000001$, le nombre de composants du mélange à $K = 50$. Les paramètres IMIS sont fixés à $(I_0, B, J) = (2500, 1000, 20)$.

Les figures 2.16 (MukundpuraBloc), 2.17 (MukundpuraPoudre), 2.18 (BlackyBloc) et 2.19 (BlackyPoudre) présentent les spectres des paramètres physiques obtenus après inversion. On remarque tout d'abord qu'ils présentent une certaine irrégularité spectrale locale : cela s'explique par le fait que l'irrégularité sur la mesure est conservée lors de l'inversion. Comme l'écart-type associé à une observation est faible, l'effet régularisant de la loi a-priori (uniforme) est négligeable. On remarque ensuite que les variances sont faibles, ce qui est induit là aussi par le faible écart-type sur l'observation. Les variables ω , b et c sont globalement bien contraintes. On peut retrouver sur le spectre ω la bande d'absorption autour de 3000 nm. Elle est moins marquée sur ω que sur la courbe photométrique, ce qui s'explique par la faible valeur moyenne de la réflec-

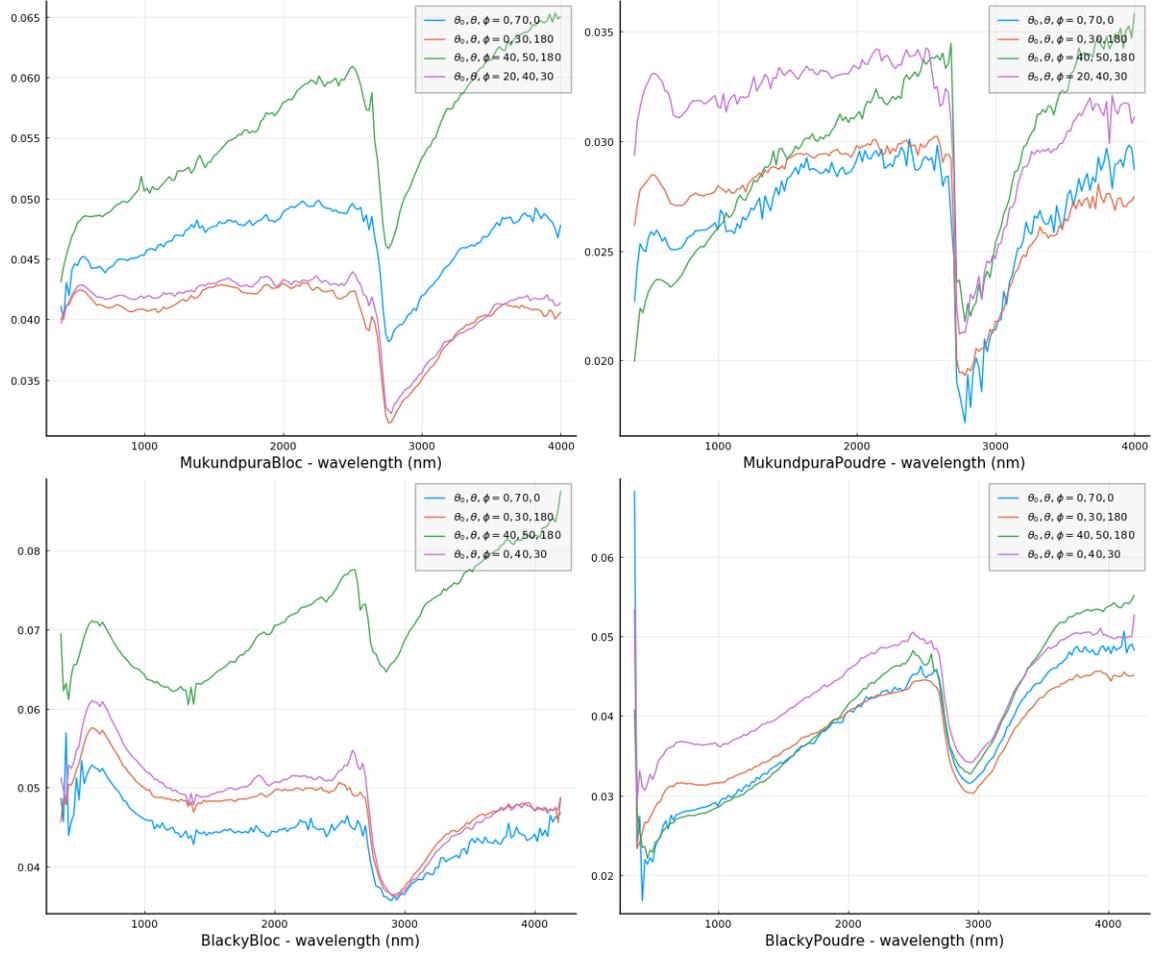


FIGURE 2.14 – Réflectance mesurée en fonction de la longueur d’onde. En haut : MukundpuraBloc et MukundpuraPoudre. En bas : BlackyBloc et BlackyBloc. Quatres configurations géométriques (θ_0, θ, ϕ) sont représentées (angles en degrés) : $(0, 70, 0)$ en bleu, $(0, 30, 180)$ en orange, $(40, 50, 180)$ en vert et $(0, 40, 30)$ en violet.

tance. Le comportement du paramètre $\bar{\theta}$ est surprenant, particulièrement sur les séries *MukundpuraPoudre* et *BlackyPoudre*. Les deux estimateurs $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ et $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ ont sensiblement la même erreur de reconstruction (qui est d’ailleurs assez importante, entre 6 et 10%), ce qui suggère un comportement uni-modal, ou en plateau (équiprobabilité d’une série continue de valeurs).

La figure 2.20 montre que les prédictions suivent très fidèlement la relation empirique du hockey-stick. Elle montre aussi une nette séparation entre les échantillons concassés (à gauche) et les échantillons entiers (à droite).

Conclusion Les quatres séries de mesures étudiées dans ce paragraphe permettent une inversion précise, grâce au nombre de géométries disponibles et au faible bruit de mesure. Malgré le niveau moyen faible de réflectance, les variables ω, b et c peuvent être déterminées de façon satisfaisante. Leurs valeurs sont en accord avec les propriétés photométriques (bande d’absorption) et structurales des matériaux (distinction entre bloc et poudre).

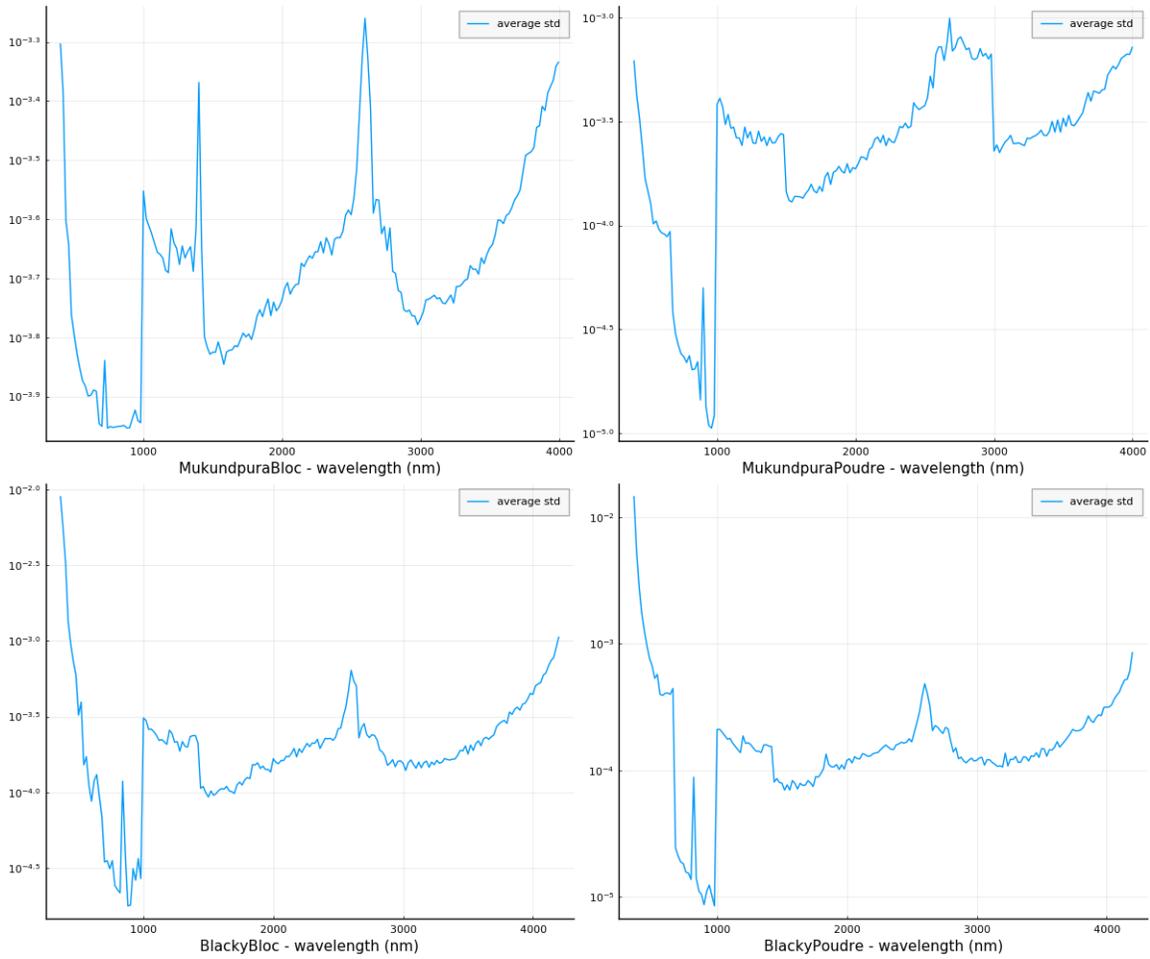


FIGURE 2.15 – Écart-type moyenné sur les géométries en fonction de la longueur d'onde. En haut : MukundpuraBloc et MukundpuraPoudre. En bas : BlackyBloc et BlackyPoudre.

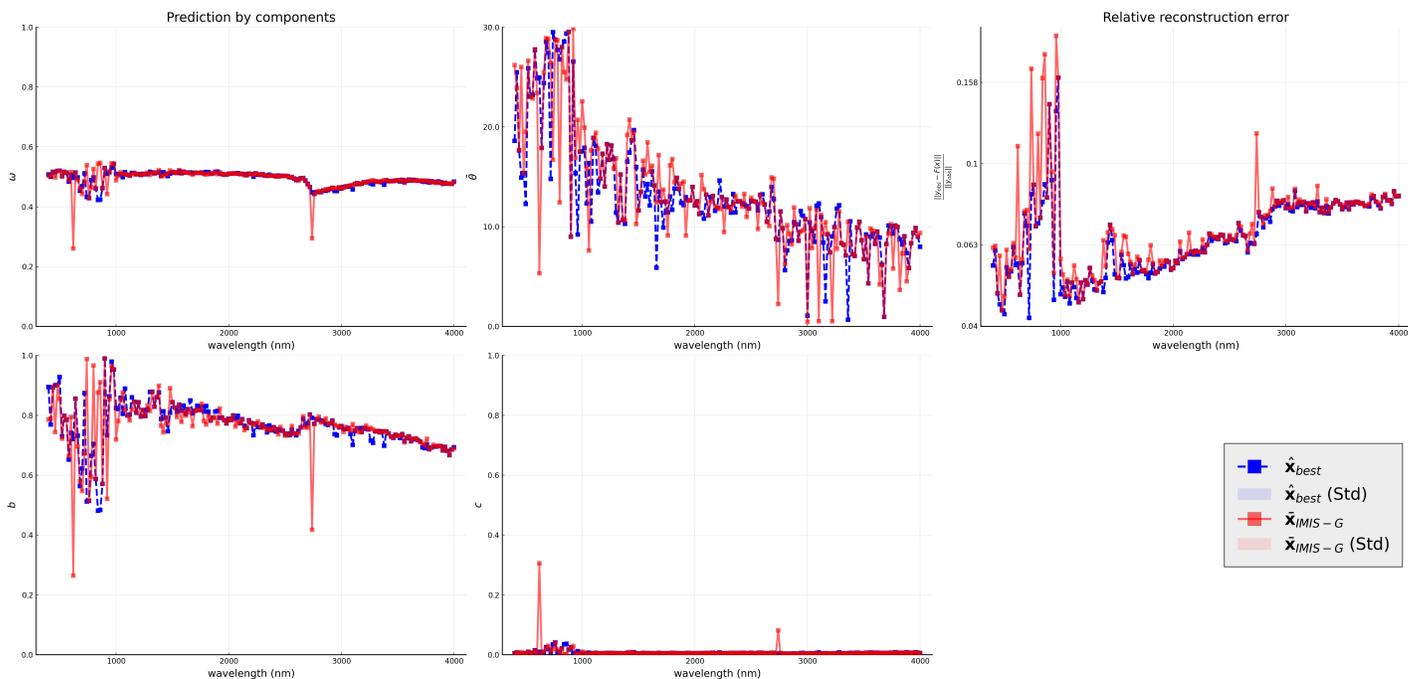


FIGURE 2.16 – Inversion de la série *MukundpuraBloc*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu. (Les centroïdes et les indicateurs de variabilité sont en annexe D.2.)

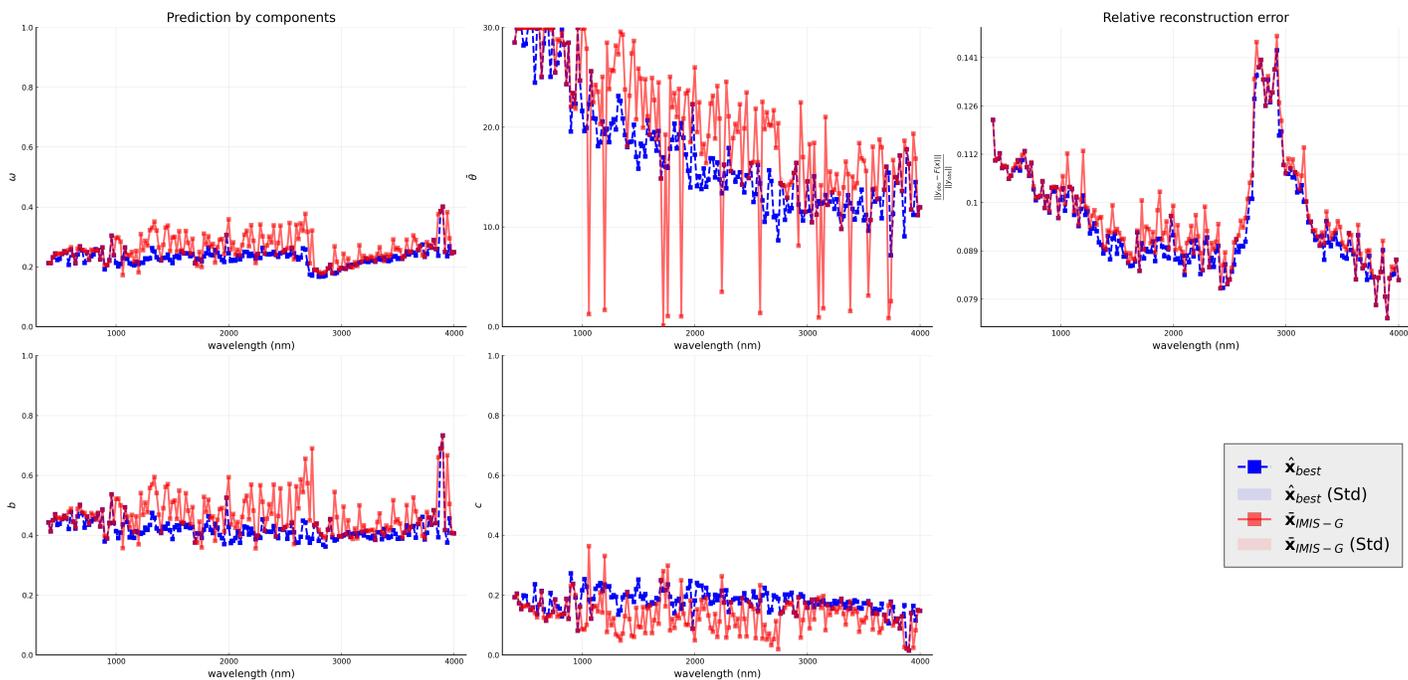


FIGURE 2.17 – Inversion de la série *MukundpuraPoudre*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu. (Les centroïdes et les indicateurs de variabilité sont en annexe D.2.)

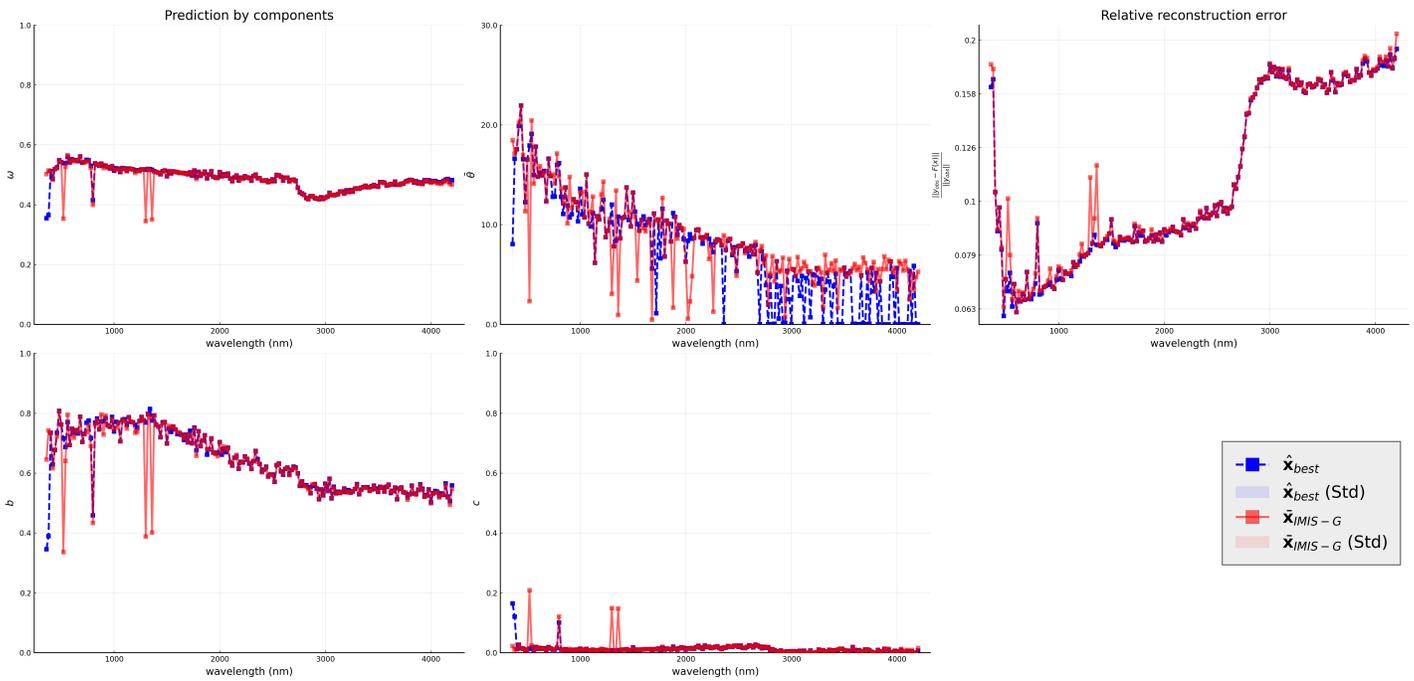


FIGURE 2.18 – Inversion de la série *BlackyBloc*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu. (Les centroïdes et les indicateurs de variabilité sont en annexe D.2.)

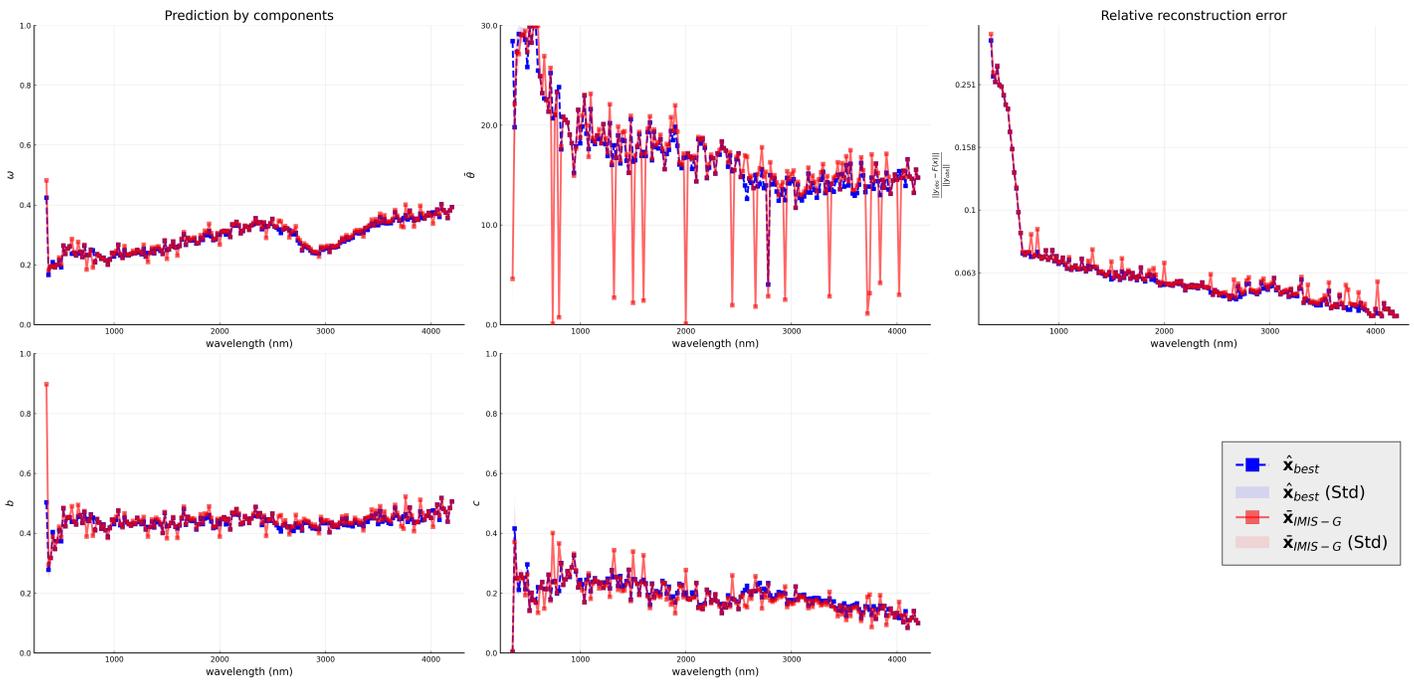


FIGURE 2.19 – Inversion de la série *BlackyPoudre*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu. (Les centroïdes et les indicateurs de variabilité sont en annexe D.2.)

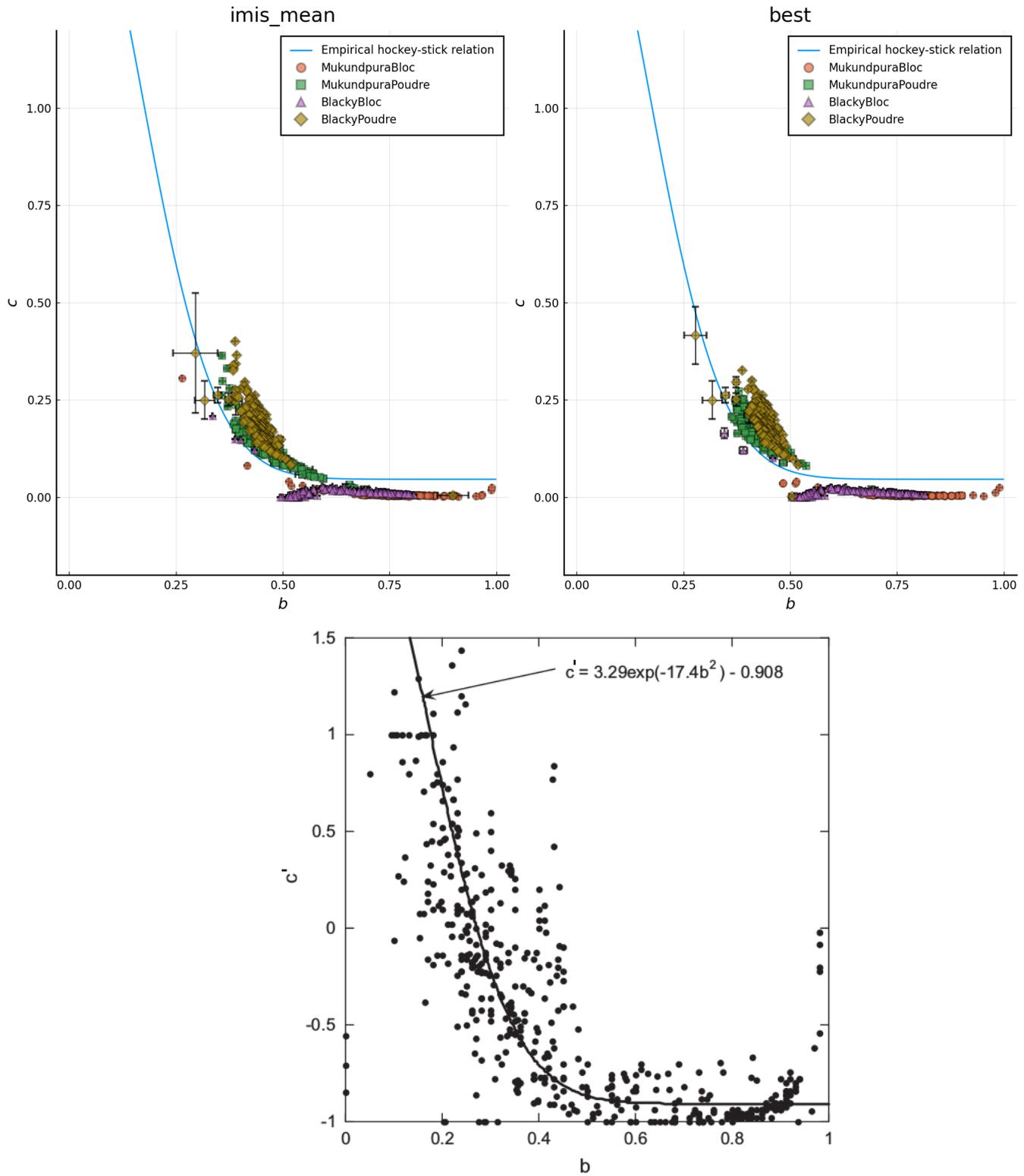


FIGURE 2.20 – Relation du hockey-stick dans l'espace (b, c) , pour les quatre échantillons de météorites. L'estimateur \bar{x}_{IMIS-G} est à gauche, \hat{x}_{best} à droite. En bas : relation empirique de référence.

Matériaux analogues à une surface planétaire

On étudie maintenant deux échantillons de laboratoire s’approchant de la surface de deux corps célestes : une poudre d’Howardite, qui est l’analogue terrestre de l’astéroïde Vesta, et un résidu de sublimation similaire à la composition de la planète naine Ceres ([Schröder et al., 2021]). L’objectif du travail entreprit par S. Potin ([Potin et al., 2020, Potin et al., 2021]) est de simuler la réflectance qu’une sonde spatiale observerait au survol de ces corps. Pour cela, elle mesure en laboratoire la réflectance des deux échantillons (*Howardite* et *Ceres*), avec les mêmes géométries que la série *MukundpuraPoudre*. L’inversion du modèle de Hapke permet ensuite de simuler la réflectance pour n’importe quelle géométrie et donc modéliser le comportement d’un corps céleste, en supposant que sa surface présente les mêmes caractéristiques que l’échantillon étudié en laboratoire.

Là aussi, les observations sont très précises, avec un ratio signal sur bruit moyen de 2352 pour la série *Howardite* et 923 pour la série *Ceres*. L’howardite est nettement moins sombre, comme le montre la figure 2.21.

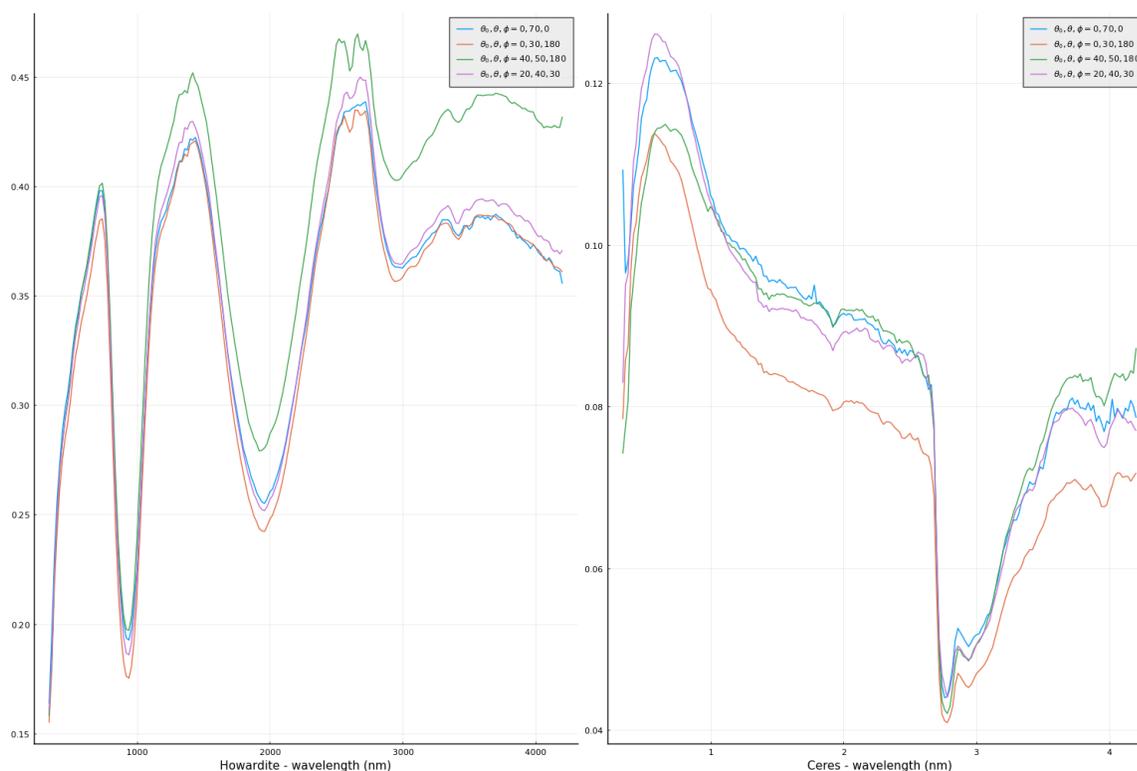


FIGURE 2.21 – Réflectance mesurée pour chaque longueur d’onde, pour l’échantillon *Howardite* (à gauche) et *Ceres* (à droite). Quatre configurations géométriques (θ_0, θ, ϕ) sont représentées (angles en degrés) : $(0, 70, 0)$ en bleu, $(0, 30, 180)$ en orange, $(40, 50, 180)$ en vert et $(20, 40, 30)$ en violet.

Nous prenons les mêmes paramètres que précédemment et nous appliquons la méthodologie d’inversion. Les figures 2.22 et 2.23 présentent les spectres obtenus. Les résultats pour la série *Ceres* sont globalement satisfaisants : le spectre en ω retrouve la bande d’absorption autour de 3000 nm et les paramètres b et c sont bien contraints. On note cependant une légère bi-modalité entre 3000 et 4000 nm. Le résultat est encore meilleur pour la série *Howardite* : les variations spectrales sont bien reproduites et la régularité est satisfaisante, particulièrement pour la prédiction $\hat{\mathbf{x}}_{best}$. L’erreur relative de reconstruction est en dessous de 2%. Plus généralement, il ressort qu’un niveau moyen de réflectance trop faible a tendance à dégrader le processus d’inversion.

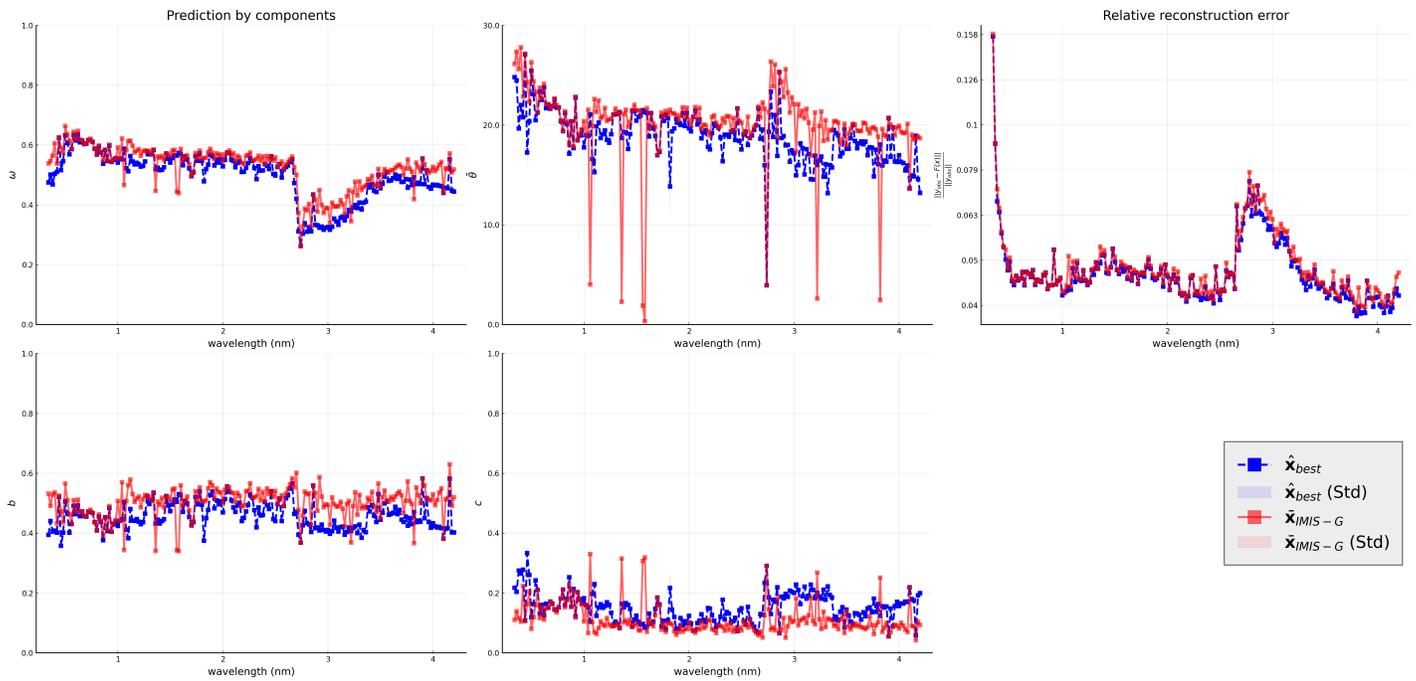


FIGURE 2.22 – Inversion de la série *Ceres*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu. (Les centroïdes et les indicateurs de variabilité sont en annexe D.3.)

La figure 2.24 montre que les paramètres b et c suivent la relation du hockey-stick. Leur position révèle une micro-texture proche des échantillons de météorites en poudre.

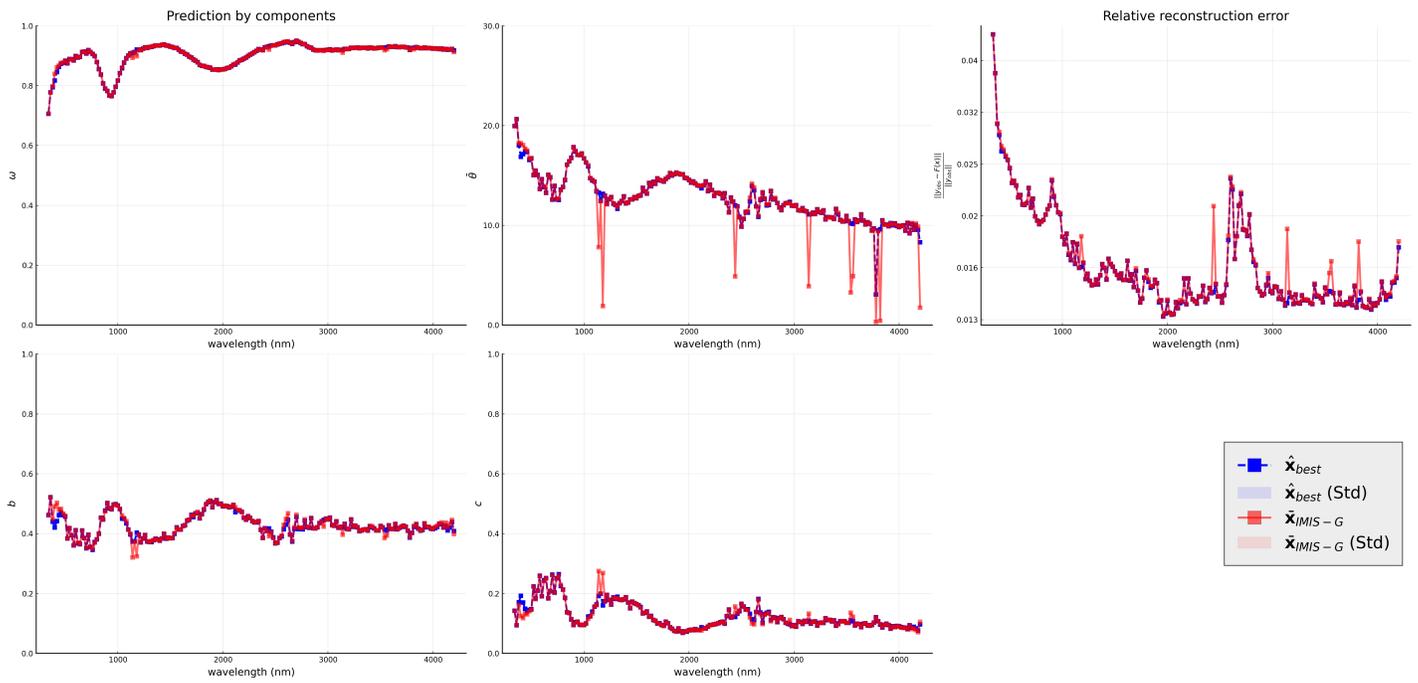


FIGURE 2.23 – Inversion de la série *Howardite*. \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, \hat{x}_{best} en bleu. (Les centroïdes et les indicateurs de variabilité sont en annexe D.3.)

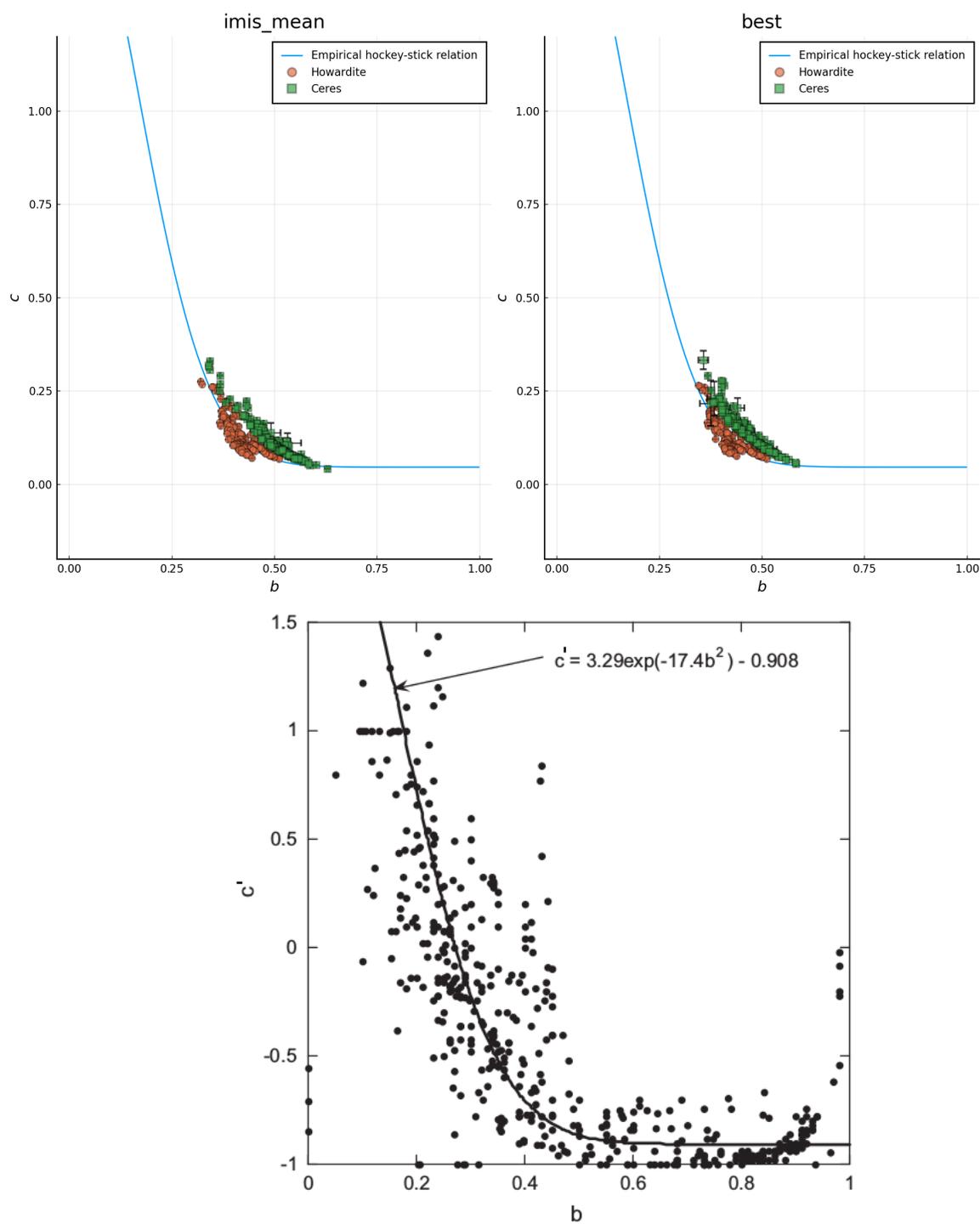


FIGURE 2.24 – Relation du hockey-stick dans l'espace (b, c) , pour les deux échantillons *Howardite* et *Ceres*. L'estimateur \bar{x}_{MIS-G} est à gauche, \hat{x}_{best} à droite. En bas : relation empirique de référence.

2.3.2 Images hyper-spectrales satellitaires

Nous passons maintenant aux cas de mesures satellitaires. L'objectif global est de suivre l'évolution saisonnière de trois sites du Pôle Sud de Mars, ce qui peut être effectué en comparant les valeurs des paramètres du modèle de Hapke. Pour chaque site, on dispose de plusieurs observations réalisées par l'instrument *Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars* (CRISM), embarqué à bord du satellite *Mars Reconnaissance Orbiter* ([Murchie et al., 2009]). Les mesures évoluent généralement sur deux dimensions : une dimension spectrale et une dimension spatiale. Comme la résolution spatiale est élevée, la masse totale de données à inverser est très importante, ce qui justifie l'intérêt d'utiliser la méthodologie proposée. Dans cette partie, nous considérons un site pour lequel l'instrument a réalisé plusieurs milliers d'observations au dessus de la surface de Mars, et pour chacune, a mesuré la réflectance pour 11 géométries (voir l'annexe C) et 50 longueurs d'onde (variant entre 360 et 3920 nm). Les données du satellite sont traitées pour corriger l'influence de l'atmosphère, par la méthode proposée dans [Ceamanos et al., 2013]. Après cette correction, l'alignement des observations et l'imputation de possibles données manquantes, on dispose de $N_{obs} = 156100 = 3122 \times 50$ vecteurs $\mathbf{y}_{obs} \in \mathbb{R}^D$ ($D = 11$) pour l'observation d'intérêt. Le niveau moyen de la réflectance vaut 0.65 ; l'écart-type sur les observations est fourni et donne un ratio signal sur bruit moyen de 33.

Une première analyse photométrique de cette zone a été effectuée dans [Douté and Pilorget, 2017]. Cette étude aboutit notamment à la classification du terrain en 4 zones : au nord, une zone de poussière, sans glace ; en dessous, une bande étroite de glace d'eau ; au sud, deux types de glace de CO₂ (cf figure 2.25). Nous inversons maintenant le modèle de Hapke pour compléter cette analyse. Nous espérons retrouver cette classification au niveau des paramètres physiques.

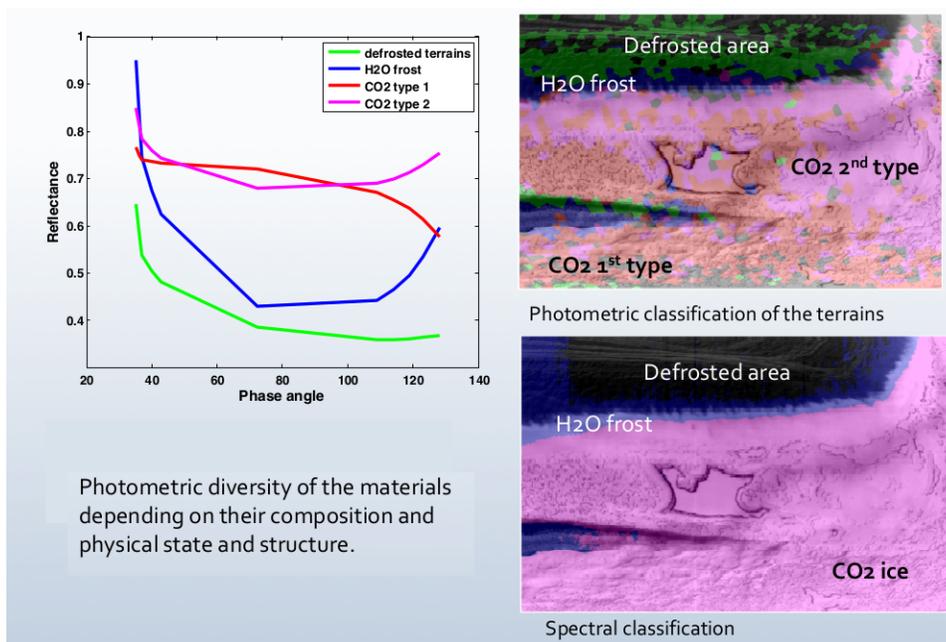


FIGURE 2.25 – Classification spectro-photométrique de l'observation FRT144 du pôle Sud de Mars.

Nous appliquons la méthodologie du chapitre précédent en prenant $\sigma = 0.001$ comme bruit sur le jeu d'apprentissage d'entraînement et $K = 50$. Les paramètres IMIS sont déterminés par la méthode semi-automatique décrite dans la section 1.3.3, où le budget équivalent IS est fixé à $I = 20000$. La comparaison sur 5 observations à la méthode MCMC (Hamiltonian) donne les paramètres $(I_0, B, J) = (1000, 200, 16)$.

La figure 2.26 montre le résultat de l'inversion, qui est globalement satisfaisant. En effet, la cohérence spatiale est respectée et les valeurs des paramètres sont en accord avec les propriétés optiques des 4 zones. Notamment, le paramètre ω est plus faible pour la zone sans glace, qui est moins brillante. De plus, les

paramètres $\bar{\theta}$ et b mettent en évidence deux types de glace de CO₂. Aussi, la glace d'eau (H₂O frost) est plus lisse que la glace de CO₂, ce qui révèle des processus de déposition et d'évolution distincts. La différence entre les estimateurs $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ et $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ est globalement ténue; l'estimateur $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ semble être plus cohérent spatialement, car les deux types de glace de CO₂ sont plus différenciées pour les variables b et c .

La représentation spectrale de la figure 2.27, obtenue en moyennant la valeur des paramètres physiques pour chacune des classes de terrain, confirme cette analyse. Le paramètre ω reflète bien la hiérarchie de la brillance des matériaux. Les paramètres $\bar{\theta}$, b et c mettent bien en lumière les deux types de glace de CO₂. On note aussi que les paramètres physiques sont peu dépendants de la longueur d'onde (ce qui justifie la moyenne sur la dimension spectrale présentée dans les cartes de la figure 2.26).

Finalement, la comparaison à la relation du hockey-stick dans l'espace (b, c) (figure 2.28) permet d'analyser la micro-texture du terrain. En particulier, le CO₂ de type 1 est plus métamorphosé (gros grains ronds) par rapport au CO₂ de type 2 (micro-surface plus rugueuse). Le givre de H₂O est certainement beaucoup plus pelucheux.

Conclusion La méthode d'inversion par régression et échantillonnage d'importance donne des résultats satisfaisants sur ces observations du pôle Sud de Mars. Malgré la large taille des données, l'inversion est exécutée en temps raisonnable (environ 7 heures sur un ordinateur portable, voir [Kugler et al., 2021], ce qui n'était pas envisageable avec les méthodes MCMC. La détermination des paramètres du modèle de Hapke ouvre la voie à une analyse physique plus approfondie, qui n'était pas possible en considérant seulement les courbes photométriques. La rapidité d'exécution de la méthode permet d'ailleurs de pouvoir étendre cette analyse à d'autres observations du pôle Sud de Mars.

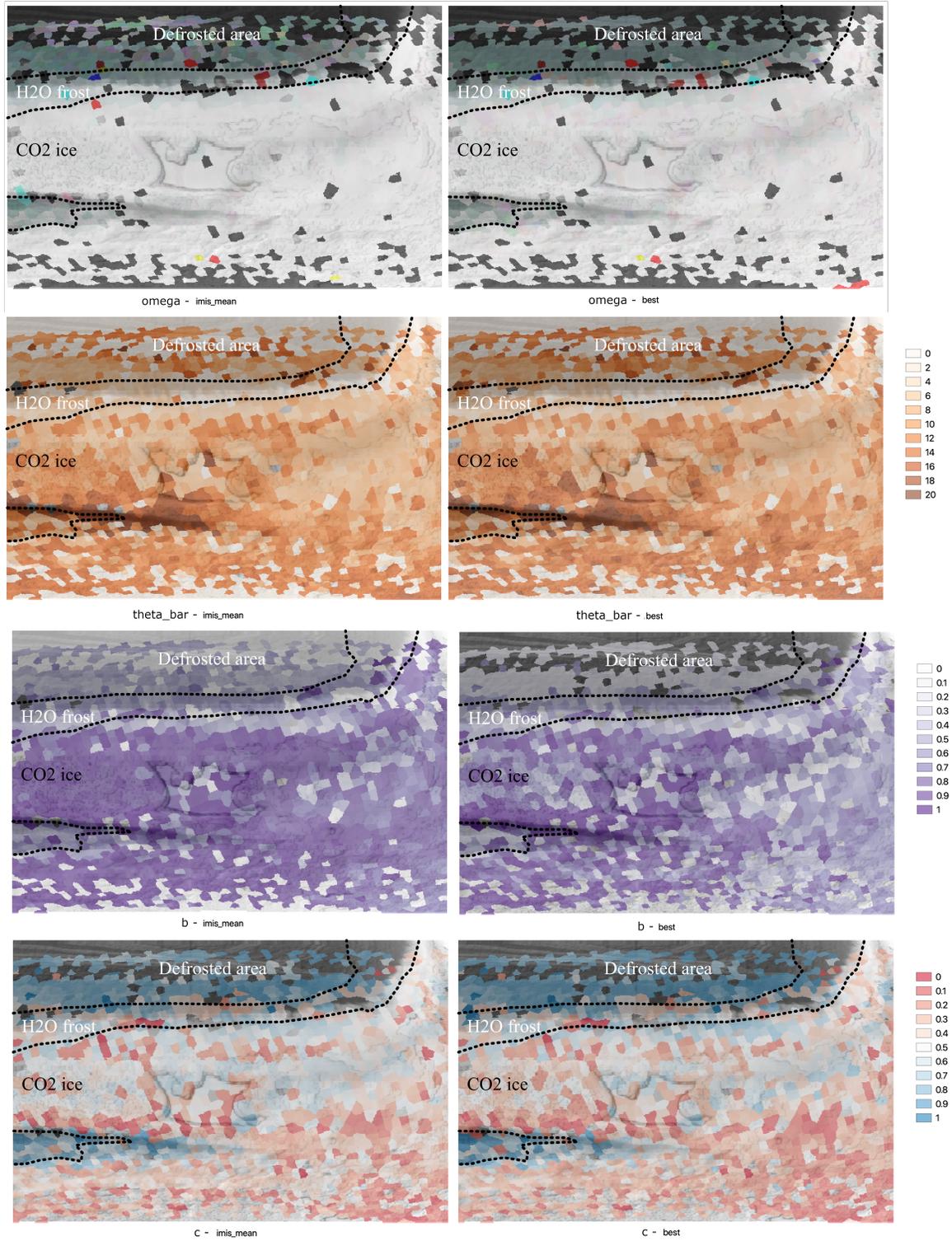


FIGURE 2.26 – Cartes des paramètres physiques estimés (observation FRT144 du pôle Sud de Mars). L'estimateur $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ est à gauche, $\hat{\mathbf{x}}_{best}$ à droite. De haut en bas : ω , carte en fausse couleur sur 3 longueurs d'onde (rouge : 592nm, vert : 533 nm, bleu : 492nm); $\bar{\theta}$, moyenné spectralement, b (idem), c (idem).

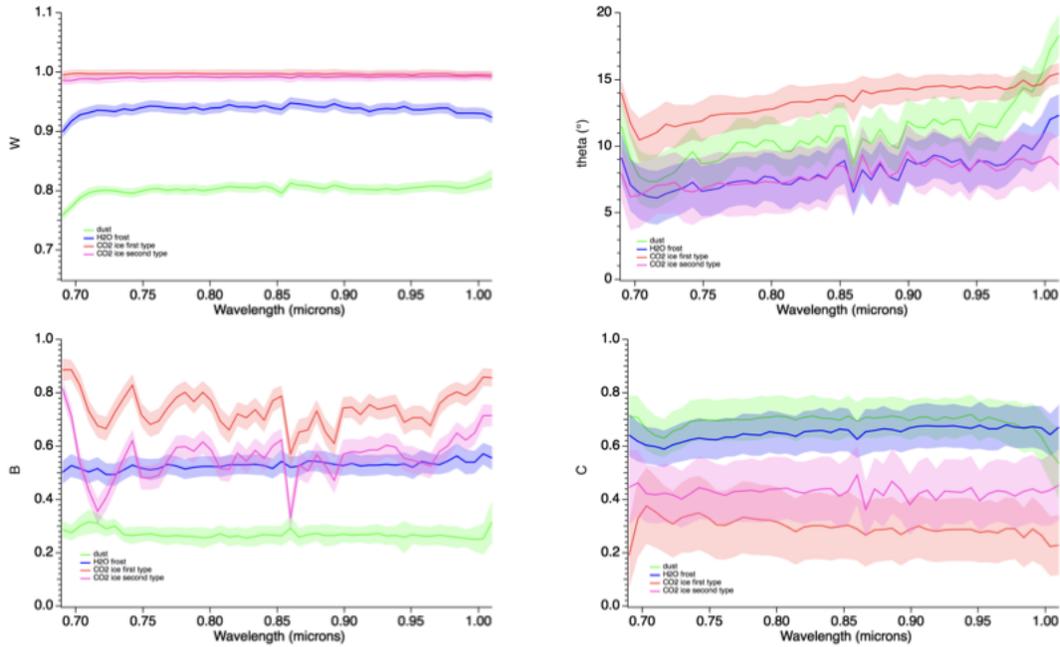


FIGURE 2.27 – Classification spectrale suivant les paramètres du modèle de Hapke des 4 zones (estimateur \hat{x}_{best}) : poussière en vert, glace d'eau en bleu, glace de CO₂ de premier type en orange, glace de CO₂ de second type en magenta.

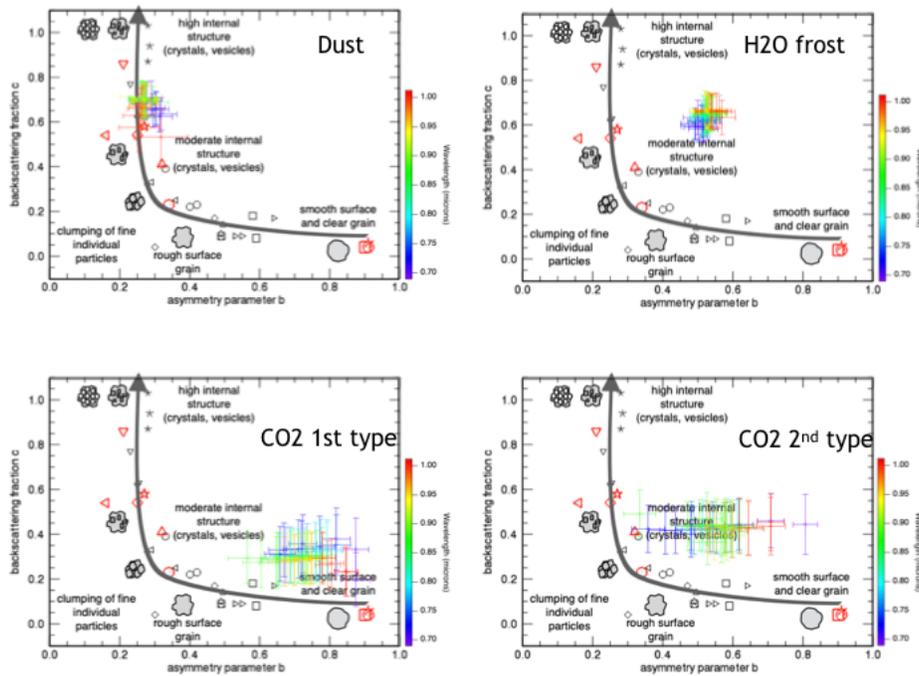


FIGURE 2.28 – Comparaison à la relation du hockey-stick pour les 4 classes de terrain (estimateur \hat{x}_{best}).

2.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre l'application principale de cette thèse : l'inversion du modèle photométrique de Hapke sur des mesures de réflectance bidirectionnelle à dépendance spectrale et parfois spatiale. Les expériences numériques conduites permettent de valider la méthodologie proposée dans le chapitre précédent. Le rapport entre temps de calcul et précision de l'inversion est généralement très attractif, et fait de l'approche une alternative viable aux méthodes MCMC dans un cadre d'inversion massive. On remarque cependant que la qualité des résultats est assez variable en fonction des géométries choisies et de l'incertitude des mesures. Il n'est d'ailleurs pas toujours aisé de distinguer une imprécision qui viendrait de la méthodologie statistique d'un biais inhérent au modèle ou aux observations elles-mêmes. Par exemple, la faible sensibilité des variables $\bar{\theta}$, B_0 , h rend le modèle de Hapke globalement difficile à inverser. Nous avons observés trois familles de scénarios, du plus au moins favorables :

- la loi a-posteriori est suffisamment contrainte pour obtenir une solution unique,
- la loi a-posteriori est bi-modale,
- la loi a-posteriori varie peu autour de sa moyenne, donnant une plage continue de paramètres acceptables.

Malgré tout, la détermination des paramètres du modèle est généralement suffisante pour permettre une analyse physique approfondie. Nous avons surtout envisagé les résultats du point de vue du statisticien, et une étude thématique par les experts du domaine pourrait maintenant être menée. La méthodologie proposée est particulièrement intéressante pour pouvoir traiter les multiples observations de la planète Mars, ce qui était pour l'instant impossible à cause du temps de calcul requis.

Comme évoqué plus haut, l'inversion d'un modèle réaliste et complexe est généralement difficile. Le prochain chapitre élargit la réflexion en se plaçant en amont de l'inversion proprement dite. On cherchera par exemple à évaluer la pertinence du modèle à expliquer les observations, et on proposera d'une certaine manière de modifier le problème inverse considéré pour le faciliter.

Chapitre 3

Utilisation du modèle GLLiM dans un contexte statistique étendu

Sommaire

3.1	Evaluation d'une erreur systématique sur le modèle physique	89
3.1.1	Formalisme statistique	89
3.1.2	Estimation du bruit par un algorithme EM	89
3.1.3	Généralisation à un biais affine	91
3.1.4	Analyse du modèle de Hapke	93
3.1.5	Conclusion	95
3.2	Sélection des géométries de mesures	99
3.2.1	Calcul des indices de détermination	100
3.2.2	Application au modèle de Hapke	102
3.2.3	Conclusion	103
3.3	Utilisation du modèle GLLiM avec un prior gaussien	105
3.3.1	Modèle GLLiM avec prior gaussien	105
3.3.2	Généralisation du prior à un mélange gaussien	108
3.3.3	Illustration sur un modèle de manteau neigeux	109
3.3.4	Conclusion	110
3.4	Conclusion	112

Nous avons présenté dans les deux chapitres précédents une méthodologie permettant de traiter un problème d'inversion bayésienne, illustrée sur le modèle photométrique de Hapke. Nous avons jusque là supposé que le modèle physique est fiable, et nous n'avons pas cherché à le remettre en question. La fonctionnelle à inverser était donc fixée, la loi a-priori sur X était uniforme ; et les observations et écart-types associés définissaient entièrement la loi a-posteriori à étudier, que nous rappelons :

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto \mathcal{U}(\mathbf{x})\mathcal{N}(F(\mathbf{x}); \mathbf{y}, \Sigma) \quad (3.1)$$

Comme nous l'avons vu précédemment, l'étude de cette loi n'est pas toujours aisée, et cela amène le statisticien à questionner la pertinence du modèle lui-même. Nous nous plaçons donc maintenant en amont de la procédure d'inversion, en nous accordant la possibilité d'altérer la formulation du problème inverse donnée par 3.1, soit en modifiant directement le modèle physique, soit en modifiant le formalisme statistique. Plus précisément, ce chapitre présente trois contributions répondant aux questions suivantes :

- Étant donné un jeu de données réelles, qu'on considère comme suffisamment précises pour représenter efficacement la réalité d'un phénomène, peut-on évaluer l'écart du modèle aux données ?
- Dans le cas du modèle de Hapke, peut-on déterminer des géométries de mesures qui facilitent l'inversion ? Autrement dit, comment choisir les géométries pour contraindre au mieux les paramètres physiques ?
- Si l'information portée par le modèle physique n'est pas suffisante, peut-on ajouter une information a priori sur \mathbf{x} pour restreindre les choix possibles ?

L'objectif de ce chapitre est aussi d'explorer à travers ces questions certaines propriétés du modèle GLLiM. En opposition par exemple avec les approches d'apprentissage profond, le caractère interprétable du modèle permet de l'utiliser dans différents cadres, et pas seulement comme une boîte noire permettant d'effectuer une régression.

La section 3.1 propose un algorithme de type EM pour évaluer un bruit systématique lié au modèle physique. La section 3.2 propose un indicateur de sélection de modèle favorisant l'inversion, appliqué ici, dans le cadre du modèle de Hapke, aux géométries de mesures. Finalement, la section 3.3 montre comment généraliser l'utilisation du modèle GLLiM à un prior gaussien, et propose une application sur un problème d'assimilation de données.

3.1 Evaluation d'une erreur systématique sur le modèle physique

Comme évoqué dans le chapitre précédent, les modèles physiques utilisés pour l'analyse d'observations sont souvent imparfaits : la complexité inhérente au phénomène mesuré est souvent réduite pour conserver un modèle utilisable en pratique. Pour le traitement de données réelles, il est donc fréquent que l'observation \mathbf{y}_{obs} ne suive en fait pas le modèle théorique. Dans cette section nous distinguons deux facteurs d'incertitude : l'incertitude sur la mesure et l'incertitude liée au modèle lui-même. La première est inévitable dans la pratique, et nous ne cherchons pas à nous en affranchir ; le formalisme bayésien permet de la prendre en compte. En revanche, la seconde semble plus problématique, et devrait si possible être corrigée en affinant l'expression du modèle physique. Notre objectif ici est donc de quantifier cette incertitude de modèle pour donner des pistes d'amélioration. Nous commençons par préciser le formalisme utilisé (section 3.1.1) avant de détailler l'algorithme proposé (section 3.1.2). Nous illustrons notre approche sur le modèle de Hapke dans la section 3.1.4.

3.1.1 Formalisme statistique

Nous proposons de détailler la modélisation de l'incertitude en considérant que l'observation mesurée provient d'un processus à deux étapes, rejoignant notamment le formalisme proposé par [Mohammad-Djafari et al., 2018]. Dans un premier temps, étant donnés des paramètres physiques \mathbf{x} , le modèle prévoit une observation théorique $\mathbf{y} = F(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\epsilon}$, où $\boldsymbol{\epsilon} \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{\Sigma})$. $\boldsymbol{\epsilon}$ modélise alors l'écart entre la fonctionnelle F et un modèle parfait. Remarquons que cet écart ne peut pas dépendre d'une observation en particulier : par définition, $\boldsymbol{\Sigma}$ modélise l'écart moyen d'une *série* d'observations à l'image théorique $F(\mathcal{X})$. Dans un deuxième temps, nous considérons que l'observation réelle est une version bruitée de cette observation théorique, prenant cette fois en compte l'incertitude sur la mesure. Nous ajoutons pour cela un bruit gaussien centré :

$$Y_{obs} = F(X) + \boldsymbol{\epsilon} + \boldsymbol{\epsilon}_{obs}$$

où $\boldsymbol{\epsilon}_{obs} \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{\Sigma}_{obs})$, indépendant de $\boldsymbol{\epsilon}$. En particulier, la description ci-dessus est justifiée par le fait que $Y_{obs}|Y = \mathbf{y}$ suit une loi $\mathcal{N}(\mathbf{y}, \boldsymbol{\Sigma}_{obs})$, où $\boldsymbol{\Sigma}_{obs}$ peut dépendre de l'observation. Remarquons que ce formalisme généralise le modèle considéré jusqu'à maintenant. En effet, comme $\boldsymbol{\epsilon}$ et $\boldsymbol{\epsilon}_{obs}$ sont indépendants, la loi de $Y_{obs}|X = \mathbf{x}$ est encore une gaussienne $\mathcal{N}(F(\mathbf{x}), \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma}_{obs})$, ce qui est un cas particulier du modèle 3.1.

Comme évoqué plus haut, l'objectif est donc d'évaluer $\boldsymbol{\Sigma}$, avec l'idée de corriger le modèle de cette erreur systématique. Comme $\boldsymbol{\epsilon}$ et $\boldsymbol{\epsilon}_{obs}$ sont indiscernables, cet objectif n'est pas réalisable dans le cas général. En revanche, l'idée de cette section est de considérer le cas particulier où $\boldsymbol{\epsilon}_{obs} = 0$ (plus précisément $\boldsymbol{\epsilon}_{obs} \ll \boldsymbol{\epsilon}$), ce qui correspondrait à des mesures infiniment précises. Dans ce cas, le seul bruit restant est $\boldsymbol{\epsilon}$, et on peut envisager, si l'on dispose d'une série d'observation \mathbf{y}_{obs} , de l'utiliser pour estimer $\boldsymbol{\Sigma}$.

3.1.2 Estimation du bruit par un algorithme EM

On suppose donc maintenant que $\boldsymbol{\Sigma}_{obs} = 0$ et qu'on observe un échantillon $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N$ de taille N , suivant la loi de Y_{obs} . Remarquons que, si l'on disposait de la version théorique non bruitée des observations $F(X)$, par exemple si X était observé, on pourrait estimer $\boldsymbol{\Sigma}$ directement par l'estimateur du maximum de vraisemblance donné par

$$\hat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\mathbf{y}_n - F(\mathbf{x}_n))^t (\mathbf{y}_n - F(\mathbf{x}_n)) \quad (3.2)$$

Suivant un principe d'augmentation de données utilisé par exemple dans [Vono et al., 2021], l'idée est donc de considérer X comme une variable latente et d'adapter l'idée général de l'algorithme EM au couple (Y, X) . Si $\boldsymbol{\Sigma}$ est la covariance à l'itération courante, l'étape E (Expectation) est déterminée par la quantité

$$Q(\boldsymbol{\Sigma}') := \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[\log p_{\boldsymbol{\Sigma}'}(X_n, \mathbf{y}_n) | Y_n = \mathbf{y}_n; \boldsymbol{\Sigma}]$$

et l'étape M (Maximization) consiste à maximiser Q et mettre à jour Σ . La proposition suivante montre que la maximisation de l'étape M admet une solution explicite :

Proposition 3.1.1. *Si F est continue, Q admet un unique point critique*

$$\Sigma_c := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - F(X_n))^t (\mathbf{y}_n - F(X_n)) | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma]$$

Si Σ est restreinte aux matrices diagonales, on a

$$(\Sigma_c)_j := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - F(X_n))_j^2 | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma]$$

Si Σ est restreinte aux matrices d'homothéties, on a

$$\Sigma_c := \sigma^2 I_D \text{ avec } \sigma^2 := \frac{1}{DN} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[\|\mathbf{y}_n - F(X_n)\|^2 | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma]$$

Démonstration. Maximiser Q revient à minimiser

$$G(\Sigma') := N \log |\Sigma'| + \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - F(X_n)) \Sigma'^{-1} (\mathbf{y}_n - F(X_n)) | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma']$$

Comme X est à valeurs dans un compact, $F(X)$ est bornée, et, on peut différentier sous l'intégrale, ce qui donne

$$dG_{\Sigma'}(\mathbf{H}) = \sum_{n=1}^N \mathbb{E} \left[-\frac{1}{2} \text{Trace}(\Sigma'^{-1} \mathbf{H}) + \frac{1}{2} (\mathbf{y}_n - F(X_n)) \Sigma'^{-1} \mathbf{H} \Sigma'^{-1} (\mathbf{y}_n - F(X_n)) | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma' \right]$$

Donc, si $dG_{\Sigma'} = 0$, en évaluant l'égalité pour $H = E_{i,j}$, on obtient

$$N \Sigma'^{-1} = \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[\Sigma'^{-1} (\mathbf{y}_n - F(X_n)) (\mathbf{y}_n - F(X_n)) \Sigma'^{-1} | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma']$$

Finalement, on a

$$\Sigma' = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - F(X_n)) (\mathbf{y}_n - F(X_n)) | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma']$$

Les formules pour les contraintes diagonales et isotropiques s'obtiennent de la même manière. \square

La formule de mise à jour nécessite donc de pouvoir calculer une espérance contre la loi de X sachant Y . En s'inspirant de la méthodologie développée dans le premier chapitre, on propose alors d'utiliser une méthode d'échantillonnage préférentiel, le modèle GLLiM fournissant une loi de proposition. Plus précisément, pour chaque observation \mathbf{y}_n , nous suivons les étapes suivantes :

- Générer un échantillon $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_I$ pondéré par les poids w_1, \dots, w_I suivant (approximativement) la loi $p(\mathbf{x} | \mathbf{y}; \Sigma)$, en utilisant une méthode d'échantillonnage préférentiel (IS ou IMIS) et p_G comme loi de proposition (voir section 1.3.3).
- Estimer $\mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - F(X_n)) (\mathbf{y}_n - F(X_n)) | Y_n = \mathbf{y}_n; \Sigma]$ par la quantité

$$\frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i (\mathbf{y}_n - F(\mathbf{x}_i)) (\mathbf{y}_n - F(\mathbf{x}_i)) \quad (3.3)$$

Comme Σ varie à chaque itération, nous utilisons la propriété présentée dans la section 1.1.4 pour éviter de répéter la phase d'apprentissage du modèle GLLiM. Nous commençons par estimer un paramètre θ^{ref} sur un jeu d'apprentissage non bruité (ou bruité avec un niveau négligeable), que nous utilisons conjointement à Σ pour calculer θ à chaque itération. La valeur initiale de Σ dépend du contexte : les simulations suggèrent qu'une valeur relativement importante (de l'ordre des observations) donne de bon résultat. Nous obtenons finalement l'algorithme détaillé dans l'encart 2.

Algorithme 2 : Estimation de l'incertitude par EM

Result : Estimateur de Σ .

Générer un jeu d'apprentissage \mathcal{D}^{ref} (avec un bruit σ_{ref} négligeable) et apprendre un modèle GLLiM θ^{ref} .

Initialiser Σ à $\Sigma^{(0)}$ (valeur dépendant du contexte).

while $r \leq r_{max}$ **do**

 Mettre à jour le paramètre GLLiM $\theta^{(r-1)}$ en utilisant θ^{ref} et $\Sigma^{(r-1)}$ (voir section 1.1.4).

foreach y_n **do** Importance Sampling

 Générer un échantillon $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_I$ pondéré par les poids w_1, \dots, w_I suivant la loi $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \Sigma)$, en utilisant une méthode d'échantillonnage préférentiel (IS ou IMIS) et p_G comme loi de proposition ;

 Calculer $S_n^{(r)} := \frac{1}{\sum_i w_i^{(r)}} \sum_i w_i^{(r)} (\mathbf{y}_n - F(\mathbf{x}_i))^t (\mathbf{y}_n - F(\mathbf{x}_i))$

end

 Mettre à jour $\Sigma^{(r-1)}$ suivant (3.1.1) par $\Sigma^{(r)} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N S_n^{(r)}$

end

3.1.3 Généralisation à un biais affine

Nous avons pour l'instant modélisé l'incertitude sur le modèle par un bruit centré. On pourrait proposer une représentation plus précise, par exemple en supposant que le bruit prend une forme affine :

$$Y = aF(X) + \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\epsilon}$$

où $a \in \mathbb{R}_+$ et $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^D$. Cette formulation généralise le modèle précédent, qui s'obtient en prenant $a = 1$ et $\boldsymbol{\mu} = 0$.

On peut alors généraliser l'algorithme présenté précédemment. En revanche, les formules de mises à jour ne sont pas explicites dans le cas général. La proposition suivante précise deux hypothèses simplificatrices qui permettent de résoudre le problème de maximisation de l'étape M.

Proposition 3.1.2. *Si a est fixé à 1, une condition nécessaire d'extrema sur $(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ est donnée par*

$$\boldsymbol{\mu}_c := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - F(X)) | Y = \mathbf{y}_n; \boldsymbol{\mu}, \Sigma]$$

$$\Sigma_c := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - \boldsymbol{\mu}_c - F(X))^t (\mathbf{y}_n - \boldsymbol{\mu}_c - F(X)) | Y = \mathbf{y}_n; \boldsymbol{\mu}, \Sigma]$$

Si on restreint Σ aux homothéties (contrainte isotropique), une condition nécessaire d'extrema sur $(a, \boldsymbol{\mu}, \Sigma)$

Estimation du bruit du modèle par EM

```

# train a reference GLLiM model with a very low noise
X, Y = Models.data_training(context, N_train, 1e-6)
reference_gllim, _ = Gllim.train(gllim_params, X, Y)

# choose the initial value of Sigma
init = Noise.Bias(1., zeros(D), UniformScaling(sigma_0))

# choose which parameters to estimate (here, only Sigma)
targets = Noise.Targets(
    false, # a
    false, # mu
    true, # Sigma
)

# choose the parameters for the importance sampling step
sampling_params = Is.ImisParams(2000, 400, 20)

# choose the number of iterations of the EM algorithm
max_iterations = 30

# aggregate these parameters
noise_params = Noise.EmIsGLLiMParams(max_iterations, init, sampling_params, targets)

# given a sequence of observations Yobs, launch the noise estimation via EM
history = Noise.run(noise_params, Yobs, context, reference_gllim)

# exploit the final value
sigma_est = history[end][1]

```

est donnée par

$$\begin{aligned}
 a_c &:= \frac{\sum_{n=1}^N \mathbb{E}[\langle F(X), \mathbf{y}_n - \bar{\mathbf{y}} \rangle | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}]}{\sum_{n=1}^N \mathbb{E}[\langle F(X), F(X) - \bar{\mathbf{f}} \rangle | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}]} \\
 \text{où } \bar{\mathbf{y}} &:= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbf{y}_n \text{ et } \bar{\mathbf{f}} := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[F(X) | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}] \\
 \boldsymbol{\mu}_c &:= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[(\mathbf{y}_n - a_c F(X)) | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}] \\
 \boldsymbol{\Sigma}_c &:= \sigma^2 I_D \text{ avec } \sigma^2 := \frac{1}{DN} \sum_{n=1}^N \mathbb{E}[\|\mathbf{y}_n - \boldsymbol{\mu}_c - a_c F(X)\|^2 | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}]
 \end{aligned}$$

Démonstration. On adapte la preuve de 3.1.1 : on veut maintenant maximiser

$$G(a', \boldsymbol{\mu}', \boldsymbol{\Sigma}') := N \log |\boldsymbol{\Sigma}'| + \sum_{n=1}^N \mathbb{E} [\langle \mathbf{y}_n - \boldsymbol{\mu}' - a' F(X), \boldsymbol{\Sigma}'^{-1}(\mathbf{y}_n - \boldsymbol{\mu}' - a' F(X)) \rangle | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}]$$

On a

$$\begin{aligned} dG_{a'}(a'') &= 2 \sum_{n=1}^N \mathbb{E} [\langle a'' F(X), \boldsymbol{\Sigma}'^{-1}(a' F(X) + \boldsymbol{\mu}' - \mathbf{y}_n) \rangle | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}] \\ dG_{\boldsymbol{\mu}'}(\boldsymbol{\mu}'') &= 2 \sum_{n=1}^N \mathbb{E} [\langle \boldsymbol{\mu}'' F(X), \boldsymbol{\Sigma}'^{-1}(a' F(X) + \boldsymbol{\mu}' - \mathbf{y}_n) \rangle | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}] \end{aligned}$$

Les hypothèses permettent de simplifier ces équations et d'arriver au résultat. \square

Pour appliquer les formules de mises à jour, il suffit donc de pouvoir calculer des quantités de la forme $\mathbb{E} [T(X) | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}]$ (où T est une fonction définie sur \mathbb{R}^L). Pour cela, on peut simplement généraliser la phase d'Importance Sampling définie plus haut (3.3) : pour un échantillon $(\mathbf{x}_i)_{i=1..I}$ pondéré par les poids $(w_i)_{i=1..I}$, on estime $\mathbb{E} [T(X) | Y = \mathbf{y}_n; a, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}]$ par

$$\frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i T(\mathbf{x}_i) \quad (3.4)$$

Comme la proposition présentée dans la section 1.1.4 s'applique encore pour une transformation affine, l'algorithme 2 s'adapte facilement pour prendre en compte a et $\boldsymbol{\mu}$ (voir encart 3). Dans la suite, nous n'explorons pas plus en profondeur cette piste, essentiellement parce que cela revient d'une certaine manière à ajouter deux nouveaux paramètres a et $\boldsymbol{\mu}$ au modèle direct, sans pouvoir en donner une interprétation physique.

3.1.4 Analyse du modèle de Hapke

La procédure décrite plus haut est générale et peut s'appliquer à n'importe quel modèle physique. Dans cette section, nous nous concentrons sur le modèle de Hapke. Nous validons l'approche sur des données synthétiques, puis nous l'appliquons sur des mesures de laboratoire.

Validation sur données synthétiques

Nous souhaitons vérifier ici si l'algorithme proposé permet bien de retrouver le bruit $\boldsymbol{\Sigma}$ d'une série d'observations. Nous reprenons deux ensembles de géométries de mesure, présentés dans le chapitre précédent : les configurations *set-G10* (expérience Nontronite, $D = 10$) et *set-G70* (expérience MukundpuraPoudre, $D = 70$). Pour chacun, nous générons 2000 observations $(\mathbf{x}_{obs}, \mathbf{y}_{obs} = F(\mathbf{x}_{obs}) + \boldsymbol{\epsilon})$, où $\boldsymbol{\epsilon}$ est un bruit gaussien centré de covariance $\boldsymbol{\Sigma} = \sigma^2$. Nous choisissons $\sigma = 0.2$ (forte incertitude sur le modèle) et $\sigma = 0.03$ (faible incertitude). Pour simplifier les notations nous notons σ_D le vecteur dont les D composantes sont égales à σ . Nous appliquons une contrainte diagonale et nous choisissons $\boldsymbol{\Sigma}^0 = (0.5)^2 I_D$. Les figures 3.1 et 3.2 montrent l'évolution de l'estimateur au cours de l'algorithme et le résultat final après 25 itérations. La distance entre l'estimateur courant $\boldsymbol{\sigma}_D^r$ et la valeur réelle $\boldsymbol{\sigma}_D$ est mesurée. Pour référence, on calcule aussi la distance entre l'estimateur théorique donné par 3.2, noté $\boldsymbol{\sigma}_D^{est}$, et $\boldsymbol{\sigma}_D$. Les graphes polaires (valeur en fonction de l'angle d'émergence, l'angle d'incidence et l'azimut étant fixés) montrent $\boldsymbol{\sigma}_D$, $\boldsymbol{\sigma}_D^{est}$ et l'estimateur à la dernière itération, noté $\boldsymbol{\sigma}_D^{last}$. Les résultats sont satisfaisants, puisque, pour les deux ensembles de géométries, le bruit théorique est retrouvé avec une précision suffisante.

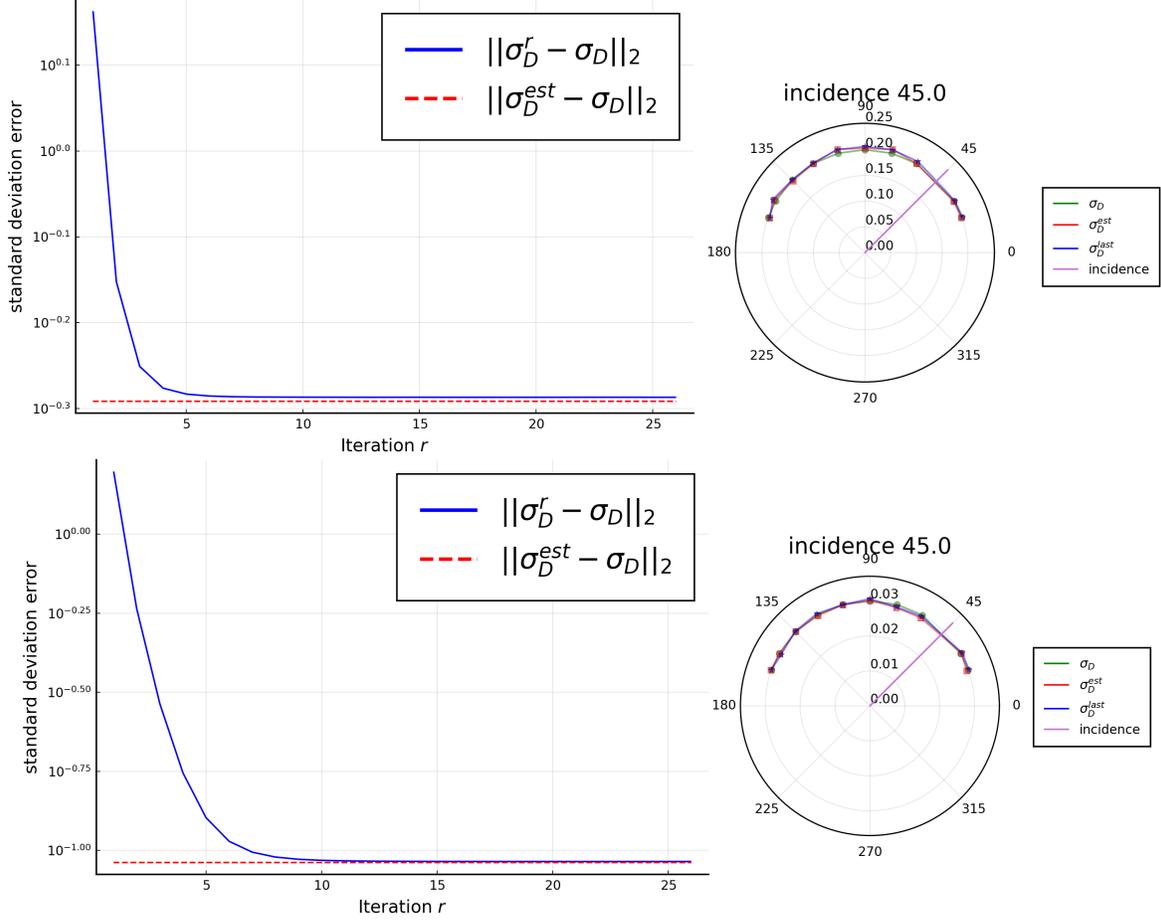


FIGURE 3.1 – Estimation du niveau de bruit du modèle pour les géométries *set-G10* (données synthétiques). En haut : $\sigma = 0.2$, en bas : $\sigma = 0.03$.

Application à des mesures de laboratoire

Nous considérons maintenant trois séries de mesures effectuées en laboratoire, introduites dans le chapitre précédent (sections 2.3.1 et 2.3.1) : les observations *MukundpuraPoudre*, *Howardite* et *Ceres*. L'incertitude sur la mesure étant très faible, nous considérons que ces observations peuvent permettre d'évaluer un éventuel bruit sur le modèle de Hapke lui-même. Nous appliquons donc la procédure décrite plus haut, en initialisant Σ à I_D . Nous appliquons l'algorithme d'abord successivement sur les trois jeux d'observations, puis une quatrième fois sur la concaténation des trois séries (série *Concaténation*). L'intérêt de regrouper les observations est d'augmenter la taille N de l'échantillon (569 observations au total) et donc la précision statistique de l'estimateur. Les résultats sont présentés dans les figures 3.3 et 3.4 : on affiche la valeur σ_D^{last} après 30 itérations, avec une contrainte diagonale et avec une contrainte isotropique. A titre de comparaison, on affiche aussi l'écart-type moyen du bruit de mesure de la série d'observations, noté σ_D^{obs} , fourni par les expérimentateurs. Insistons sur le fait que, dans notre modélisation, σ_D et σ_D^{obs} sont deux quantités bien distinctes : σ_D^{obs} a ici une valeur moyenne de 0.0003, tandis que le niveau moyen estimé pour σ_D est de l'ordre de 0.01. Justement, cette différence montre que le modèle de Hapke présente bien une incertitude intrinsèque. On remarque aussi que certaines géométries sont systématiquement plus touchées que d'autres, : dans le plan principal, pour un angle d'incidence de 60° (figure 3.3 et 3.4, graphe en bas à gauche), et un grand angle d'émergence, le bruit estimé (0.03) est environ 3 fois supérieur à la moyenne. De plus, l'erreur

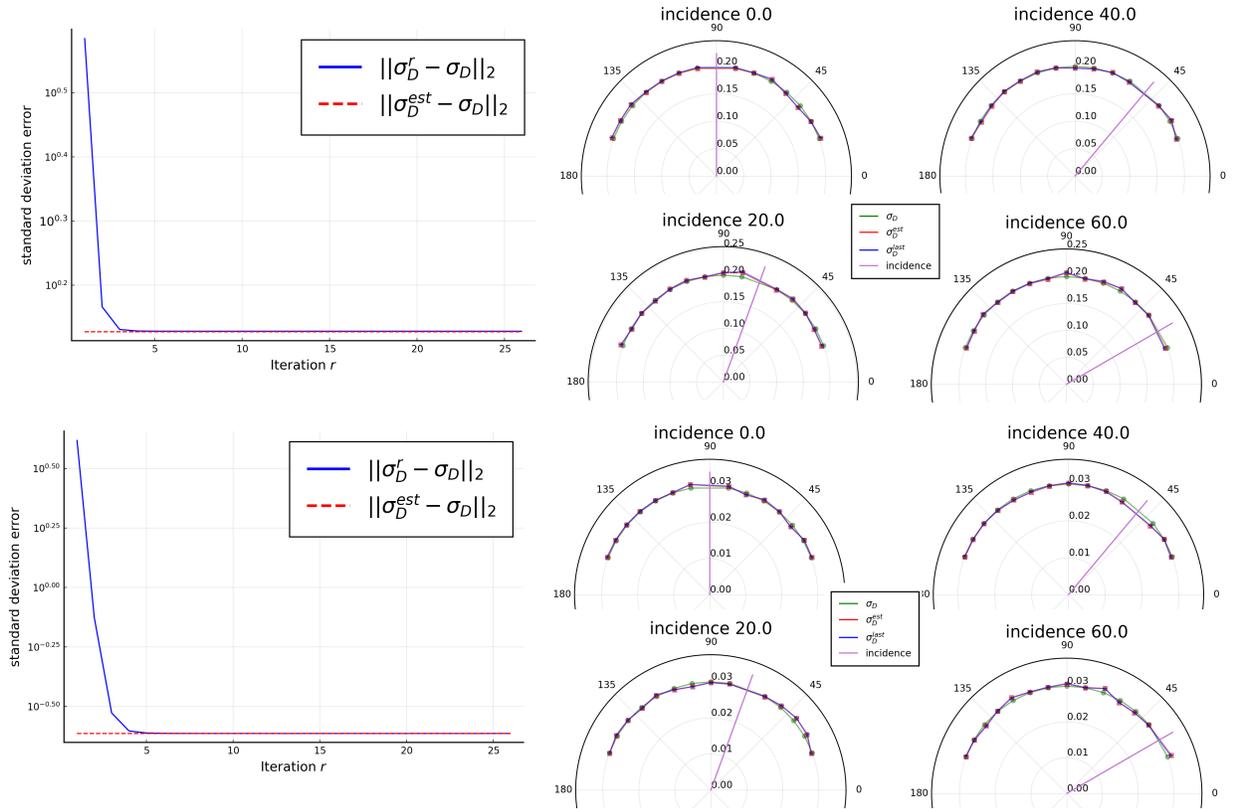


FIGURE 3.2 – Estimation du niveau de bruit du modèle pour les géométries *set-G70*. En haut : $\sigma = 0.2$, en bas : $\sigma = 0.03$. Seul les géométries du plan principal sont affichées.

est plus marquée dans les régimes de rétro-diffusion (angle d'incidence et d'émergence proche). Cela peut s'expliquer notamment par le fait que le modèle de Hapke à 4 paramètres utilisé ici ne permet pas de prendre en compte l'effet d'opposition, qui n'est plus négligeable dans ces régimes.

3.1.5 Conclusion

Nous avons proposé dans cette partie une modélisation permettant de mesurer une éventuelle incertitude systématique sur le modèle physique. Cette approche nécessite une série d'observations présentant un très faible bruit de mesure, pour qu'il n'interfère pas dans l'estimation. Notre approche permet de contourner le caractère cyclique du problème : a priori, pour pouvoir déterminer cette incertitude, on a besoin de déterminer \mathbf{x} puis de comparer d'une certaine manière $F(\mathbf{x})$ à \mathbf{y}_{obs} . Or, déterminer \mathbf{x} requiert souvent de se donner une incertitude sur le modèle (c'est clair pour les méthodes bayésiennes, mais c'est aussi le cas par exemple pour les méthodes de descente de gradient où la fonction à minimiser est typiquement une erreur de reconstruction pondérée par une incertitude, comme dans [Shepard and Helfenstein, 2007]).

Grâce à une série de mesures présentant une très faible incertitude, nous avons appliqué l'algorithme proposé sur le modèle de Hapke. Le niveau d'incertitude estimé est réel, mais il n'est pas évident de déterminer à quel point sa valeur est significative. Remarquons aussi que nous avons utilisé des mesures provenant d'un même contexte expérimental. Il pourrait être intéressant d'élargir l'approche à d'autres mesures, pour être certain que l'incertitude évaluée ici vient bien du modèle physique et non de la mesure.

Algorithme 3 : Estimation de l'incertitude et d'un biais affine par EM

Result : Estimateur de a , $\boldsymbol{\mu}$ et $\boldsymbol{\Sigma}$.

Générer un jeu d'apprentissage \mathcal{D}^{ref} (avec un bruit σ_{ref} négligeable) et apprendre un modèle GLLiM $\boldsymbol{\theta}^{ref}$.

Initialiser a à 1, $\boldsymbol{\mu}$ à 0 et $\boldsymbol{\Sigma}$ à $\boldsymbol{\Sigma}^{(0)}$ (valeur dépendant du contexte),

while $r \leq r_{max}$ **do**

Mettre à jour le paramètre GLLiM $\boldsymbol{\theta}^{(r-1)}$ en utilisant $\boldsymbol{\theta}^{ref}$ et $a^{(r-1)}, \boldsymbol{\mu}^{(r-1)}, \boldsymbol{\Sigma}^{(r-1)}$ (voir section 1.1.4).

foreach \mathbf{y}_n **do** Importance Sampling

Générer un échantillon $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_I$ pondéré par les poids w_1, \dots, w_I suivant la loi $p(\mathbf{x}|\mathbf{y}; \boldsymbol{\Sigma})$, en utilisant une méthode d'échantillonnage préférentiel (IS ou IMIS) et p_G comme loi de proposition;

end

foreach \mathbf{y}_n **do** Calcul de a

Calculer $a_{n,1}^{(r)} := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i T(\mathbf{x}_i)$ où $T(\mathbf{x}) = \langle F(\mathbf{x}), \mathbf{y}_n - \bar{\mathbf{y}} \rangle$

Calculer $a_{n,2}^{(r)} := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i T(\mathbf{x}_i)$ où $T(\mathbf{x}) = \langle F(\mathbf{x}), F(\mathbf{x}) - \bar{\mathbf{f}} \rangle$

end

Mettre à jour $a^{(r-1)}$ suivant (3.1.2) par $a^{(r)} = \frac{\sum_{n=1}^N a_{n,1}^{(r)}}{\sum_{n=1}^N a_{n,2}^{(r)}}$

foreach \mathbf{y}_n **do** Calcul de $\boldsymbol{\mu}$

Calculer $\boldsymbol{\mu}_n^{(r)} := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i T(\mathbf{x}_i)$ où $T(\mathbf{x}) = \mathbf{y}_n - a^{(r)} F(\mathbf{x})$

end

Mettre à jour $\boldsymbol{\mu}^{(r-1)}$ suivant (3.1.2) par $\boldsymbol{\mu}^{(r)} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \boldsymbol{\mu}_n^{(r)}$

foreach \mathbf{y}_n **do** Calcul de $\boldsymbol{\Sigma}$

Calculer $S_n^{(r)} := \frac{1}{\sum_{i=1}^I w_i} \sum_{i=1}^I w_i T(\mathbf{x}_i)$ où $T(\mathbf{x}) = \frac{1}{D} \|\mathbf{y}_n - \boldsymbol{\mu}^{(r)} - a^{(r)} F(\mathbf{x})\|^2$

end

Mettre à jour $\boldsymbol{\Sigma}^{(r-1)}$ suivant (3.1.2) par $\boldsymbol{\Sigma}^{(r)} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N S_n^{(r)}$

end

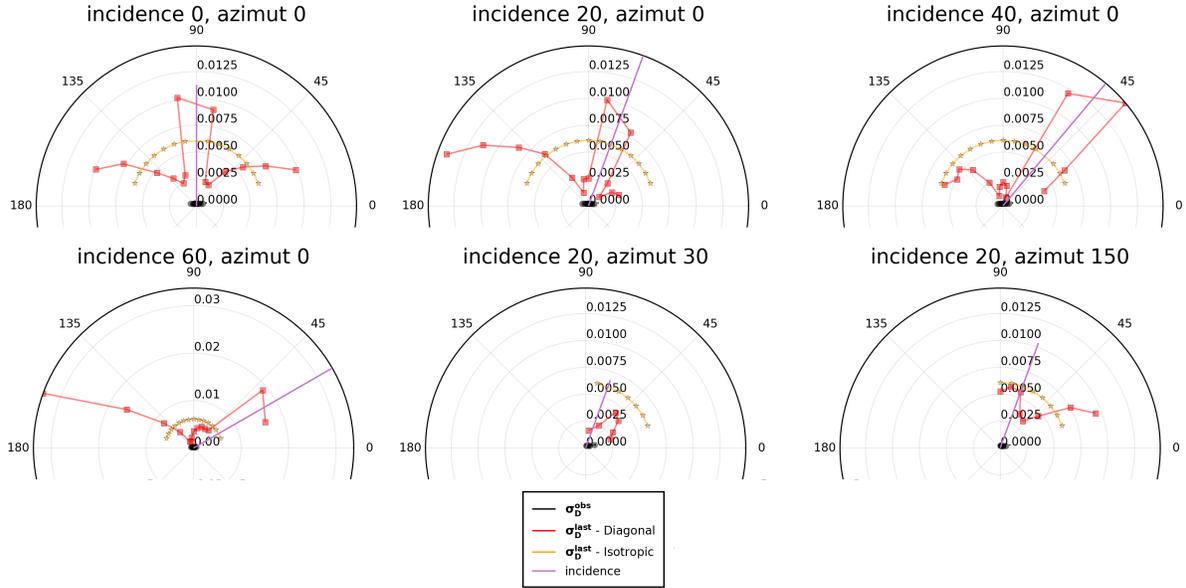
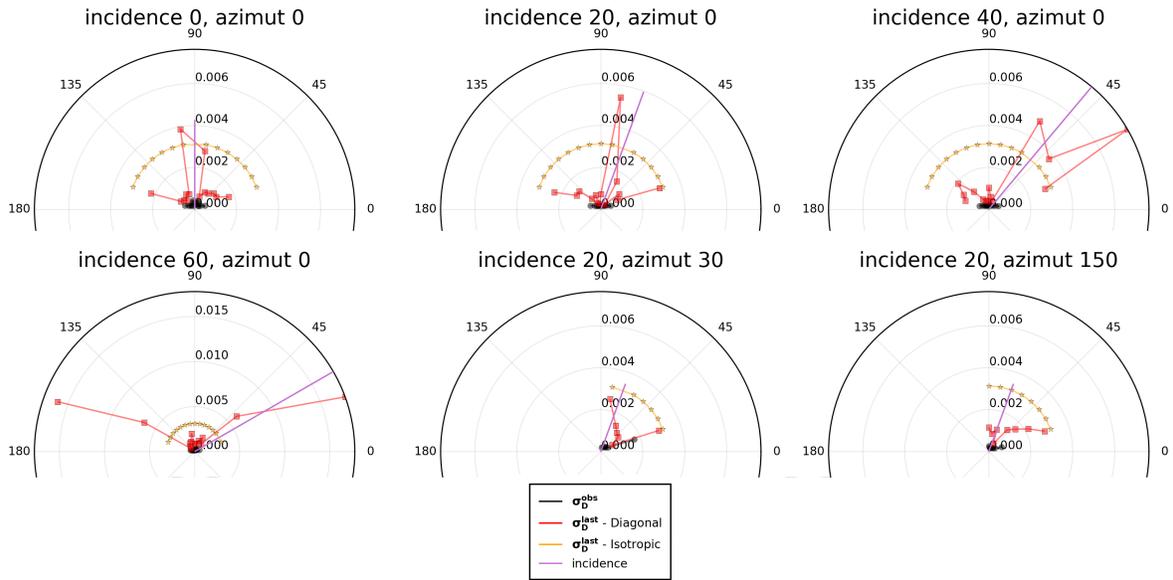


FIGURE 3.3 – Estimation du niveau de bruit du modèle de Hapke. En haut : observations *MukundpuraPoudre*, en bas : observations *Howardite*. σ_D^{obs} est en noir, σ_D avec contrainte diagonale en rouge et σ_D avec contrainte isotropique en jaune. L'échelle pour l'incidence 60 est différentes des autres angles d'incidence.

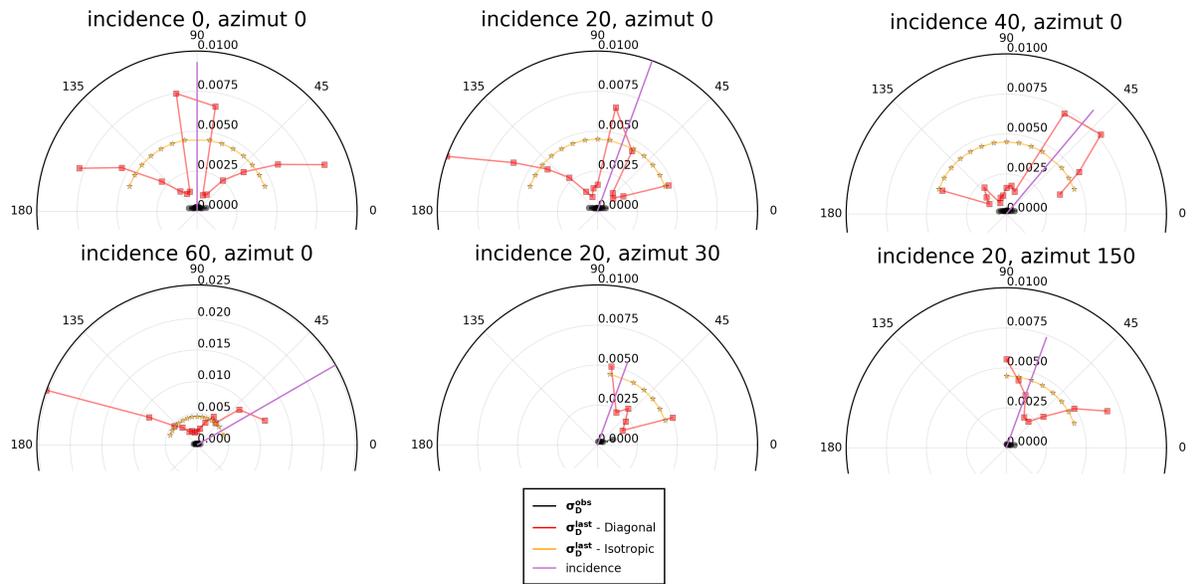
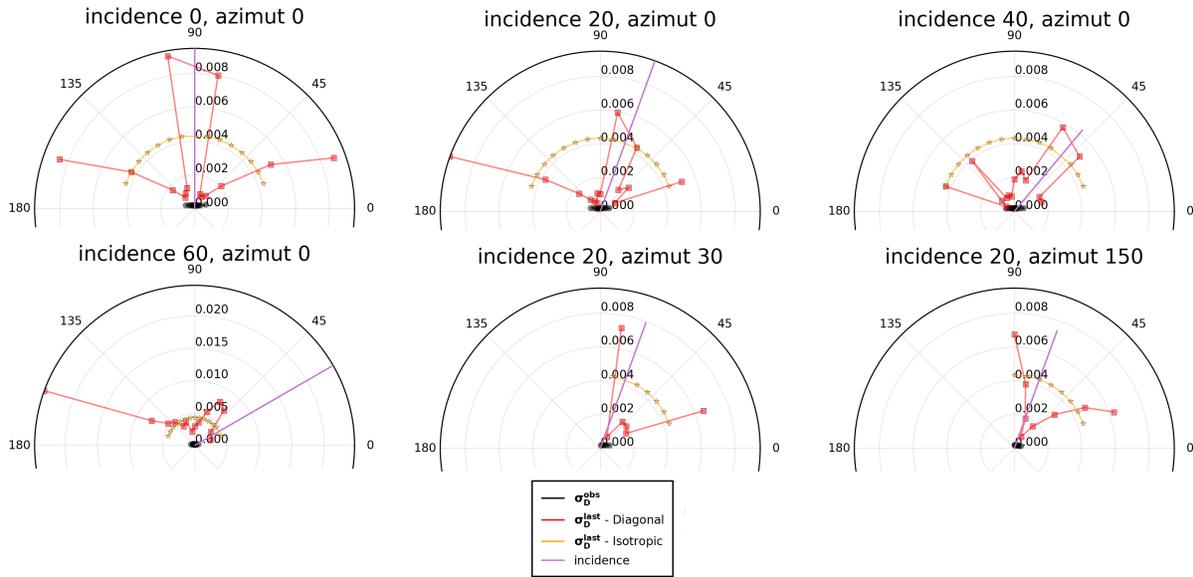


FIGURE 3.4 – Estimation du niveau de bruit du modèle de Hapke. En haut : observations *Ceres*, en bas : *Concaténation des trois séries*. σ_D^{obs} est en noir, σ_D avec contrainte diagonale en rouge et σ_D avec contrainte isotropique en jaune. L'échelle pour l'incidence 60 est différentes des autres angles d'incidence.

3.2 Sélection des géométries de mesures

Nous nous concentrons dans cette partie sur le modèle de Hapke, qui présente une forme paramétrique particulière : la fonctionnelle à inverser est définie par un ensemble de géométries (définies dans la section 2.1.1). Dans la pratique, ces géométries sont fixées par le contexte de la mesure. Nous proposons ici une étude de l'influence du choix des géométries sur l'inversion, avec l'idée que l'outil proposé puisse modifier en retour les géométries utilisées par l'expérimentateur. Il s'agit donc d'une exploration théorique, sur données synthétiques, puisque aucune mesure de réflectance n'a été menée sur les géométries étudiées.

Une première idée est de procéder à une analyse de sensibilité, qui permet d'évaluer à quel point un modèle est sensible à ses variables d'entrée. Dans un contexte de problème inverse, on souhaite en effet éviter le cas d'un modèle qui varie faiblement, car, dans ce cas, une faible variation sur l'observation entraîne une forte variation sur les paramètres physiques, ce qui diminue l'intérêt du résultat de l'inversion. L'analyse de sensibilité du modèle de Hapke a été entreprise par exemple dans la thèse de S. Labarre [Labarre, 2017], qui calcule les indices de Sobol de premier ordre. Étant donné un modèle $Y = f(X)$, où $Y \in \mathbb{R}$, $X \in \mathbb{R}^L$ et f est une fonction déterministe, [Sobol, 1993] définit les indices de Sobol (du premier ordre) par

$$S_l = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}[Y|X_l]]}{\text{Var}[Y]} \quad (3.5)$$

Ces indices sont reliés à une décomposition de la variance de Y , et expriment la contribution de la variable X_l à la variance totale. [Labarre, 2017] propose de calculer ces indices pour plusieurs géométries, ce qui revient à prendre successivement $f = f_{BRDF,G}$ pour G dans un ensemble de géométries. La comparaison des indices de Sobol entre les différentes géométries, reproduite en figure 3.5, permet alors

- pour une géométrie donnée, de classer les paramètres (ω, θ, b, c) en terme d'influence sur la réflectance prédite par le modèle,
- pour un paramètre donné, de déterminer la géométrie la plus sensible au paramètre.

Suivant l'analyse de S. Labarre, on remarque que les paramètres ω et θ sont les plus déterminants (entre 20 et 50% de contribution) dans de vastes portions de l'espace des géométries (ω plutôt dans le plan solaire et θ plutôt dans le plan anti-solaire, en régime de diffusion vers l'avant). Les paramètres b et c sont moins influents, avec une contribution très faible en dehors des petits angles de phases (domaine restreint pour b , plus vaste pour c).

Dans notre contexte, nous considérons que les paramètres à estimer sont fixés, et nous cherchons plutôt à étudier l'influence des géométries. Autrement dit, on cherche d'une certaine manière à évaluer la sensibilité du modèle *inverse*. Si F^{-1} était bien définie et explicite, on pourrait par exemple se donner un jeu de géométries assez large, et retenir les géométries maximisant les indices de Sobol pour F^{-1} . Une autre idée, qui ne requiert pas l'expression de F^{-1} , est d'inverser le rôle de X et Y , en définissant des pseudo indices de Sobol inverses :

$$S_{d,l}^* = \frac{\text{Var}[\mathbb{E}[X_l|Y_d]]}{\text{Var}[X_l]} \quad (3.6)$$

où (X, Y) suivent le modèle 3.1. En utilisant le modèle GLLiM comme approximation de la loi de (X, Y) , on pourrait alors évaluer ces indices. Comme les coordonnées de Y ne sont en général pas indépendantes, il faudrait en toute rigueur appliquer la méthodologie proposé dans [Chastaing et al., 2015]. De plus, leur interprétation n'est pas évidente : en fait, comme Y ne suit pas une loi uniforme, on ne peut pas vraiment les voir comme des indices de Sobol pour F^{-1} .

Intuitivement, nous cherchons à évaluer à quel point un jeu de géométries contraint les paramètres physiques. Pour cela, nous proposons finalement d'utiliser la variance de la loi a-posteriori. Nous définissons donc l'indice de détermination d'un ensemble de géométrie \mathcal{D} (pour $l \in \llbracket 1, L \rrbracket$) par

$$T_{l,\mathcal{D}} = \mathbb{E}[\text{Cov}[X|Y_{\mathcal{D}}]_{l,l}]$$

et nous cherchons alors les configurations géométriques \mathcal{D} qui *minimisent* cette quantité.

3.2.1 Calcul des indices de détermination

Nous proposons de calculer ces indices à l'aide du modèle GLLiM. Si $(X, Y) \sim GLLiM_{\theta}$, pour \mathbf{y} donné, la variance conditionnelle $Var[X|Y = \mathbf{y}]$ est explicite (1.1.4.1), et, comme Y suit une loi de mélange gaussien, on peut facilement générer un échantillon suivant cette loi et calculer $T_{l,\mathcal{D}}$ par intégration numérique. Plus précisément, une fois θ estimé, on génère un échantillon $(\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N)$ suivant la loi de $Y_{\mathcal{D}}$, et on estime $T_{l,\mathcal{D}}$ par

$$T_{l,\mathcal{D}} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Cov[X|Y_{\mathcal{D}} = \mathbf{y}_n]_{l,l}$$

Remarquons qu'un seul apprentissage est nécessaire : si \mathcal{D}_{max} désigne l'union de tous les sous-ensembles de géométries à étudier, si θ est appris sur un jeu généré avec \mathcal{D}_{max} , on peut déduire les paramètres du modèle GLLiM pour un sous jeu de géométries en appliquant la remarque suivante :

Proposition 3.2.1. *Si $(X, Y) \sim GLLiM_{\theta}$, si $\mathcal{D} \subset \llbracket 1, D \rrbracket$, alors $(X, Y_{\mathcal{D}}) \sim GLLiM_{\theta'}$, où $\theta' := \{\pi_k, \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k, \mathbf{A}'_k, \mathbf{b}'_k, \mathbf{\Sigma}'_k\}$, avec*

$$\begin{aligned} \mathbf{A}'_k &= \mathbf{A}_k[\mathcal{D}, :] \\ \mathbf{b}'_k &= \mathbf{b}_k[\mathcal{D}] \\ \mathbf{\Sigma}'_k &= \mathbf{\Sigma}_k[\mathcal{D}, \mathcal{D}] \end{aligned}$$

Indices de détermination

```
# define a model object with the whole set of D geometries
context = Models.Hapke("whole geometries", geometries)

# train a GLLiM model (training options given by 'gllim_params')
X, Y = Models.data_training(context, N_train, 1e-5)
gllim, _ = Gllim.train(gllim_params, X, Y)

# defines the subset of the set {1, ... , D}
subset = [1,5,8]

# compute the determination (array of size L)
Ns = 10_000 # number of points sampled for numerical integration
determination = Sobol.indice_determination(gllim, subset, Ns)
```

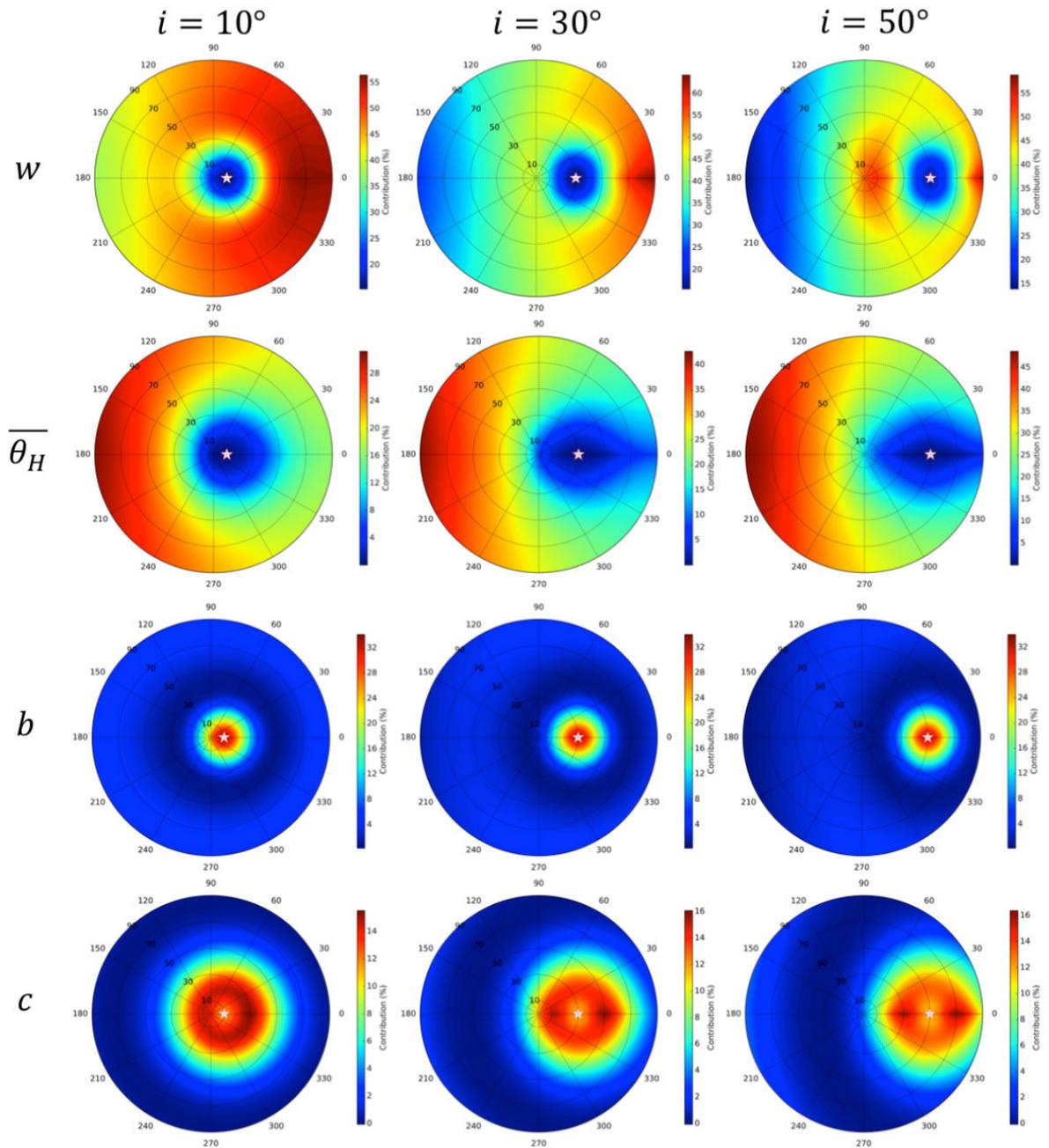


FIGURE 3.5 – Indices de Sobol pour le modèle de Hapke (image extraite de [Labarre, 2017], les variables P et B_0 ont été masquées). L'angle d'émergence relatif à la direction solaire s'apparente à l'angle polaire. La direction d'illumination est représentée par une étoile blanche placée sur l'axe polaire à une distance du centre qui correspond à l'angle d'incidence. Les valeurs des indices de Sobol sont codées suivant une table de couleurs.

3.2.2 Application au modèle de Hapke

Nous proposons une étude systématique d'un jeu de 36 configurations géométriques (θ_0, θ, ϕ) construites en combinant les valeurs suivantes (dont 24 en dehors du plan principal) :

- incidences : $\theta_0 \in \{10, 50\}$
- émergences : $\theta \in \{20, 40, 70\}$
- azimuts : $\varphi \in \{0, 30, 70, 110, 150, 180\}$

Parmi tous les sous ensembles possibles ($2^{36} - 1 = 68\,719\,476\,735$), nous nous restreignons aux configurations obtenues en combinant les deux angles d'incidences (10 et 50), un sous ensemble des angles d'émergences et un sous ensemble des azimuts, symétriques par rapport à 90° . Cela revient à choisir une sous partie (non vide) de $[20, 40, 70] \times [0, 30, 70]$, ce qui donne $2^9 - 1 = 511$ configurations (voir le diagramme polaire de la figure 3.6). Pour chaque configuration, nous calculons l'indice de détermination présenté ci-dessus. Nous calculons aussi les critères d'erreur utilisés dans les chapitres précédents : l'erreur de prédiction (sur la variable X) et l'erreur relative de reconstruction, moyennées sur un jeu de test synthétique. Cela requiert d'appliquer la procédure d'inversion du premier chapitre : les paramètres sont fixés à $K = 60$, $\sigma_{train} = 10^{-5}$ et $(I_0, B, J) = (2000, 1000, 20)$.

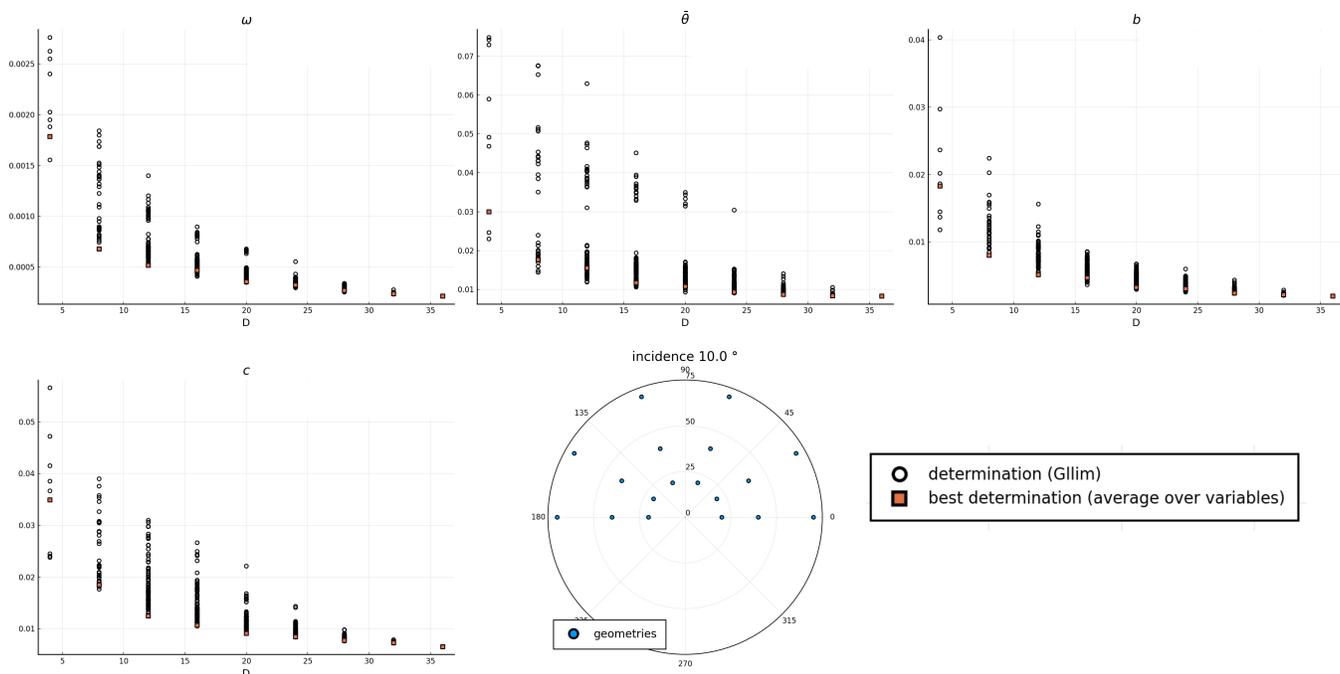


FIGURE 3.6 – Indices de détermination en fonction de la taille du sous ensemble de géométries, paramètre par paramètre. Le dernier graphe représente le jeu complet des 36 géométries.

La figure 3.6 présente l'indice de détermination pour chaque sous-configuration et pour chaque variable. La tendance générale est attendue : augmenter le nombre de géométries tend à faire diminuer la variance de la loi a-posteriori. On remarque qu'au delà de $D = 25$, la différence n'est plus significative. On retrouve aussi une certaine hiérarchie entre les paramètres : ω est nettement mieux déterminé que $\bar{\theta}$, b et c . La figure 3.7 apporte un autre éclairage : on observe en effet, non plus une tendance globalement décroissante, mais plutôt un minimum autour de $D = 20$. Il semble que la diminution de variance après $D = 20$ n'est en fait pas liée à la précision sur des paramètres physiques.

Pour vérifier cette hypothèse, nous procédons à une deuxième expérience. Nous choisissons une géométrie de mesure ($G := (\theta_0, \theta, \varphi) = (10, 20, 0)$) et nous considérons la fonctionnelle qui à un paramètre \mathbf{x} associe le

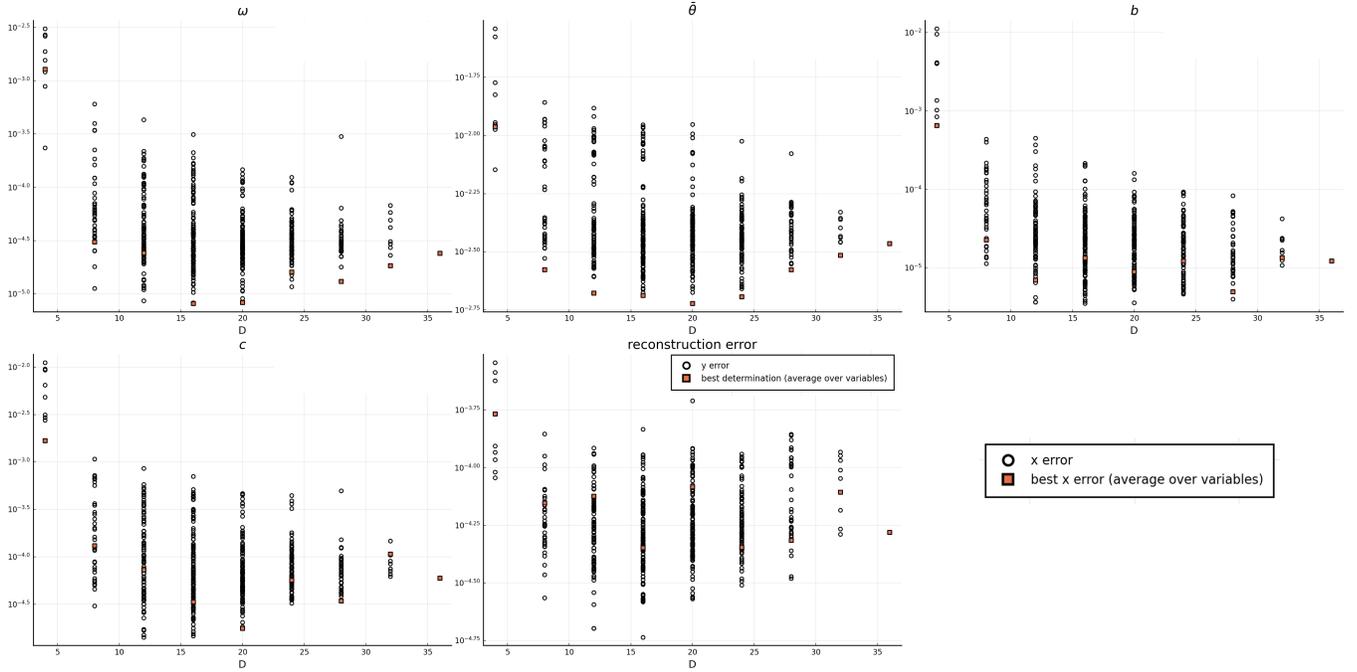


FIGURE 3.7 – Erreur sur les paramètres physiques, paramètre par paramètre. Le dernier graphe montre l’erreur relative de reconstruction.

vecteur formé par D répétitions de la réflectance $f_{BRDF,G}$:

$$F(\mathbf{x}) = (f_{BRDF,G}(\mathbf{x}), f_{BRDF,G}(\mathbf{x}), \dots, f_{BRDF,G}(\mathbf{x})) \in \mathbb{R}^D$$

Nous faisons varier D de 1 à 20. Intuitivement, répéter la même information ne devrait pas augmenter la détermination des paramètres physiques. Or, la figure 3.8 montre malgré tout une décroissance de la variance en fonction de la dimension. Il semble donc y avoir un effet artificiel de l’augmentation de la dimension.

Cette expérience nous conduit à interpréter avec prudence l’indicateur de détermination proposé, notamment pour des dimensions D variables. Nous concluons donc que les géométries optimales (parmi celles testées) sont données par les erreurs sur la variable \mathbf{x} (figure 3.7). Pour $D = 16, 20, 24$, la figure 3.9 détaille donc la meilleure configuration, à taille fixée, en terme d’erreur moyenne sur \mathbf{x} . On remarque notamment que les géométries dans le plan principal ne sont pas forcément nécessaires pour contraindre correctement les paramètres. Cette conclusion peut être comparée dans une certaine mesure aux travaux entrepris dans [Schmidt and Bourguignon, 2019] : le jeu de géométries étudiées et le critère de qualité de l’inversion sont différents, mais les résultats de cette étude montrent quant à eux que le plan principal est essentiel.

3.2.3 Conclusion

Nous avons proposé dans cette partie un indicateur permettant d’évaluer l’influence d’un *ensemble* de géométries (ou plus généralement des composantes du vecteur observé) sur la détermination des paramètres physiques. Nous avons remarqué que cette indicateur peut être biaisé par la dimension, ce qui incite à l’utiliser surtout pour comparer des jeux de géométries de même taille. L’étude d’un jeu de 36 géométries révèle globalement des différentes importantes sur la précision possible : il serait certainement intéressant de comparer ces résultats avec les pratiques courantes en planétologie et d’inverser des mesures effectuées avec les géométries proposées.

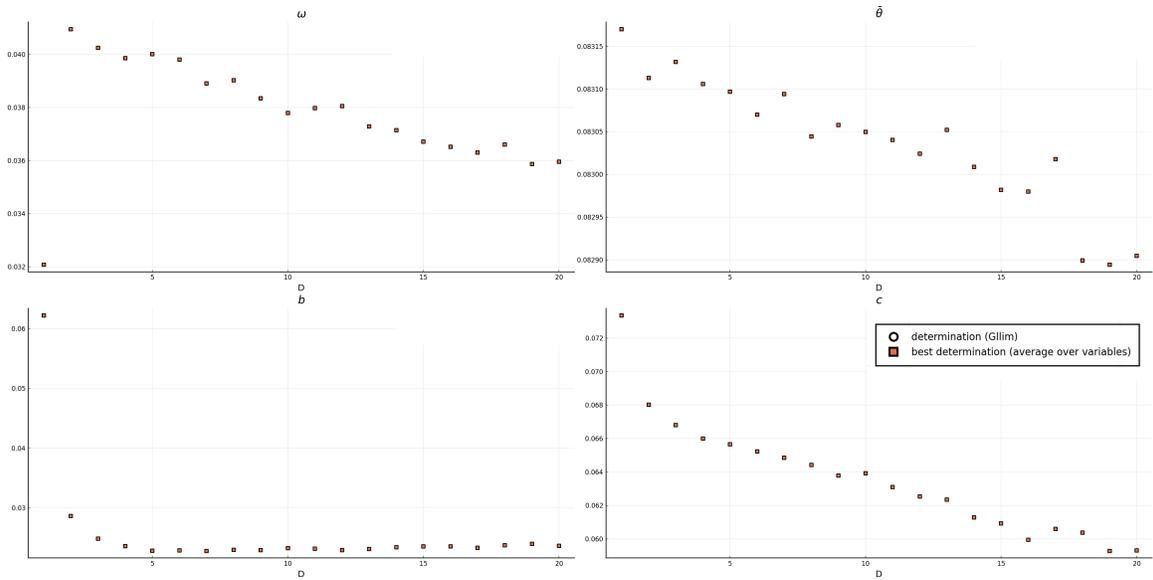


FIGURE 3.8 – Duplication d’une même géométrie - Indices de détermination en fonction de la dimension D , variable par variable.

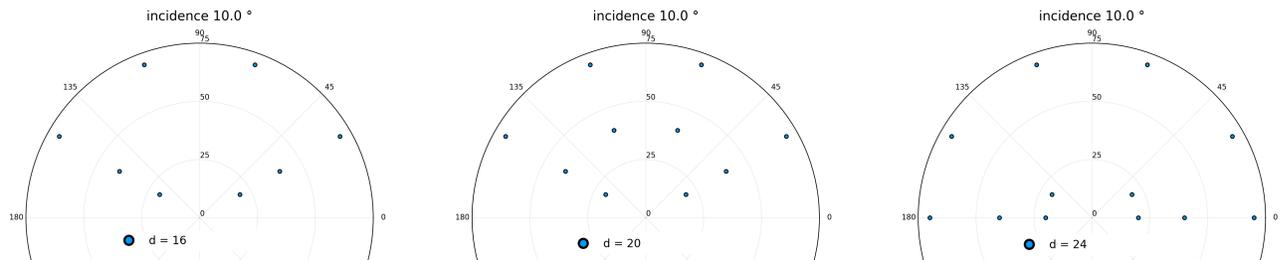


FIGURE 3.9 – Détails des configurations géométriques optimales (de taille $D \in \{16, 20, 24\}$). L’angle d’incidence affiché vaut 10° , les géométries pour l’incidence $\theta_0 = 50$ sont identiques. Le rayon du plot polaire représente l’angle d’émergence, l’angle polaire représente l’azimut.

3.3 Utilisation du modèle GLLiM avec un prior gaussien

Nous considérons à nouveau le cas général de l'inversion bayésienne d'un modèle physique quelconque et nous étudions l'ajout d'un prior sur les paramètres physiques X . Inclure une information a-priori peut arriver naturellement pour modéliser une éventuelle connaissance de l'expert, ou pour régulariser un problème mal posé. Remarquons que, par définition, un problème d'inversion bayésienne requiert toujours de se donner un prior sur la loi de X . En revanche, il sera généralement peu informatif : typiquement, un prior uniforme traduit le fait que l'expert n'a pas de connaissance explicite en plus du domaine de définition des paramètres. Nous considérons donc ici des loi a-priori permettant d'influencer réellement la prédiction des paramètres. Un cas particulier consiste à prendre un prior défini par une densité proportionnelle au produit d'une loi $\mathcal{U}_{\mathcal{P}}$ uniforme sur l'espace des paramètres physiques et d'une loi gaussienne centrée en \mathbf{x}_0 , de covariance $\mathbf{\Gamma}_0$. La loi a-posteriori prend alors la forme suivante :

$$p_0(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y}) \propto \mathcal{U}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x})\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_0, \mathbf{\Gamma}_0)\mathcal{N}(\mathbf{y}; F(\mathbf{x}), \mathbf{\Sigma})$$

Rappelons alors que l'estimateur du maximum a-posteriori (MAP) prend la forme

$$\hat{\mathbf{x}}_{MAP} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{P}} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_{\mathbf{\Gamma}_0}^2 + \|\mathbf{y} - F(\mathbf{x})\|_{\mathbf{\Sigma}}^2$$

On retrouve un problème d'assimilation de données : étant donné une première estimation \mathbf{x}_0 , on souhaite prendre en compte l'observable \mathbf{y} pour la corriger. Les valeurs de $\mathbf{\Gamma}_0$ et $\mathbf{\Sigma}$ sont alors cruciales : par exemple, prendre $\mathbf{\Sigma}$ proche de 0 reviendrait à résoudre le problème inverse seul, sans prendre en compte l'information a-priori ; à l'inverse, prendre $\mathbf{\Gamma}_0 = 0$ donne un Dirac centré en \mathbf{x}_0 .

L'objectif de cette partie est de montrer que le modèle GLLiM peut naturellement être adapté pour prendre en compte un prior gaussien (et même un mélange de lois gaussiennes), d'une manière efficace.

3.3.1 Modèle GLLiM avec prior gaussien

Remarquons pour commencer qu'on peut très simplement prendre en compte un prior sur X en générant un jeu d'apprentissage adapté, puis en appliquant l'algorithme d'apprentissage présenté dans le premier chapitre. Cette approche est tout à fait valable si la loi a-priori est indépendante des observations. En revanche, dans le cas général où \mathbf{x}_0 et $\mathbf{\Gamma}_0$ varient quand l'observation \mathbf{y}_{obs} varie, le temps de calcul résultant des apprentissages multiples devient prohibitif. L'objectif ici est donc de pouvoir conserver une approche en deux temps, avec un seul apprentissage, et de prendre en compte le prior dans l'étape de prédiction, de manière efficace.

Modèle GLLiM élargi Une première approche consiste à élargir le vecteur des observables : plus précisément, posons

$$\tilde{Y} := (F(X) + \epsilon_1, X + \epsilon_2)$$

où $X \sim \mathcal{U}_{\mathcal{P}}$, $\epsilon_1 \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{\Sigma})$, $\epsilon_2 \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{\Gamma}_0)$, et $X, \epsilon_1, \epsilon_2$ sont indépendants.

Proposition 3.3.1. *On retrouve la même loi conditionnelle :*

$$p(\mathbf{x}|\tilde{Y} = (\mathbf{y}, \mathbf{x}_0)) \propto \mathcal{U}_{\mathcal{P}}(\mathbf{x})\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{\Gamma}_0, \mathbf{x}_0)\mathcal{N}(F(\mathbf{x}); \mathbf{y}, \mathbf{\Sigma})$$

Démonstration. Par indépendance, $\tilde{Y}|X = \mathbf{x}$ a une densité produit :

$$p(\mathbf{y}, \mathbf{x}_0|X = \mathbf{x}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{\Gamma}_0, \mathbf{x}_0)\mathcal{N}(F(\mathbf{x}); \mathbf{\Sigma}, \mathbf{y})$$

Le fait que $\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{\Gamma}_0, \mathbf{x}_0) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_0; \mathbf{\Gamma}_0, \mathbf{x})$ et la formule de Bayes permettent de conclure. \square

Cette approche permet d'utiliser directement un modèle GLLiM comme estimateur : un jeu d'apprentissage élargi est généré et l'apprentissage estime un modèle en dimension $L \times (L + D)$. De plus, le résultat suivant montre qu'on dispose d'une alternative évitant l'apprentissage en dimension $L \times (L + D)$, possiblement coûteux si L est grand.

Proposition 3.3.2. *En supposant que $(X, Y) \sim GLLiM_{\theta}$, et en notant $\tilde{Y} = (Y, X + \epsilon)$, avec $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \Gamma_0)$, indépendant de X et Y , alors $(X, \tilde{Y}) \sim GLLiM_{\theta_0}$ où*

$$\begin{aligned}\pi_{0,k} &= \pi_k \\ \mathbf{c}_{0,k} &= \mathbf{c}_k \\ \Gamma_{0,k} &= \Gamma_k \\ \mathbf{A}_{0,k} &= \begin{pmatrix} \mathbf{A}_k \\ I_L \end{pmatrix} \\ \mathbf{b}_{0,k} &= \begin{pmatrix} \mathbf{b}_k \\ 0_L \end{pmatrix} \\ \Sigma_{0,k} &= \begin{pmatrix} \Sigma_k & 0_{D,L} \\ 0_{L,D} & \Gamma_0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Démonstration. Soit (X', Y') , de loi $GLLiM_{\theta}$ et $\epsilon'_k \sim \mathcal{N}(0, \Sigma_k)$, indépendant de X' et Z' . On suppose que

$$Y' = \sum_{k=1}^K \mathbb{1}_{Z'=k} (\mathbf{A}_k X' + \mathbf{b}'_k + \epsilon'_k)$$

Soit $\epsilon' \sim \mathcal{N}(0, \Gamma_0)$, indépendant de ϵ'_k . Notons $\tilde{\epsilon}_k = \begin{pmatrix} \epsilon'_k \\ \epsilon' \end{pmatrix}$. Alors,

$$\sum_{k=1}^K \mathbb{1}_{Z'=k} (\mathbf{A}_{0,k} X' + \mathbf{b}_{0,k} + \tilde{\epsilon}_k) = (Y', X' + \epsilon')$$

Par indépendance de ϵ' et ϵ'_k , cela montre que $(X', Y', X' + \epsilon')$ suit un modèle $GLLiM_{\theta_0}$. Maintenant, en conditionnant par X , on peut exprimer la densité de $(X', Y', X' + \epsilon') =: (X', Y', X'_0)$:

$$\begin{aligned}p_{X', Y', X'_0}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}_0) &= p_{Y', X'_0}(\mathbf{y}, \mathbf{x}_0 | X' = \mathbf{x}) p_{X'}(\mathbf{x}) \\ &= p_{Y'}(\mathbf{y} | X' = \mathbf{x}) p_{X'_0}(\mathbf{x}_0 | X' = \mathbf{x}) p_{X'}(\mathbf{x}) && \text{(indépendance)} \\ &= p_{X', Y'}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathcal{N}(\mathbf{x}; \Gamma_0, \mathbf{x}_0) \\ &= p_{X, Y}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathcal{N}(\mathbf{x}; \Gamma_0, \mathbf{x}_0) \\ &= p_{X, Y, X_0}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{x}_0) && \text{(même raisonnement)}\end{aligned}$$

Donc, (X', Y', X'_0) et (X, \tilde{Y}) ont la même loi, ce qui conclut. \square

Pour des raisons de performance, on peut donc procéder au même apprentissage que dans le premier chapitre (en dimension $L \times D$), puis modifier dans un second le paramètre θ pour prendre compte \mathbf{x}_0 et Γ_0 .

Loi conditionnelle avec prior gaussien Une autre approche consiste à travailler directement au niveau des loi a-posteriori. On remarque en effet que la loi a-posteriori (avec prior gaussien) se factorise en deux termes (et une constante multiplicative) : la loi a-posteriori, avec un prior uniforme et le terme provenant

du prior. Comme $p_G(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$ est construite pour être une bonne approximation de $p(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$, on peut donc approcher la densité $p_0(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$ par

$$p_{0,G}(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y}) \propto p_G(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{x}_0, \mathbf{\Gamma}_0) \quad (3.7)$$

Comme la loi $p_G(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$ est un mélange de gaussiennes, cette formulation présente l'intérêt que $p_{0,G}$ est encore exprimable par une formule close, comme le montre la proposition suivante.

Proposition 3.3.3. *En notant $\mathbf{m}_k^* = \mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k^*$, $p_{0,G}(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})$ est un mélange de gaussiennes*

$$\sum_{k=1}^K \frac{\alpha_k^* \beta_k}{\alpha} \mathcal{N}(\mathbf{x}_k, \mathbf{S}_k) \text{ où}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_k &= (\mathbf{\Gamma}_0^{-1} + (\mathbf{\Sigma}_k^*)^{-1})^{-1} \\ \mathbf{x}_k &= \mathbf{S}_k (\mathbf{\Gamma}_0^{-1} \mathbf{x}_0 + (\mathbf{\Sigma}_k^*)^{-1} \mathbf{m}_k^*) \\ \beta_k &= \mathcal{N}(\mathbf{m}_k^*; \mathbf{x}_0, \mathbf{B}_k^{-1}) \\ \mathbf{B}_k &= (\mathbf{\Gamma}_0 + \mathbf{\Sigma}_k^*)^{-1} \\ \alpha &= \sum_{k=1}^K \alpha_k^* \beta_k \end{aligned}$$

Démonstration. Le résultat s'obtient en développant le produit et en appliquant la proposition B.2.1 à chacun des termes de la somme. \square

Cette approche permet donc d'inclure efficacement un prior gaussien : θ est estimé une seule fois, θ est obtenu par 1.4, puis, étant donnée une observation et un prior $\mathcal{N}(\mathbf{x}_0, \mathbf{\Gamma}_0)$, la loi a-posteriori (incluant le prior) est facilement calculable (avec 3.3.3), et reste d'ailleurs un mélange gaussien.

Equivalence directe des deux formulations Les deux approches proposées ci-dessus sont bien équivalentes. En effet, on peut vérifier directement l'égalité des deux lois données par 3.3.2 et 3.7.

Proposition 3.3.4. *On conserve les notations introduites précédemment. On a alors l'égalité attendue :*

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{0,k}^* \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x}_0 \end{pmatrix} + \mathbf{b}_{0,k}^* &= \mathbf{x}_k \\ \mathbf{\Sigma}_{0,k}^* &= \mathbf{S}_k \\ \alpha_{0,k}^*(\mathbf{y}, \mathbf{x}_0) &= \alpha_k \end{aligned}$$

Démonstration. Commençons par expliciter $\mathbf{\Sigma}_{0,k}^*$:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Sigma}_{0,k}^* &= \left(\mathbf{\Gamma}_k^{-1} + \begin{pmatrix} {}^t \mathbf{A}_k \\ I_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{\Sigma}_k^{-1} & 0 \\ 0 & \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}^t \mathbf{A}_k \\ I_L \end{pmatrix} \right)^{-1} \\ &= (\mathbf{\Gamma}_k^{-1} + {}^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{A}_k + \mathbf{\Gamma}_0^{-1})^{-1} \\ &= (\mathbf{\Sigma}_k^{*-1} + \mathbf{\Gamma}_0^{-1})^{-1} = \mathbf{S}_k \end{aligned}$$

On a ensuite

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{0,k}^* \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x}_0 \end{pmatrix} + \mathbf{b}_{0,k}^* &= \mathbf{\Sigma}_{0,k}^* \left({}^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x}_0 \end{pmatrix} + \mathbf{\Sigma}_{0,k}^* (\mathbf{\Gamma}_k^{-1} \mathbf{c}_k - {}^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{b}_k) \\ &= \mathbf{\Sigma}_{0,k}^* \left({}^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{y} + \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \mathbf{x}_0 + \mathbf{\Sigma}_k^{*-1} \mathbf{b}_k \right) \\ &= \mathbf{\Sigma}_{0,k}^* \left(\mathbf{\Sigma}_k^{*-1} (\mathbf{A}_k^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_k) + \mathbf{\Gamma}_0^{-1} \mathbf{x}_0 \right) = \mathbf{x}_k \end{aligned}$$

L'égalité des poids est moins claire. Pour y parvenir, on peut décomposer, k étant fixé, $p_{Y, X_0}(\mathbf{y}, \mathbf{x}_0) := \mathcal{N}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{x}_0 \end{pmatrix}; \mathbf{c}_{0,k}^*, \mathbf{\Gamma}_{0,k}^*\right)$ en $p_{X_0}(\mathbf{x}_0|Y = \mathbf{y})p_Y(\mathbf{y})$. Comme

$$\mathbf{\Gamma}_{0,k}^* = \begin{pmatrix} \mathbf{\Gamma}_k^* & \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k \\ \mathbf{\Gamma}_k^t \mathbf{A}_k^t & \mathbf{\Gamma}_0 + \mathbf{\Gamma}_k \end{pmatrix}$$

les formules de conditionnement gaussien donnent

$$p_{X_0}(\mathbf{x}_0|Y = \mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_0; \mathbf{c}_k + \mathbf{\Gamma}_k^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k^{*-1} (\mathbf{y} - \mathbf{c}_k^*), \mathbf{\Gamma}_0 + \mathbf{\Gamma}_k - \mathbf{\Gamma}_k^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k^{*-1} \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k)$$

L'identité de Woodbury permet de remplacer $\mathbf{\Gamma}_k^{*-1}$ par $\mathbf{\Sigma}_k^{-1} - \mathbf{\Sigma}_k^{-1} \mathbf{A}_k \mathbf{A}_k^*$, puis d'obtenir les relations

$$\begin{aligned} \mathbf{\Gamma}_k^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k^{*-1} &= \mathbf{A}_k^* \\ \mathbf{\Gamma}_k - \mathbf{\Gamma}_k^t \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k^{*-1} \mathbf{A}_k \mathbf{\Gamma}_k &= \mathbf{\Sigma}_k^* \end{aligned}$$

ce qui montre que $p_{X_0}(\mathbf{x}_0|Y = \mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}_0; \mathbf{m}_k^*, \mathbf{B}_k^{-1})$. D'autre part, on vérifie que $p_Y(\mathbf{y}) = \mathcal{N}(\mathbf{y}; \mathbf{c}_k^*, \mathbf{\Gamma}_k^*)$, ce qui permet de conclure. \square

3.3.2 Généralisation du prior à un mélange gaussien

La deuxième formulation (3.7) présente l'intérêt de se généraliser au cas où le prior est modèle de mélange gaussien. Dans ce cas, la loi a-posteriori prend la forme

$$p_{0-GMM,G} \propto p_G(\mathbf{x}|Y = \mathbf{y})\phi(\mathbf{x})$$

où ϕ est la densité d'un mélange gaussien. On dispose alors de la proposition suivante :

Proposition 3.3.5. *Si ϕ est un mélange de gaussiennes de paramètres $(a_i, \boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{\Gamma}_i)_{i=1..I}$, alors la loi a-posteriori $p_{0-GMM,G}$ est encore un mélange de gaussiennes $\sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^I \frac{\alpha_k^* a_i \beta_{k,i}}{\alpha} \mathcal{N}(\mathbf{x}_{k,i}, \mathbf{S}_{k,i})$ où*

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{k,i} &= (\mathbf{\Gamma}_i^{-1} + (\mathbf{\Sigma}_k^*)^{-1})^{-1} \\ \mathbf{x}_{k,i} &= \mathbf{S}_{k,i} (\mathbf{\Gamma}_i^{-1} \boldsymbol{\mu}_i + (\mathbf{\Sigma}_k^*)^{-1} \mathbf{m}_k^*) \\ \beta_{k,i} &= \mathcal{N}(\mathbf{m}_k^*; \boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{B}_{k,i}) \\ \mathbf{B}_{k,i} &= (\mathbf{\Gamma}_i + \mathbf{\Sigma}_k^*)^{-1} \\ \alpha &= \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^I \alpha_k^* a_i \beta_{k,i} \end{aligned}$$

Démonstration. On procède de façon similaire à 3.3.3 ; le développement du produit donnant cette fois une somme double. \square

Ce résultat permet de modéliser un très large éventail de contraintes physiques. Concernant le modèle de Hapke, on pourrait par exemple envisager d'encoder la relation du hockey-stick par un mélange de deux ou trois composants et d'étudier l'influence de l'ajout de ce prior sur la régularité des solutions.

Dans la suite, nous n'explorons pas en profondeur cette piste, mais nous nous concentrons sur le cas d'un prior gaussien, que nous illustrons par un problème d'assimilation de données provenant de l'étude du manteau neigeux.

Loi conditionnelle avec prior

```
# given a trained GLLiM model, compute the inverse model
theta_inverse = Gllim.inversion(theta)

# given one observation, compute the conditionnal density, with no prior information
weights, means = Gllim.conditionnal_density(theta_inverse, yobs)
covariances = theta_inverse.Sigma

# update the conditionnal density to account for a Gaussian prior
weights, means, covariances = Gllim.conditionnal_density_with_prior(weights,
means, covariances, x_0, Gamma_0)

# or use a Gaussian mixture as prior
gmm = Probas.Gmm{Float64}(weights_prior, means_prior, cholesky_prior)
weights, means, covariances = Gllim.conditionnal_density_with_prior(weights,
means, covariances, gmm)
```

3.3.3 Illustration sur un modèle de manteau neigeux

Parmi les multiples problèmes d’assimilation de données, nous choisissons de nous intéresser au problème présenté dans [Gay et al., 2015]. Il s’agit d’étudier la composition du manteau neigeux à l’aide d’un modèle de rétro-diffusion électro-magnétique (EBM). Les paramètres physiques d’intérêt décrivent la structure et les propriétés texturales des couches de neige. Chaque couche $n \in \llbracket 1, N_L \rrbracket$ est caractérisée par son épaisseur (considérée comme connue), le diamètre des flocons d_n et sa densité ρ_n , les deux derniers paramètres étant libres, résultant en un vecteur $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2N_L}$. Le modèle EBM relie alors ces paramètres à la rétro-diffusion :

$$y = F(\mathbf{x}) = F_{EBM}(d_1, \dots, d_n, \rho_1, \dots, \rho_n)$$

où l’expression de F_{EBM} est définie dans [Phan et al., 2014]. L’objectif de [Gay et al., 2015] est de corriger des mesures de terrain, considérée comme information a-priori, en prenant en compte la rétro-diffusion y , mesurée par un radar. L’approche proposée dans [Phan et al., 2014] consiste à minimiser, par une descente de gradient, la fonction de coût

$$J(\mathbf{x}) := \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_{\mathbf{\Gamma}_0}^2 + \|\mathbf{y} - F(\mathbf{x})\|_{\mathbf{\Sigma}}^2$$

où \mathbf{x}_0 représente la mesure de terrain à corriger, $\mathbf{\Gamma}_0$ est une estimation de l’incertitude sur cette mesure et $\mathbf{\Sigma}$ représente l’incertitude sur la mesure de rétro-diffusion. Nous proposons d’appliquer le formalisme bayésien décrit plus haut, le prior équivalent étant donc donné par la loi $\mathcal{N}(\mathbf{x}_0, \mathbf{\Gamma}_0)$, et d’utiliser l’estimateur de la moyenne de la loi a-posteriori.

Nous étudions ici un jeu de données rassemblé par M. Gay (GISPA - Grenoble) et issu de la campagne NoSREX-II (Nordic Snow Radar Experiment) conduite en Finlande entre 2010 et 2011 ([Lemmetyinen et al., 2011]). Ces données permettent d’étudier la composition du manteau neigeux : pour un site donné, on dispose à la fois de mesures manuelles du profil de la neige, et aussi de mesures de rétro-diffusion, prises par le diffusiomètre SnowCat. Elles sont paramétrées par l’angle d’incidence $\theta_0 \in \{40^\circ, 50^\circ, 60^\circ\}$, la polarisation p (horizontale ou verticale) et la fréquence $fr \in \{10.2Ghz, 13.3Ghz, 16.7Ghz\}$, qui sont pris en compte par le modèle EBM. Suivant [Gay et al., 2015], nous nous restreignons ici à $\theta_0 = 40$, $fr = 10.2Ghz$ (bande X) et à une polarisation verticale :

$$F(\mathbf{x}) = F_{EBM,40,vert,10.2}(\mathbf{x})$$

La figure 3.10 présente les résultats obtenus en comparant les profils de neige avant et après assimilation. On remarque que le diamètre des grains est constamment plus faible après assimilation : cela rejoint l’observation de [Gay et al., 2015] qui constate que la mesure initiale est toujours surestimée. De plus, on observe que, après assimilation, la densité augmente avec la profondeur, ce qui s’explique physiquement par le fait que les couches plus anciennes se tassent sous le poids des plus récentes.

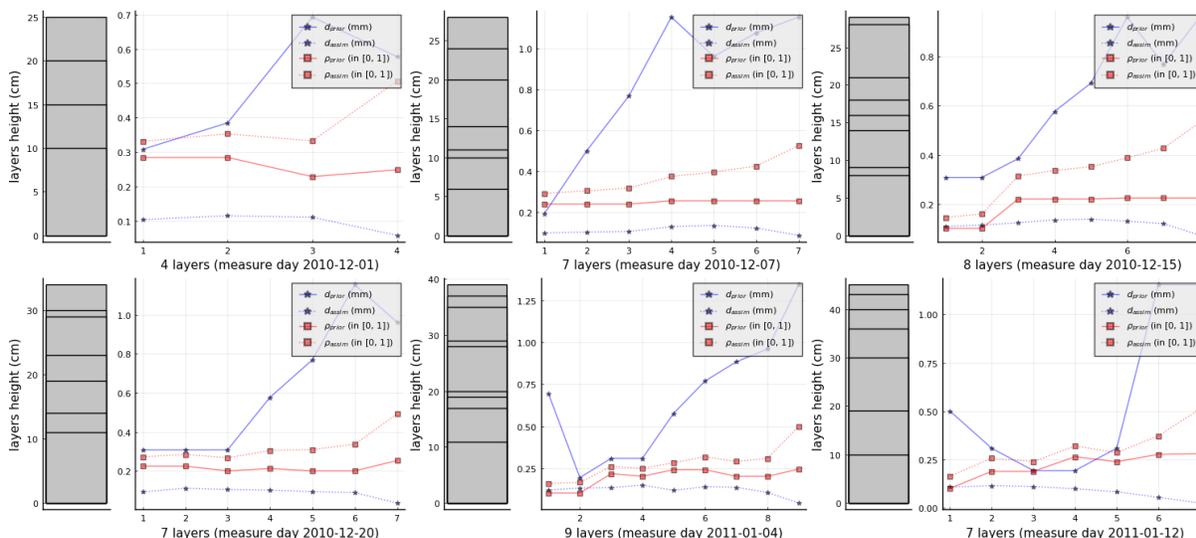


FIGURE 3.10 – Assimilation de profils de manteau neigeux. Pour chaque profil, les couches sont à gauche, les valeurs des paramètres à droite. Les couches sont numérotés de haut en bas (1 pour la couche de surface). Le *diamètre* des flocons est en bleu, la *densité* en rouge. Les mesures initiales sont en traits pleins, les profils assimilés en points. Les profils restants sont présentés dans l’annexe E.

Ces premiers résultats sont donc globalement satisfaisants. Parmi les pistes à explorer, on pourrait exploiter, quand elles sont disponibles, les mesures effectuées dans d’autres configurations d’incidence, fréquence et polarisation. On pourrait ainsi augmenter la dimension du vecteur \mathbf{y}_{obs} , avec l’idée de mieux contraindre les paramètres physiques. Notons aussi que nous utilisons dans notre formalisme la moyenne de la loi a-posteriori, tandis que l’approche par descente de gradient calcule un maximum (local) de cette densité. On peut penser que la donnée du prior rend ces deux quantités proches, mais ce serait intéressant de le vérifier. Dans le cas contraire, on pourrait aussi mettre en oeuvre les outils d’étude de solutions multiples présentés dans le premier chapitre.

3.3.4 Conclusion

Nous avons montré dans cette partie comment utiliser le modèle GLLiM pour prendre en compte une loi a-priori (loi gaussienne ou mélange de gaussiennes). Cela permet par exemple de régulariser un problème inverse existant, mais permet aussi de traiter un problème d’assimilation de données. L’approche est particulièrement intéressante dans un contexte de données massives, où toutes les observations sont issues d’un même modèle physique (mais peuvent être associées à des a-priori distincts). Dans ce cas, l’approche en deux temps (apprentissage et prédiction) permet un net gain en temps de calcul.

Remarquons qu’il ne s’agit pas d’une adaption propre au modèle GLLiM : en fait, les propositions 3.3.3 et 3.3.5 s’appliquent à tout modèle dont la loi a-posteriori est un mélange gaussien. Il s’agit d’un cas particulier d’une approche de Pooling (logarithmique), ici entre la densité a-posteriori (sans prendre en compte de prior) et le prior.

Nous avons proposé une rapide étude de cas, où la méthodologie est appliquée à un modèle de rétro-diffusion du manteau neigeux. Remarquons que cet exemple est avant tout illustratif : en effet, la hauteur

et le nombre des couches de neige varie entre les points de mesures, ce qui implique que la fonctionnelle à inverser varie, et donc que l'apprentissage est à répéter pour chaque observation. L'avantage en terme de temps de calcul de la méthode n'est donc pas exploitable.

Nous nous sommes concentrés ici sur un prior gaussien et un schéma de prédiction par la moyenne de la loi a-posteriori, mais on pourrait envisager :

- dans le cas où mode et moyenne sont distincts, d'étudier l'intérêt des schémas de prédictions par les centroïdes,
- de considérer un cas où une contrainte physique plus complexe est nécessaire, en la modélisant par un mélange gaussien,
- de faire varier le niveau de covariance sur les observations et la loi a-priori pour étudier son impact sur le résultat de l'assimilation (ce qui est facilité par la rapidité d'une prédiction).

3.4 Conclusion

Nous avons étudié dans ce chapitre plusieurs problématiques liées au choix du modèle physique et statistique déterminant le problème inverse étudié. Nous avons proposé un algorithme permettant d'estimer le niveau de bruit lié au modèle, dans le cas où on dispose d'observations mesurées avec une faible incertitude. En l'absence de toute information, cette méthode pourrait aussi être utilisée pour estimer leur niveau d'incertitude moyen.

Nous avons ensuite abordé la question de l'influence des géométries de mesures dans l'inversion du modèle de Hapke. Comme complément à l'analyse de sensibilité des paramètres d'entrée, notre approche évalue la pertinence d'un ensemble de géométries sur la détermination des paramètres physiques. Cette étude pourrait permettre de choisir une configuration de géométries optimale pour l'inversion du modèle, à condition qu'elles soient compatibles avec les conditions expérimentales.

Finalement, nous avons abordé la question de l'ajout d'information a-priori. Nous avons montré que le modèle GLLiM peut être adapté pour naturellement prendre en compte un prior gaussien (ou un mélange gaussien) : une formule close pour la loi a-posteriori permet de conserver l'efficacité de l'approche d'apprentissage. Nous avons illustré notre approche sur un problème d'assimilation de donnée, destiné à étudier la composition du manteau neigeux via un modèle de rétro-diffusion électro-magnétique.

Les idées proposées ont mis en avant la polyvalence du modèle GLLiM, à travers l'adaptation à un bruit variable, l'accès direct à la variance de la loi a-posteriori et l'adaptation directe à un prior gaussien. Ces diverses propriétés montrent la pertinence de ce modèle dans le cadre général des problèmes d'inversion bayésienne, notamment en comparaison avec les méthodes d'apprentissage profond, qui restent peu interprétables.

Conclusion et perspectives

Nous avons développé dans cette thèse une approche apte à résoudre un problème d'inversion bayésienne pour une collection massive d'observations, et nous l'avons appliqué sur un modèle de transfert radiatif utilisé dans un contexte de planétologie.

Notre approche repose sur le modèle de regression GLLiM (Gaussian Locally-Linear Mapping), présenté dans la section 1.1. Après une étape d'apprentissage, ce modèle permet d'obtenir efficacement, pour chaque observation à inverser, une approximation de la loi a-posteriori sous la forme d'un modèle de mélange. Nous avons montré que les paramètres du modèle GLLiM peuvent être modifiés pour prendre un compte un niveau de bruit variable sur les observations, sans avoir à refaire l'étape d'apprentissage (section 1.1.4). De plus, là où la loi a-posteriori était généralement résumée par sa moyenne pour obtenir un estimateur ponctuel, le premier chapitre a développé deux contributions provenant de l'exploitation du mélange complet. Dans la partie 1.2, nous avons proposé d'appliquer un algorithme de fusion sur le mélange afin de pouvoir détecter et caractériser d'éventuelles solutions multiples. Cette approche permet un compromis entre une analyse détaillée de la loi a-posteriori (informative mais difficilement applicable sur un grand jeu d'observations) et un estimateur simple mais pouvant ne pas être pertinent dans les cas multi-modaux (comme l'estimateur de la moyenne). La partie 1.3 propose d'utiliser des techniques d'échantillonnage préférentiel pour améliorer la qualité de la prédiction à partir de la loi approchée GLLiM. L'idée est de trouver un compromis entre les méthodes MCMC, qui fournissent une prédiction très précise mais au prix d'un temps de calcul élevé et la prédiction avec le modèle GLLiM seul, qui est (quasi) instantanée, mais qui est parfois un peu trop imprécise. Pour cela, nous remarquons que la loi a-posteriori fournie par le modèle GLLiM est un bon candidat pour être une loi d'importance : elle est une bonne première approximation de la vraie loi et elle est facilement échantillonnable. Nous avons montré que la combinaison des deux approches permet d'obtenir un compromis très attractif entre précision et temps de calcul. Nous avons aussi montré que la prise en compte de solutions multiples peut encore s'appliquer à ces méthodes d'échantillonnage préférentiel.

Le deuxième chapitre était consacré à l'application principale de ce travail : l'inversion du modèle photométrique de Hapke, utilisé par les planétologues pour étudier des mesures de réflectance de différents échantillons de corps célestes. Après avoir décrit le modèle physique (partie 2.1), nous avons commencé par valider l'approche proposée sur des données synthétiques. Pour cela, nous nous sommes comparés à quelques méthodes MCMC de la littérature en terme de précision et de temps de calcul (partie 2.2) et nous avons montré que l'approche est en effet compétitive. Nous l'avons ensuite appliquée à plusieurs jeux d'observations : des mesures de laboratoires (sections 2.3.1, 2.3.1 et 2.3.1) et des observations satellitaires de la planète Mars (section 2.3.2). Les résultats obtenus présentent généralement une régularité satisfaisante (spectrale pour les mesures de laboratoire, spatiale pour les observations satellitaires), et montrent que la reconstruction est fidèle à l'observation. L'utilisation des estimateurs des centroïdes (et de leur erreur de reconstruction) a permis de mettre en évidence plusieurs types de lois a-posteriori : uni-modales, multi-modales avec des solutions distinctes ou présentant une bande continue de solutions possibles. La proposition d'un schéma de prédiction alternatif à la moyenne (obtenu en minimisant l'erreur de reconstruction entre la prédiction par la moyenne et les centroïdes) permet un choix en fonction de l'application visée, suivant que l'on s'intéresse uniquement à reconstruire la réflectance ou que l'on cherche à interpréter physiquement les valeurs des paramètres estimés. L'obtention de cartes entières de paramètres physiques à de multiples longueurs d'onde est à notre connaissance une première et devrait permettre une analyse approfondie de l'évolution géologique mar-

tienne. Nous avons aussi rencontré des comportements difficilement explicables. Par exemple, le paramètre $\bar{\theta}$ a régulièrement été le plus difficile à contraindre, ce qui semble aller à l’encontre de l’analyse de sensibilité du modèle de Hapke ([Labarre, 2017]). De plus, la prédiction par les centroïdes (et par la meilleure erreur de reconstruction) a parfois montré une irrégularité surprenante, en opposition avec l’intuition physique.

Au cours de ces travaux, nous avons rencontré plusieurs problématiques liées à la thématique des problèmes inverses, que nous avons regroupées dans le troisième chapitre. La partie 3.1 s’intéresse à l’estimation de l’incertitude du modèle physique. En supposant que l’on dispose d’une série d’observations de très bonne qualité, nous avons proposé un algorithme permettant d’évaluer les erreurs systématiques du modèle, sous forme d’un bruit moyen. En l’absence de données d’expert, cette approche pourrait inversement être utilisée pour estimer l’incertitude moyenne d’un jeu d’observations, dans le cas d’un modèle à haut degré de perfection. Nous avons appliqué notre approche au modèle de Hapke et mis en lumière certaines erreurs systématiques de modélisation, notamment aux grands angles d’incidence et d’émergence. Inspirés par l’analyse de sensibilité du modèle de Hapke, nous avons cherché dans la partie 3.2 à évaluer la pertinence d’un ensemble de géométries de mesures à contraindre les paramètres physique du modèle de Hapke. Nous avons pour cela proposé un indicateur basé sur la variance de la loi a-posteriori, et proposé de le calculer efficacement à l’aide du modèle GLLiM. Les simulations sur le modèle de Hapke ont montré des différences importantes parmi les jeux de géométries étudiées. Ceci nous a conduit à proposer trois jeux de géométries pour la mesure des réflectances en laboratoire alliant économie en temps d’acquisition et précision de l’inversion. Finalement, nous avons étendu dans la partie 3.3 notre approche à un a-priori non uniforme sur les paramètres physiques. Cela permet d’utiliser cette méthode par exemple pour résoudre des problèmes d’assimilation de données, comme celui qui apparaît dans l’étude du manteau neigeux considérée dans la section 3.3.3. Nous avons montré que l’approche par apprentissage pouvait être utilisée même quand le prior varie avec l’observation, ce qui est un avantage décisif dans un contexte de données massives.

La méthodologie statistique proposée ici a montré que les approches d’apprentissage et d’échantillonnage pouvaient être combinées pour obtenir un rapport attractif entre précision et efficacité. Ce rapport peut sûrement être encore amélioré, notamment en travaillant sur deux axes. Tout d’abord, la qualité d’estimation du modèle directe par le modèle GLLiM peut sûrement être augmentée. Une première idée serait de s’affranchir du choix du nombre de composants du mélange se plaçant dans un cadre Bayésien non paramétrique. De plus, nous avons ici utilisé l’algorithme EM, qui est une approche générique en statistiques, et qui permet d’estimer automatiquement les paramètres du modèle GLLiM. Cela dit, cette technique n’exploite pas entièrement la donnée du modèle direct. Quand ce dernier est explicite (comme c’est le cas avec le modèle de Hapke), le résumer à un jeu d’apprentissage paraît assez grossier. Suivant l’intuition présentée dans la section 1.1.2, il semble possible de contraindre les paramètres du modèle GLLiM en utilisant l’information portée par la fonctionnelle F , notamment par sa différentielle. On peut alors espérer que ce choix éduqué fournisse une meilleure approximation qu’un algorithme générique. Dans tous les cas, il serait intéressant d’étudier de manière théorique l’erreur d’approximation du modèle GLLiM : par exemple, l’annexe F propose un résultat de densité. Insistons sur le fait que cette étude ne semble possible que quand le modèle statistique est déterminé par une fonctionnelle régulière, ce qui est un cas particulier de l’approche par regression avec le modèle GLLiM. Ensuite, il semble possible d’exploiter le modèle GLLiM avec d’autres approches que celles retenues ici. D’autres méthodes d’échantillonnages pourraient être envisagées. En fait, nous avons proposé ces techniques comme un moyen d’améliorer la prédiction initiale obtenue par GLLiM, et il semble possible d’arriver à ce résultat par d’autres approches. Par exemple, une idée rencontrée pendant la thèse (mais non poursuivie) serait de procéder à un deuxième apprentissage local autour des zones de fortes densités de la loi a-posteriori. Un des problèmes de cette approche est qu’elle nécessite un apprentissage complet. Idéalement, on aimerait profiter des paramètres du modèle GLLiM déjà appris, et, pour chaque observation, les raffiner, sans repartir de zéro.

Un autre axe de recherche pourrait être motivé par l’utilisation du modèle GLLiM avec une famille de fonctionnelles. L’efficacité en terme de temps de calcul de la méthode vient en effet de l’hypothèse que l’on considère une fonctionnelle F fixée une fois pour toute. Si l’on souhaite inverser une famille de fonctionnelle $F_\lambda : \mathbf{x} \mapsto \mathbf{y}$, où le paramètre λ est donné avec l’observation (mais n’est pas constant), peut-on étendre

l'approche proposée ici sans avoir à effectuer l'entraînement pour chaque fonctionnelle F_λ ? Une piste serait d'élargir la fonctionnelle et de considérer $G : (\lambda, \mathbf{x}) \mapsto F_\lambda(\mathbf{y})$.

Concernant l'application au modèle de Hapke, les perspectives sont nombreuses. Nous avons dans ce travail essentiellement adopté la position du statisticien, sans chercher à analyser en profondeur la signification physique des résultats obtenus. Notamment, l'analyse des cartes de la surface martienne, rendue possible par l'efficacité de la méthode proposée, est un travail à part entière qui doit être continué. D'autre part, il serait intéressant d'examiner l'expression analytique du modèle de Hapke à la lumière d'une éventuelle erreur systématique dévoilé par nos résultats. Peut-on confirmer une déficience de la modélisation pour certaines géométries? Ou s'agit-il seulement d'un artefact non significatif? Enfin, l'analyse de l'influence des géométries de mesures semble une piste intéressante. L'indicateur que nous avons proposé n'est qu'à moitié convaincant : on pourrait pour commencer chercher à s'affranchir du biais artificiel induit par la dimension D . De manière plus général, il semble vraiment intéressant d'arriver à déterminer des géométries optimales de mesures : bien qu'un instrument embarqué sur un satellite soit soumis à de fortes contraintes, il semble tout de même possible de disposer d'une certaine marge de manoeuvre, et de pouvoir ainsi exploiter la forme paramétrique du modèle de Hapke.

La dernière section de ce manuscrit conduit naturellement à deux champs d'études. Une première consiste à régulariser l'inversion du modèle de Hapke à l'aide d'une information a-priori. Une idée évoquée pourrait être d'utiliser séquentiellement les résultats d'inversion d'un spectre pour lisser le point suivant. Un prior modélisant la relation empirique du hockey-stick pourrait aussi être considéré. D'autre part, la prise en compte d'un prior gaussien permet d'utiliser le modèle GLLiM dans des problèmes d'assimilation de données. Il s'agit là d'un vaste champ d'exploration : l'approche serait surtout pertinente en présence de données massives.

Annexe A

Liste des publications

Les travaux effectués pendant cette thèse ont donné lieu aux publications suivantes :

- B. Kugler, F. Forbes, S. Douté, M. Gay. [Efficient Bayesian data assimilation via inverse regression](#). *52èmes Journées de Statistique de la Société Française de Statistique (2021), Virtual meeting*. (cf [3.3](#))
- B. Kugler, F. Forbes, S. Douté. [Fast Bayesian Inversion for high dimensional inverse problems](#). *Pré-publication*. (cf [1](#) et [2.3.1](#))
- B. Kugler, F. Forbes, S. Douté. [An efficient Bayesian method for inverting physical models on massive planetary data](#). *In Europlanet Science Congress 2020, Virtual meeting*. (cf [2.3.2](#))
- S. Potin, S. Douté, B. Kugler, F. Forbes, P. Beck, B. Schmitt. [Simulated phase curves of Vesta based on laboratory bidirectional reflectance spectroscopy](#). *In Europlanet Science Congress 2020, Virtual Meeting*. (cf [2.3.1](#))
- B. Kugler, F. Forbes, S. Douté. [First order Sobol indices for physical models via inverse regression](#). *In 52èmes Journées de Statistique de la Société Française de Statistique (SFdS) 2020, Nice, France*. (cf [3.2](#))
- B. Kugler, F. Forbes, S. Douté. [Massive hyperspectral images analysis by inverse regression of physical models](#). *StatLearn 2019 Workshop on Challenging problems in Statistical Learning, Apr 2019, Grenoble, France*. (cf [1.1](#))

Annexe B

Compléments mathématiques

B.1 Formule de Woodbury

La formule de Woodbury permet de calculer l'inverser de la somme de deux matrices.

Proposition B.1.1. *Si A et B sont deux matrices inversibles de taille $L \times L$ et $D \times D$, si U et V sont deux matrices de taille $L \times D$ et $D \times L$, et si $B^{-1} + VA^{-1}U$ est inversible, alors*

$$(A + UBV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(B^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}$$

On remarque que si A et B sont symétriques définies positives et si $U = {}^tV$, alors $A + UBV$ et $B^{-1} + VA^{-1}U$ sont inversibles et la formule de Woodbury s'applique.

B.2 Produit de densités gaussiennes

Proposition B.2.1. *Le produit de deux densités gaussiennes (en dimension L) est proportionnel à une densité gaussienne :*

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) \mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\Gamma}) = \alpha \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{m}, \mathbf{S})$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= (\boldsymbol{\Sigma}^{-1} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1})^{-1} \\ \mathbf{m} &= \mathbf{S} (\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \boldsymbol{\nu}) \\ \mathbf{B} &= (\boldsymbol{\Gamma} + \boldsymbol{\Sigma})^{-1} \\ \alpha &= \sqrt{\frac{|\mathbf{S}|}{(2\pi)^L |\boldsymbol{\Sigma}| |\boldsymbol{\Gamma}|}} \exp\left(-\frac{1}{2} {}^t(\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\mu}) \mathbf{B} (\boldsymbol{\nu} - \boldsymbol{\mu})\right) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}; \boldsymbol{\nu}, \mathbf{B}^{-1}) \end{aligned}$$

Annexe C

Géométries de mesure de réflectance

Les configurations de mesure des expériences étudiées dans le chapitre 2 sont décrites dans les figures ci-après. Pour un graphe polaire donné, l'angle d'incidence est fixé, le rayon donne la valeur de l'angle d'émergence, et l'angle polaire donne la valeur de l'azimut.

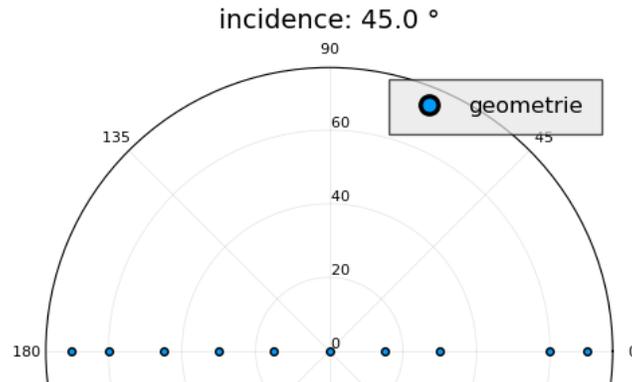


FIGURE C.1 – Géométries de mesure des échantillons de minéraux (section 2.3.1)

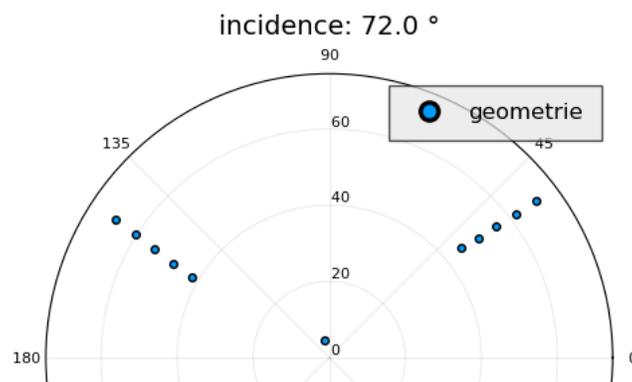


FIGURE C.2 – Géométries de mesure des observations de Mars (section 2.3.2). Les azimuts autour de 148° sont obtenus par la symétrie du plan principal à partir des azimuts expérimentaux (autour de 212°).

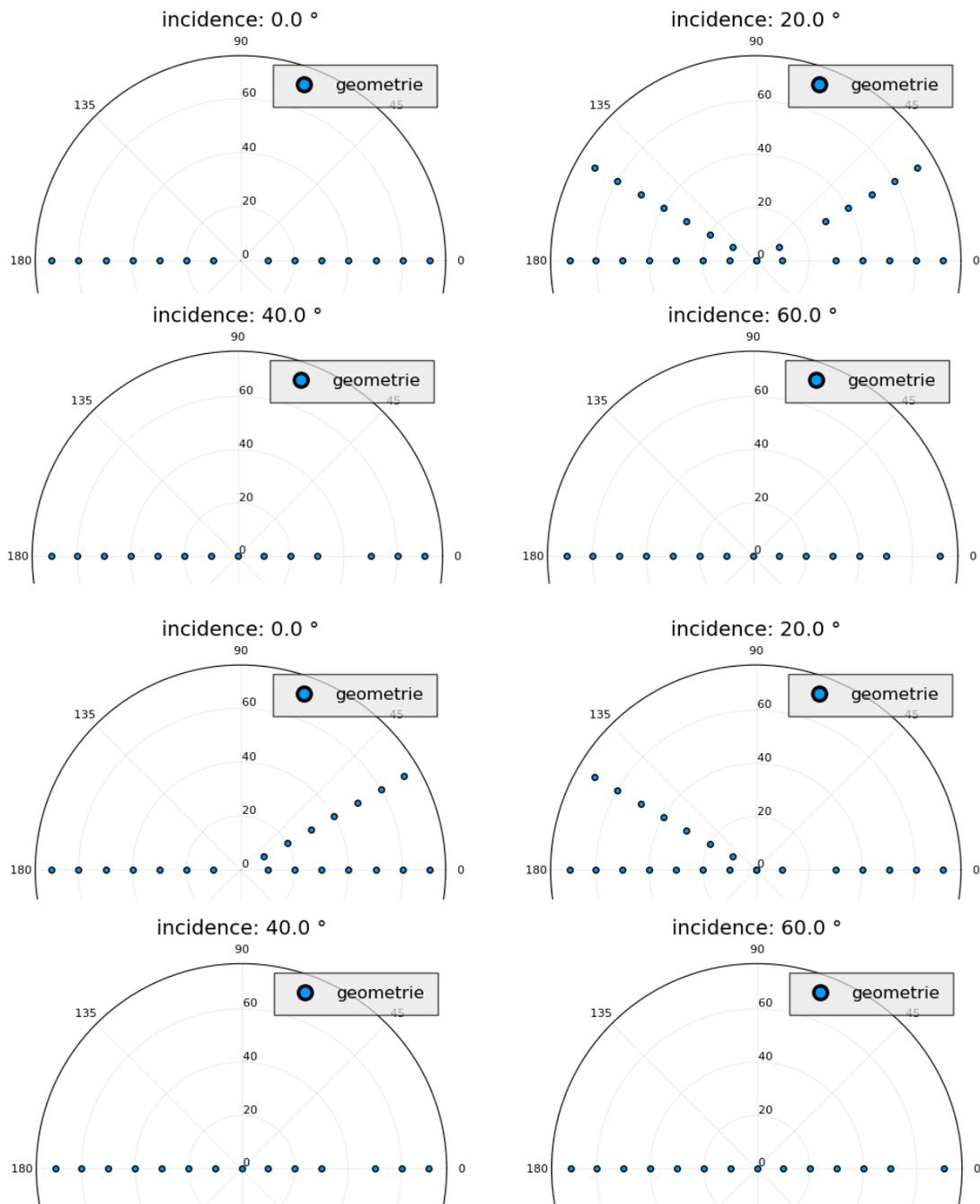


FIGURE C.3 – Géométries de mesure des échantillons de météorites (section 2.3.1) (MukundpuraBloc en haut, MukundpuraPoudre, BlackyBloc, BlackyPoudre en bas)

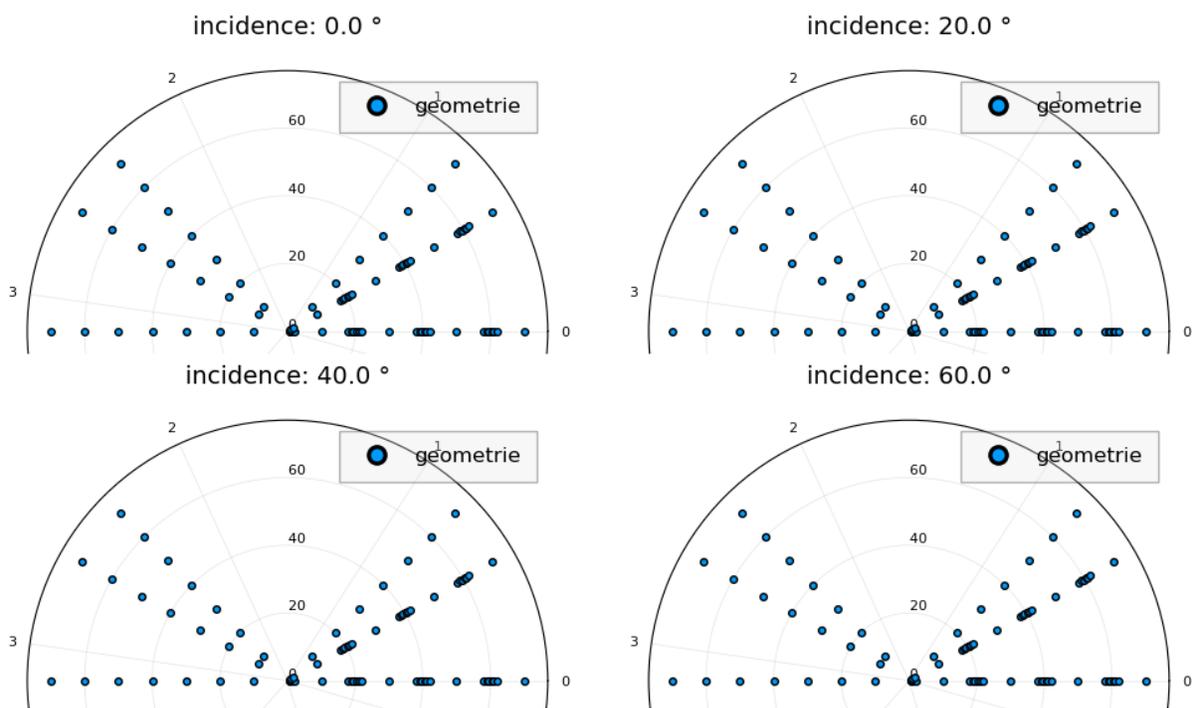


FIGURE C.4 – Géométries utilisées dans l'expérience synthétique de la section 2.2.2

Annexe D

Résultats complémentaires de l'inversion de mesures de laboratoire

D.1 Échantillons minéraux

Les figures de cette section présentent les centroïdes et les critères de variabilité obtenus par l'inversion des observations présentés dans la section 2.3.1, non inclus dans le corps principal.

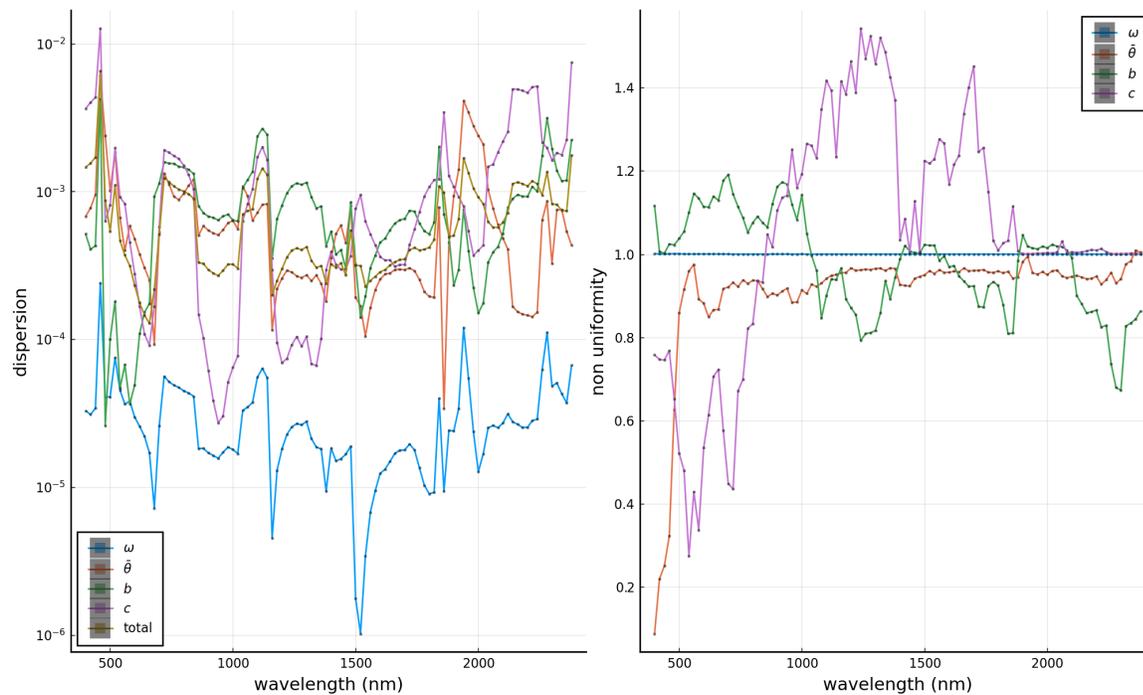


FIGURE D.1 – Inversion de la série d'observations *Nontronite*. Indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

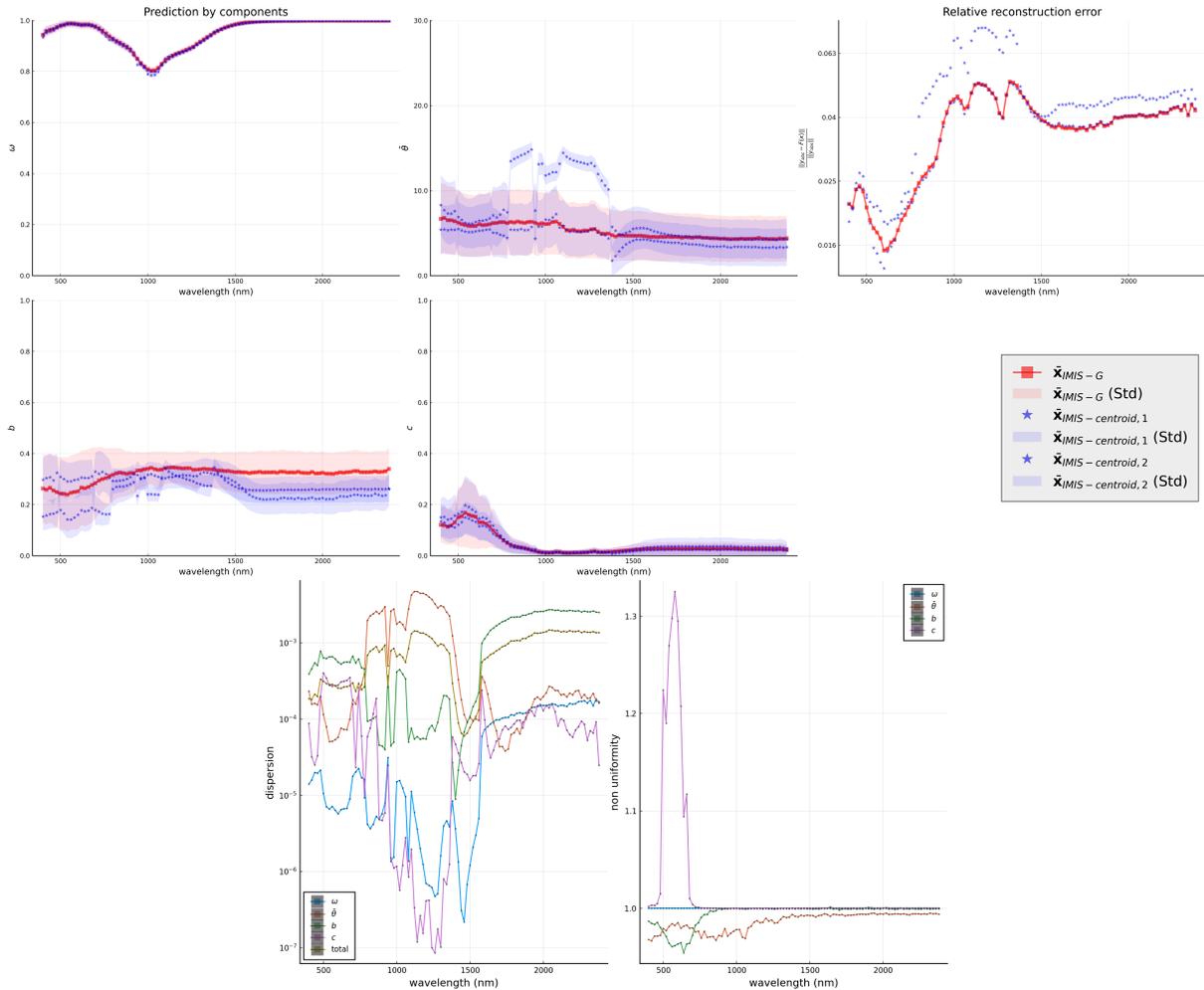


FIGURE D.2 – Inversion de la série d’observations *Olivine*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroïdes $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

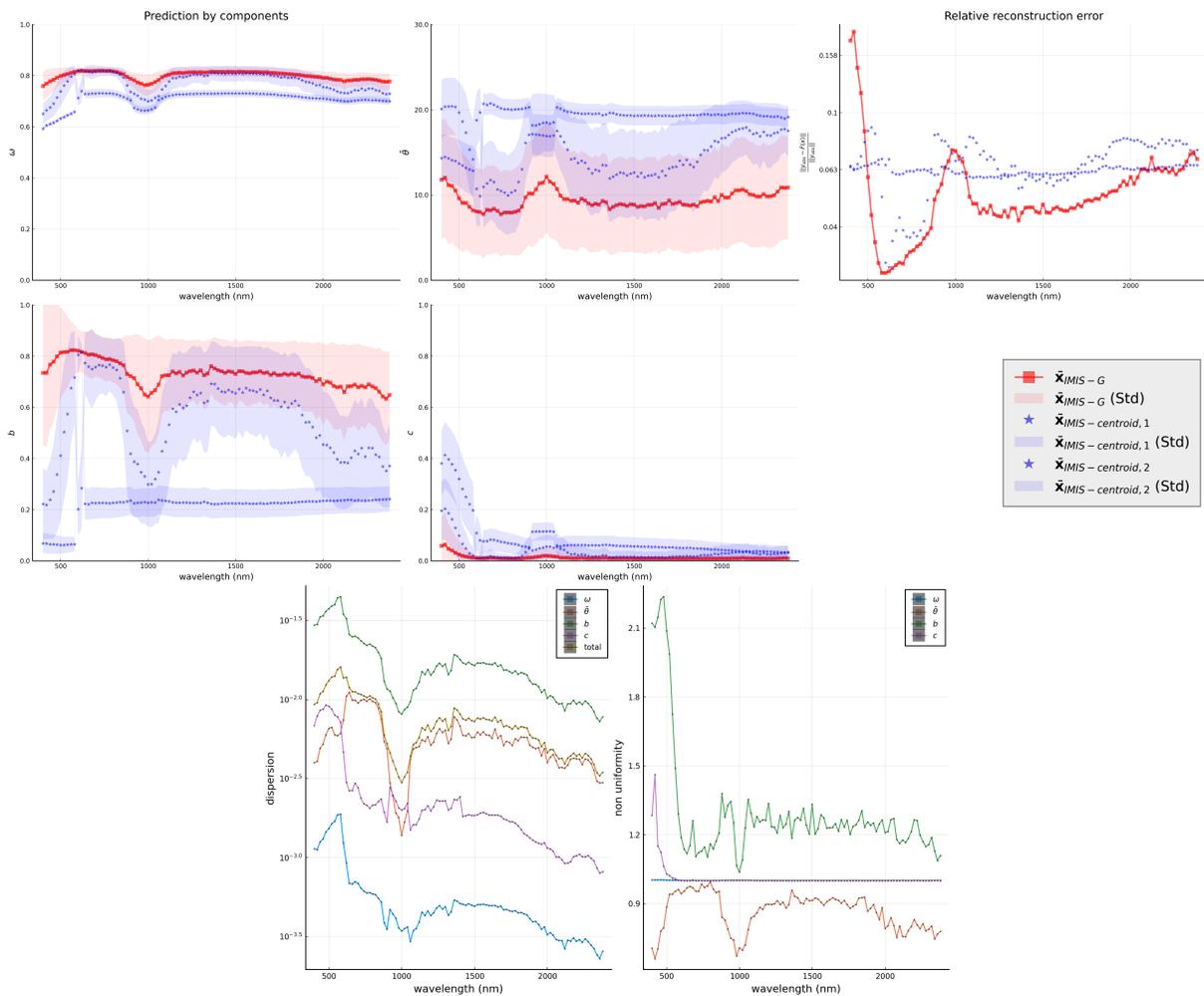


FIGURE D.3 – Inversion de la série d’observations *Basalt*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroïdes $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

D.2 Météorites

Les figures de cette section présente les centroïdes et les critères de variabilité obtenus par l'inversion des observations présentés dans la section 2.3.1.

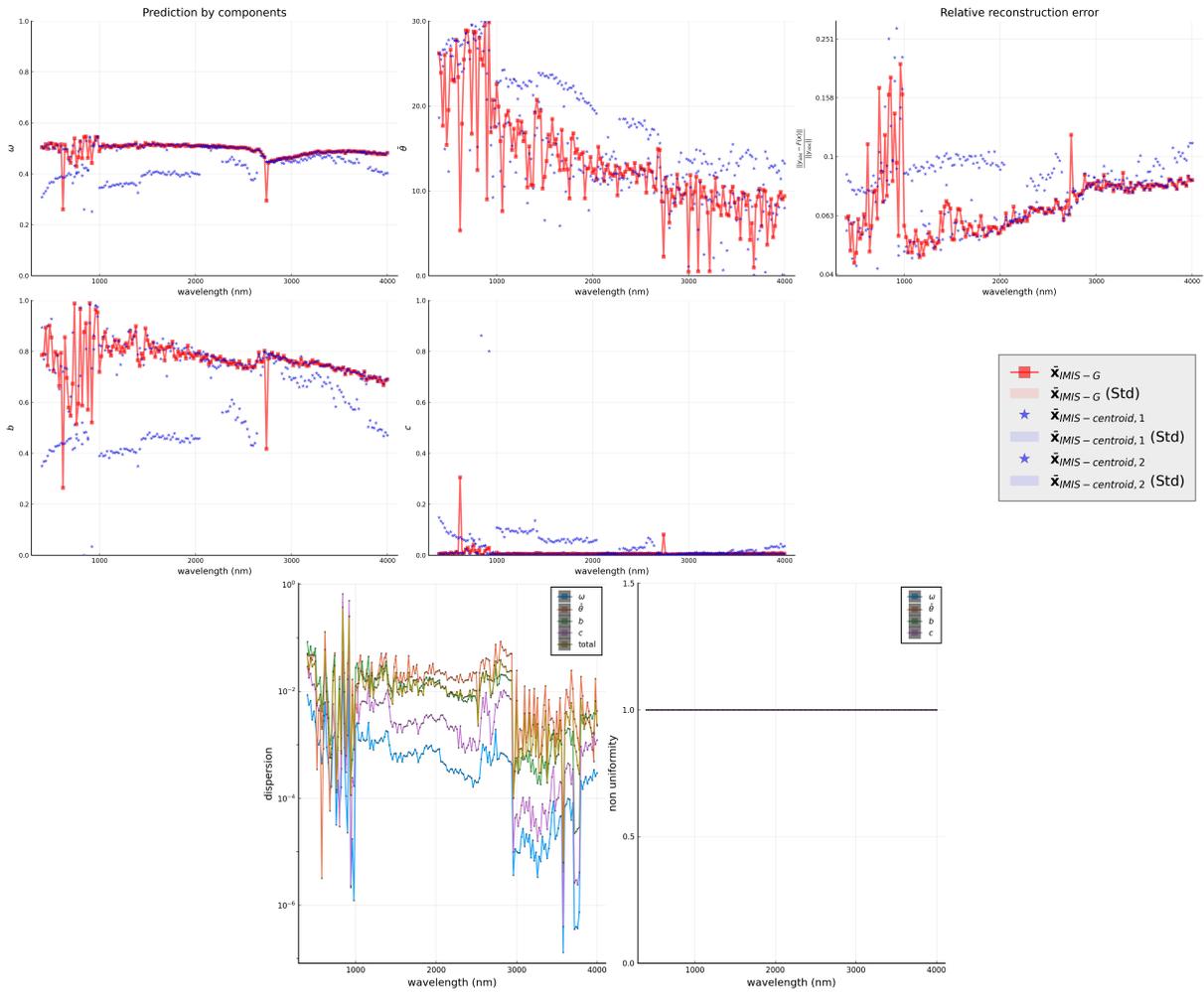


FIGURE D.4 – Inversion de la série d’observations *MukundpuraBloc*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroïdes $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

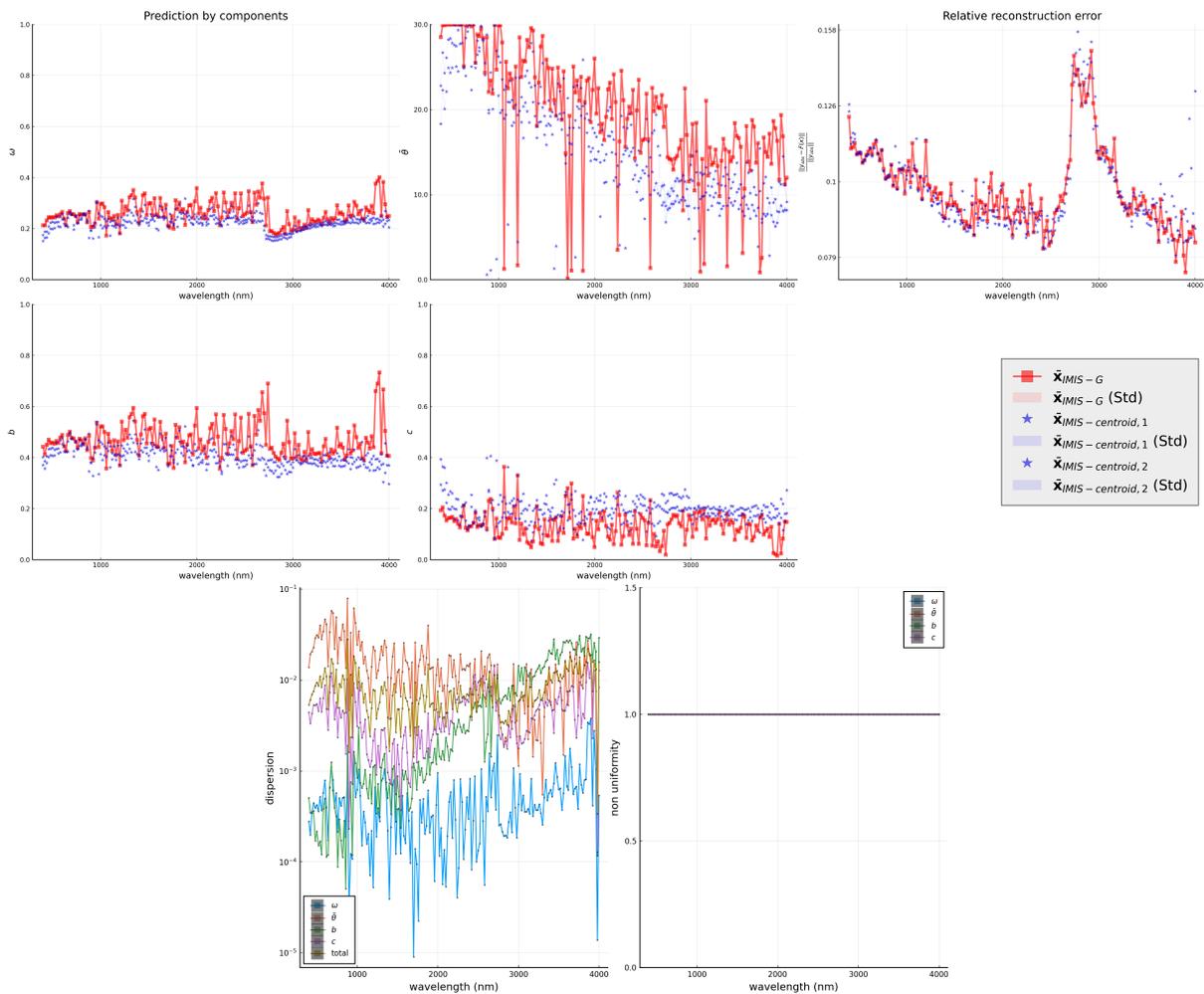


FIGURE D.5 – Inversion de la série d’observations *MukundpuraPoudre*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroïdes $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

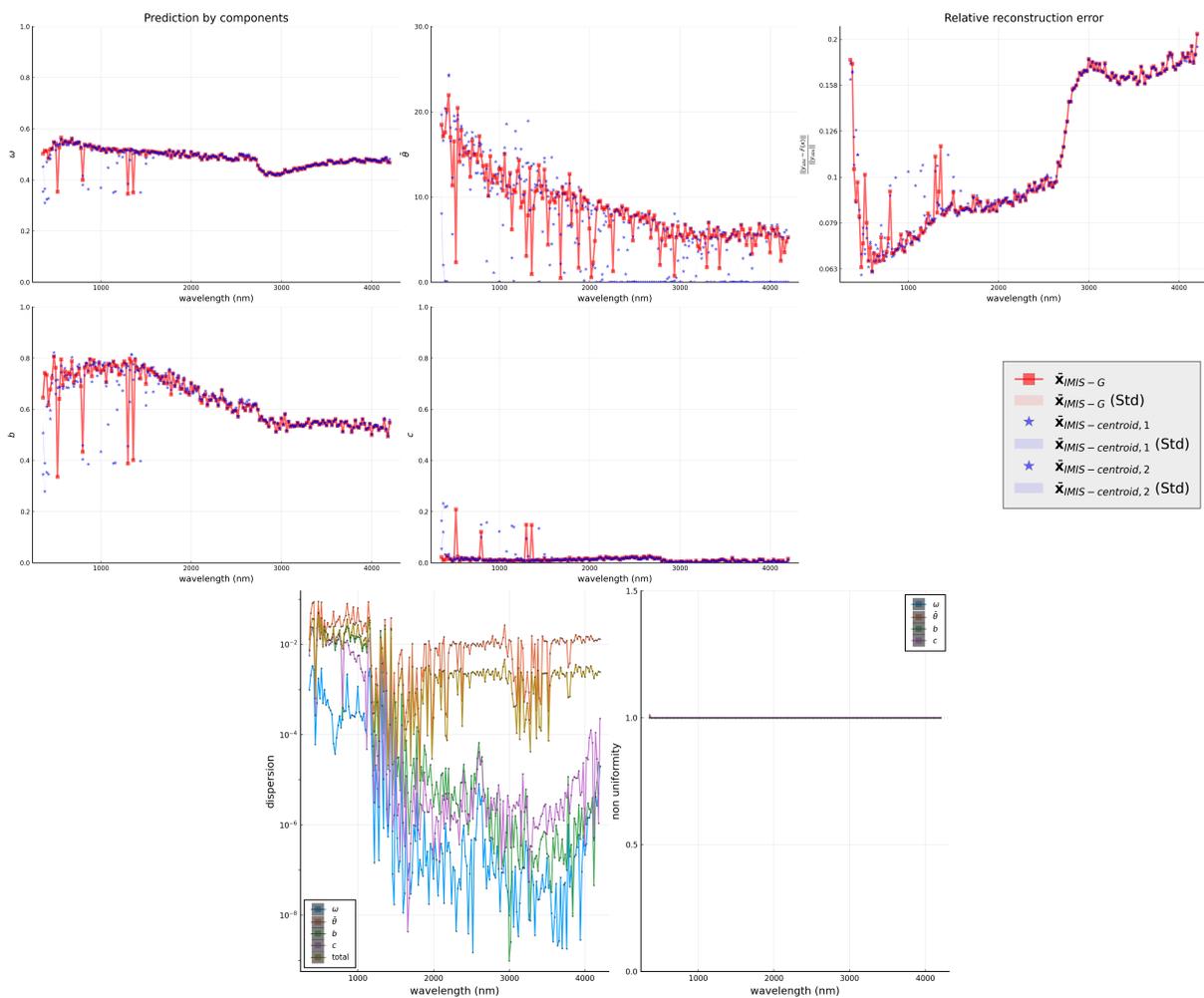


FIGURE D.6 – Inversion de la série d’observations *BlackyBloc*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroïdes $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

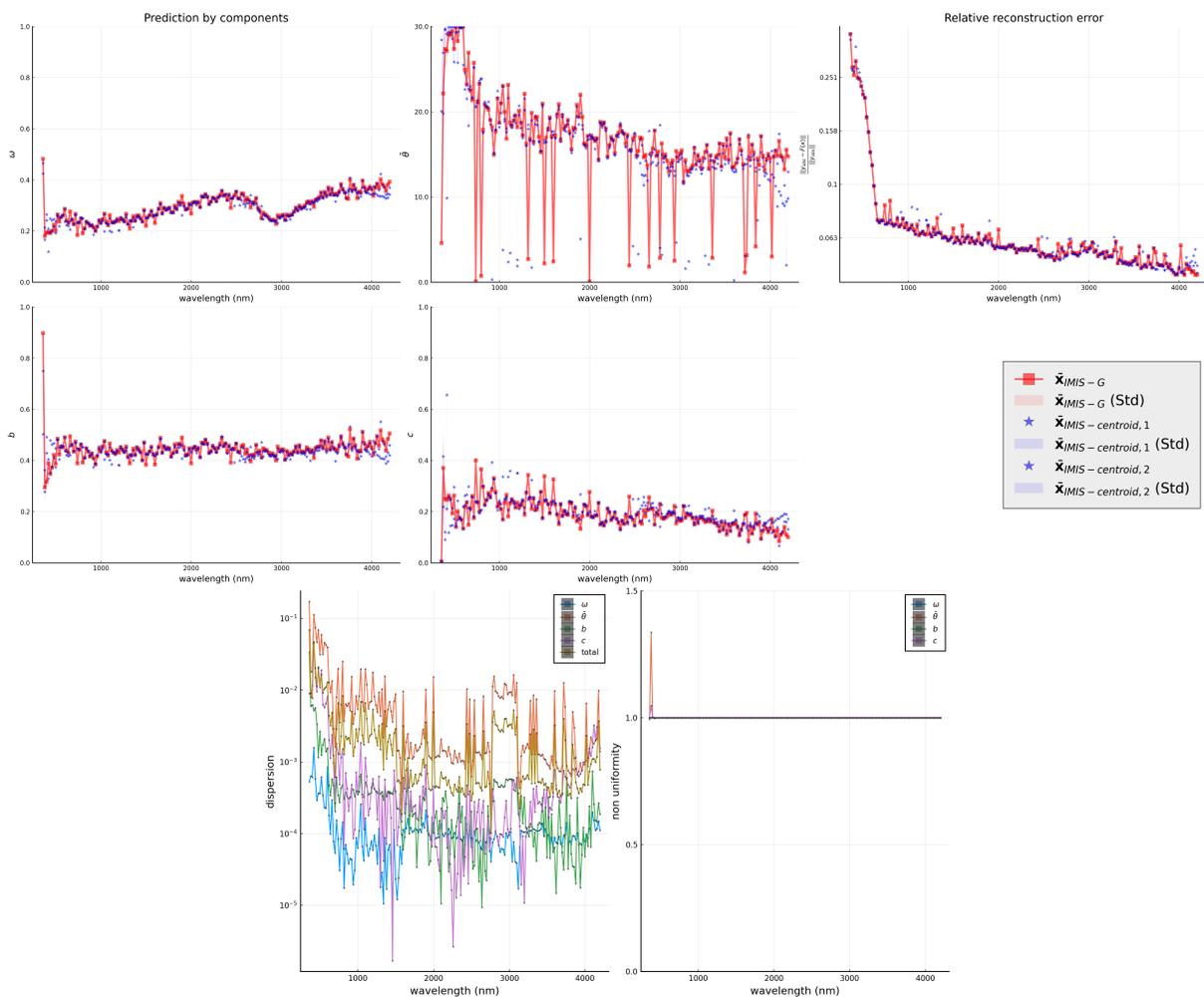


FIGURE D.7 – Inversion de la série d’observations *BlackyPoudre*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroïdes $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

D.3 Matériaux analogues à une surface planétaire

Les figures de cette section présentent les centroïdes et les critères de variabilité obtenus par l'inversion des observations présentés dans la section 2.3.1.

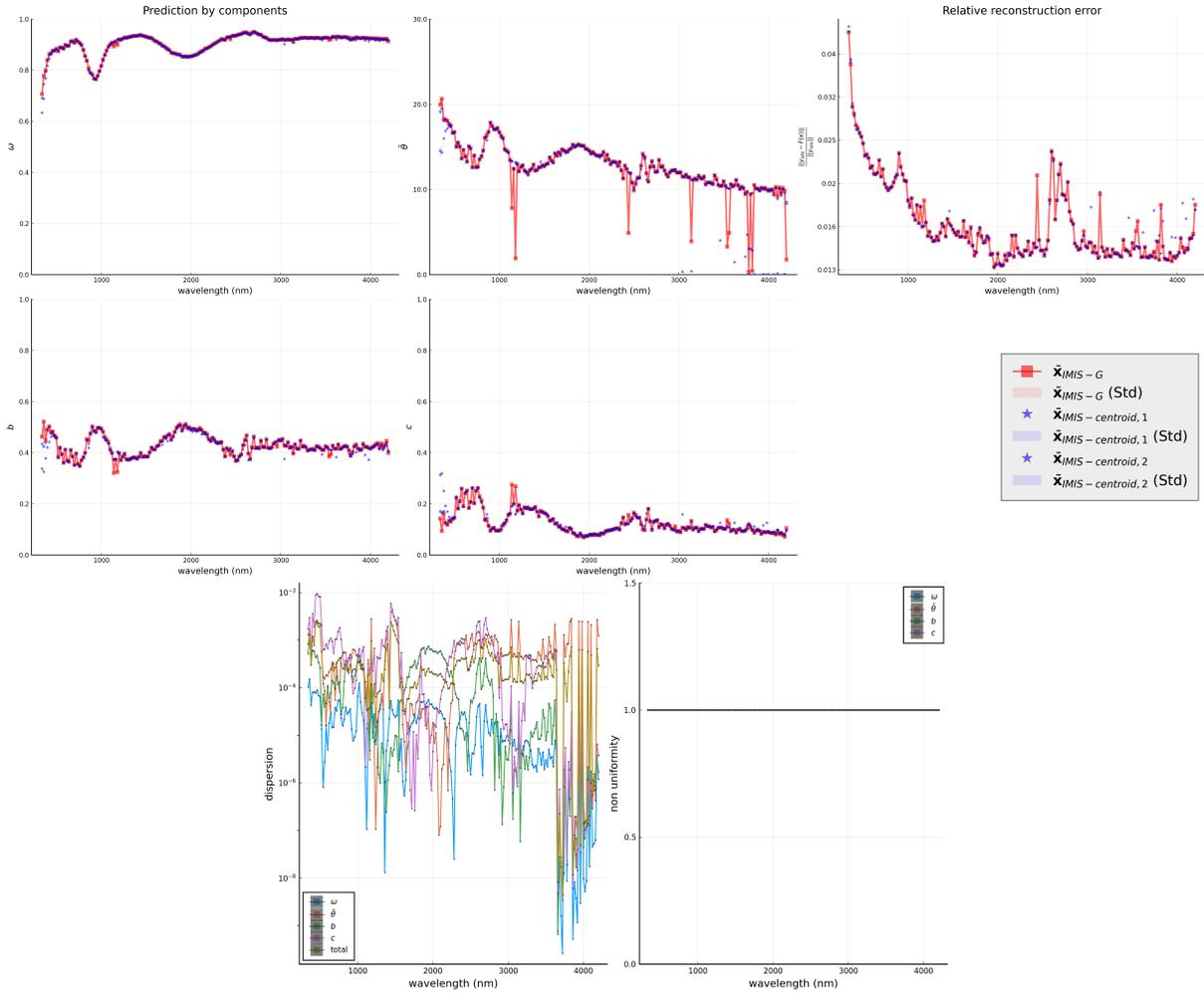


FIGURE D.8 – Inversion de la série d’observations *Howardite*. En haut : \bar{x}_{IMIS-G} est en rouge, les centroïdes $\bar{x}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{x}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

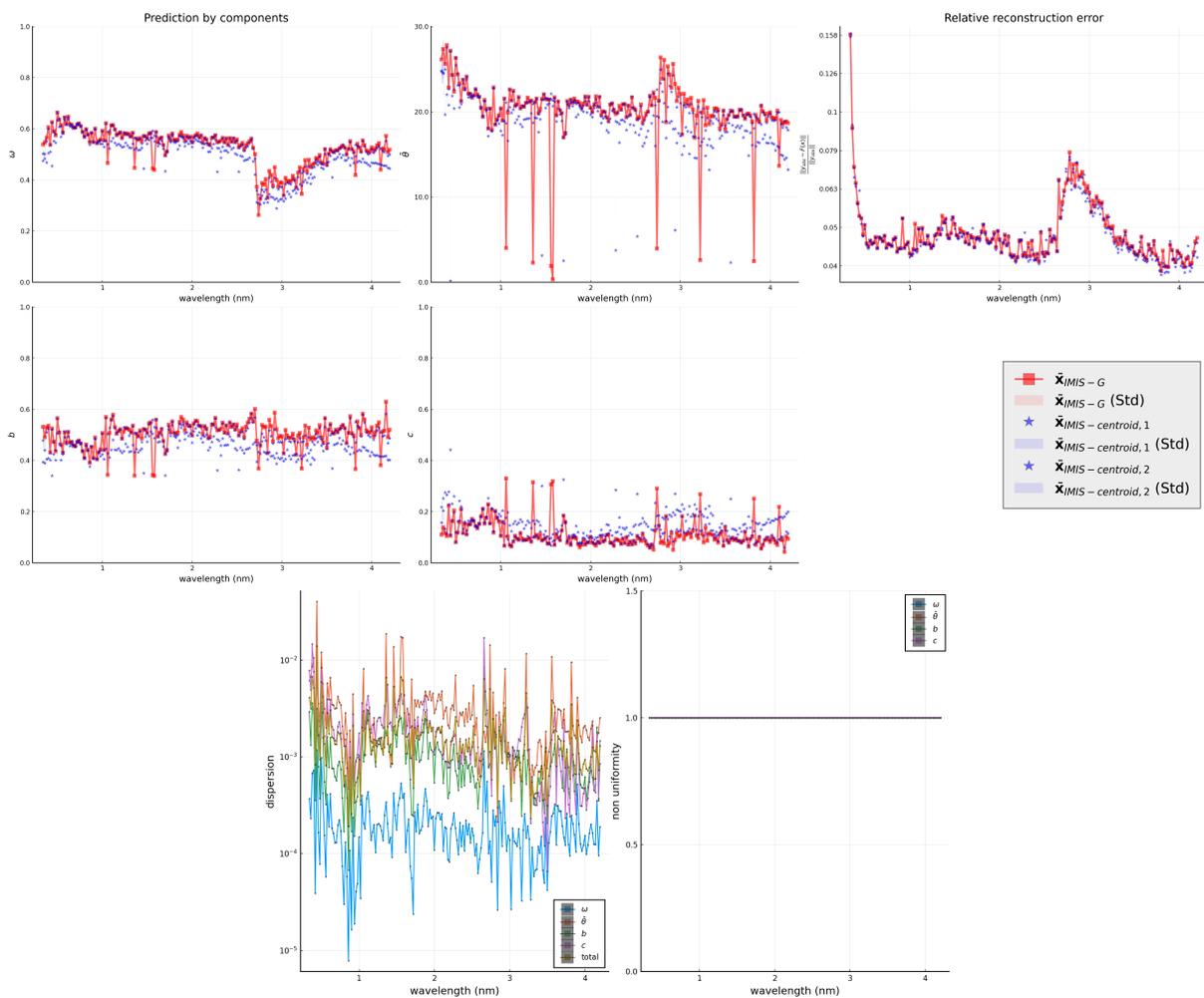


FIGURE D.9 – Inversion de la série d’observations *Ceres*. En haut : $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-G}$ est en rouge, les centroïdes $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,1}$ et $\bar{\mathbf{x}}_{IMIS-centroid,2}$ en bleu. En bas : indice de dispersion (à gauche), critère de non-uniformité (à droite).

Annexe E

Résultats complémentaires de l'assimilation de profils du manteau neigeux

La figure ci-dessous présente les 12 profils supplémentaires assimilés dans la section 3.3.3.

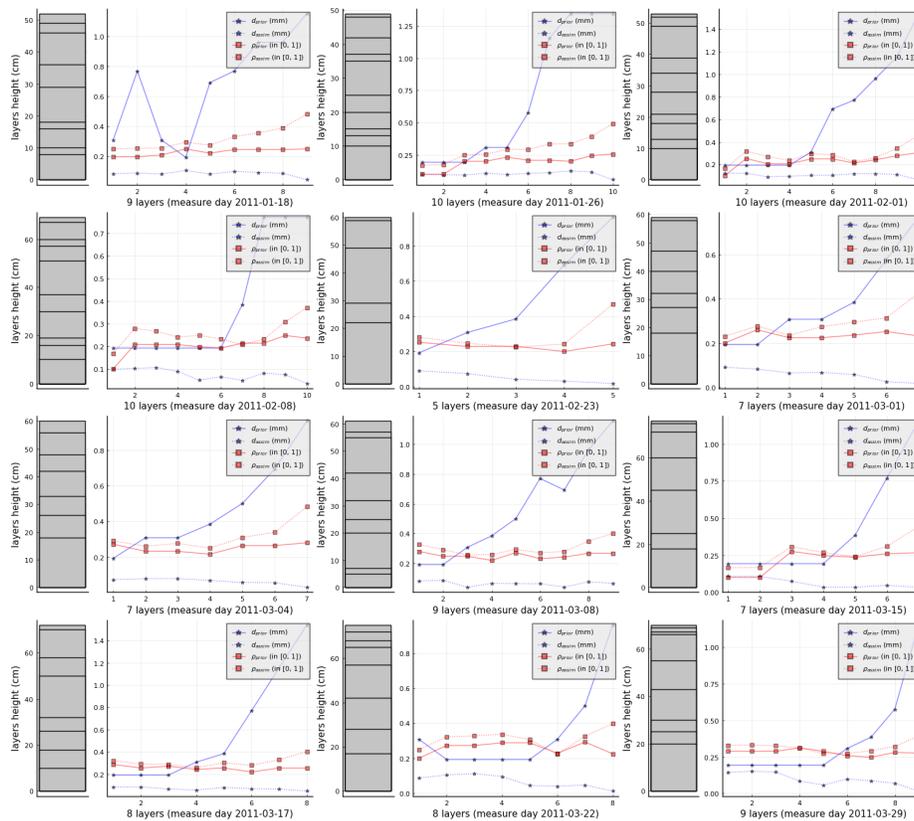


FIGURE E.1 – Assimilation de profils de manteau neigeux (diamètre et densité). Pour chaque profil, les couches sont à gauche, les valeurs des paramètres à droite. Les couches sont numérotés de haut en bas (1 pour la couche de surface).

Annexe F

Un résultat de convergence pour le modèle GLLiM

Le document ci-dessous s'intéresse aux hypothèses sous lesquelles une suite de modèle GLLiM peut converger vers le modèle physique F , en un sens qui sera précisé. Les conditions retenues pourraient être exploitées pour améliorer l'apprentissage des paramètres GLLiM, soit en ajoutant des contraintes dans l'algorithme EM, soit en mettant au point un algorithme alternatif.

Notations :

- $L \in \mathbb{N}^*$, $\mathcal{P} := [0, 1]^L$
- $\|\cdot\|$ is the standard Euclidean norm for vectors or the operator norm for matrices.
- $B(\mathbf{x}, \alpha)$ is the open ball centered on \mathbf{x} with radius α
- $F : \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R}^D$ a differentiable function
- Given a sequence of points $(\mathbf{c}_k)_{k \in \mathbb{N}} \in \mathcal{P}$,

$$m_K := \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{P}} \min_{k=1 \dots K} \|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\|$$

- $\mathbf{\Gamma}_k$ is a positive definite symmetric matrix (with size L), with spectra $\text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k$ and condition number

$$\text{Cond}(\mathbf{\Gamma}_k) := \frac{\max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k}{\min \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k}$$

- $\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k)$ is the Gaussian multivariate density (with mean \mathbf{c}_k and covariance $\mathbf{\Gamma}_k$)
- $|A|$ is the determinant of the square matrix A
- For a Gaussian mixture with weights π_k , means \mathbf{c}_k and covariances $\mathbf{\Gamma}_k$, we note

$$\tilde{\alpha}_k(\mathbf{x}) := \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k) \quad \text{and} \quad \alpha_k(\mathbf{x}) := \frac{\tilde{\alpha}_k(\mathbf{x})}{\sum_{j=1}^K \tilde{\alpha}_j(\mathbf{x})}$$

We use α^* and $\tilde{\alpha}^*$ for weights π_k^* , means \mathbf{c}_k^* and covariances $\mathbf{\Gamma}_k^*$.

- We note $\mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}]_{G, \boldsymbol{\theta}}$ the conditional expectation of Y knowing $X = \mathbf{x}$ under a GLLiM model with parameters $\boldsymbol{\theta}$, and $\mathbb{E}[X|Y = \mathbf{y}]_{G, \boldsymbol{\theta}}$ the conditional expectation of X knowing $Y = \mathbf{y}$.

Definition 1. Let \mathcal{G} (for Gaussian) the set of sequences $(u_K)_{K \in \mathbb{N}}$ such that $u_K \xrightarrow{K \rightarrow \infty} +\infty$ and

$$\forall \alpha > 0, K u_K^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 u_K\right) \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0 \quad (1)$$

For instance, $u_K := K$ belongs to \mathcal{G} , but $u_K := \ln(K)$ does not.

Lemma 1. If $(u_K) \in \mathcal{G}$ then $Cu \in \mathcal{G}$ for $C > 0$ and, if $v_K \geq u_K$, then $v \in \mathcal{G}$.

Proof. The first part is easy to check.
For the second part, we write

$$K v_K^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 v_K\right) = K u_K^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 u_K\right) w_K$$

where

$$w_K := \left(\frac{v_K}{u_K}\right)^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 (v_K - u_K)\right) = \left(\left[\frac{v_K - u_K}{u_K} + 1\right] \exp\left(-\frac{\alpha^2}{L} (v_K - u_K)\right)\right)^{\frac{L}{2}}$$

Since $x \mapsto x \exp(-\beta x)$ is bounded for $\beta > 0$ and $x \geq 0$ and $v_K - u_K \geq 0$, we have that w_K is bounded, which means that $K v_K^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 v_K\right) \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0$. \square

Lemma 2. *If $(u) \in \mathcal{G}$ and $(v) \in \mathcal{G}$, then $\min(u, v) \in \mathcal{G}$ and*

$$\frac{1}{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}} \in \mathcal{G}$$

Proof. We have that

$$K(\min(u_K, v_K))^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 \min(u_K, v_K)\right) = \begin{cases} K u_K^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 u_K\right) =: \tilde{u}_K & \text{if } u_K \leq v_K \\ K v_K^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 v_K\right) =: \tilde{v}_K & \text{otherwise} \end{cases}$$

From the assumption, both $\tilde{u}_K \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0$ and $\tilde{v}_K \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0$ hold, which proves that $\min(u, v) \in \mathcal{G}$. Eventually, since

$$\frac{1}{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}} \geq 2\min(u, v)$$

the previous lemma shows that $\frac{1}{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}} \in \mathcal{G}$. □

Lemma 3. *For $C > 0$, the sequence defined by $u_K := \frac{1}{C}K^{\frac{1}{L}}$ is in \mathcal{G} .*

Proof. We have

$$K u_K^{\frac{L}{2}} = O(K\sqrt{K})$$

so that the standard results on growth rate applies. □

Lemma 4. *The function $x \mapsto x^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x\right)$ is eventually non increasing, starting from a value $M_\alpha := \frac{L}{\alpha^2}$.*

Lemma 5. *If $\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\| \geq \alpha$, if $\text{Cond}(\mathbf{\Gamma}_k) \leq C_o$, if $t_k = \frac{1}{\max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k}$, then there exists a constant $C' > 0$ (which depends on C_o) so that*

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k) \leq C' t_k^{\frac{L}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 t_k\right)$$

Proof. We have

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\|_{\mathbf{\Gamma}_k^{-1}}^2 \geq t_k \|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\|^2$$

Moreover,

$$|\mathbf{\Gamma}_k| \geq (\min \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k)^L \geq \left(\frac{1}{t_k C}\right)^L$$

which leads to the conclusion with $C' = \left(\frac{C_o}{2\pi}\right)^{\frac{L}{2}}$. □

Lemma 6. *If $\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\| \leq \frac{C}{\max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k^{-1}}$, if $t_k = \frac{1}{\max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k}$, then there exists a constant $C'' > 0$ (which depends on C), such that*

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}; \mathbf{c}_k, \mathbf{\Gamma}_k) \geq C'' t_k^{\frac{L}{2}}$$

Proof. We have

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\|_{\mathbf{\Gamma}_k^{-1}}^2 \leq \|\mathbf{\Gamma}_k^{-1}\|^2 \|\mathbf{x} - \mathbf{c}_k\|^2 \leq C$$

Moreover,

$$|\mathbf{\Gamma}_k| \leq (\max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_k)^L = \frac{1}{t_k^L}$$

which leads to the conclusion with $C'' = \frac{\exp(-\frac{C}{2})}{(2\pi)^{\frac{L}{2}}}$. □

We now can prove the main technical lemma, given by the following proposition.

Proposition 1 (Unity partition on \mathcal{X} space). *Let $(\mathbf{\Gamma}_{k,K})_{(k=1..K)}$ a sequence of sets of positive definite symmetric matrices (with size L). We assume their condition number is bounded : there exists $C_o > 0$ so that*

$$\forall K, \forall k \in \llbracket 1, K \rrbracket, \text{Cond}(\mathbf{\Gamma}_{k,K}) \leq C_o$$

We also assume that the matrices go to zero for large K , with a rate linked to the grid (c_k) by the following assumption. If

$$t_{k,K} := \frac{1}{\max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_{k,K}} ; t_K^- := \min_{k=1..K} t_{k,K} ; t_K^+ := \max_{k=1..K} t_{k,K}$$

we assume that there exists a constant $G > 0$ such that

$$t_K^- \in \mathcal{G} \text{ and } t_K^- \leq t_K^+ \leq \frac{G}{m_K} \quad (\text{Growth rate})$$

Then, the mixture of the Gaussian densities with equal weights $\frac{1}{K}$, means \mathbf{c}_k , and covariances $\mathbf{\Gamma}_{k,K}$ is an asymptotic partition of the unity on \mathcal{P} , in the following sense :

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{P}, \forall \alpha > 0, \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \in B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}(\mathbf{x}) \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 1 \quad (2)$$

Proof. Let $\mathbf{x} \in \mathcal{P}$ and $\alpha > 0$. Lets first notice that 2 is equivalent to

$$\frac{\sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \notin B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \tilde{\alpha}_{k,K}(\mathbf{x})}{\sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \in B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \tilde{\alpha}_{k,K}(\mathbf{x})} \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0$$

Let K_0 be such that, for $K \geq K_0$, $m_K \leq \alpha$ and $t_K^- \geq M_\alpha$ (see lemma 4). We then have, for $K \geq K_0$,

$$\sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \notin B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \tilde{\alpha}_{k,K}(\mathbf{x}) \leq \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \notin B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \frac{1}{K} C' t_{k,K}^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 t_{k,K}\right) \quad (\text{lemma 5})$$

$$\leq C' (t_K^-)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 t_K^-\right) \quad (\text{lemma 4})$$

In the other hand, since $m_K \leq \alpha$, there exists $k_0 \in \llbracket 1, K \rrbracket$ such that $\mathbf{c}_{k_0} \in B(\mathbf{x}, \alpha)$ and $\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_{k_0}\| \leq m_K$. Then,

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_{k_0}\| \leq m_K \leq \frac{G}{t_K^+} \leq \frac{G}{t_{k_0,K}} \leq G C_o \min \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_{k_0,K} = G C_o \frac{1}{\max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_{k_0,K}^{-1}}$$

We deduce from the lemma 6 that

$$\tilde{\alpha}_{k_0,K}(\mathbf{x}) \geq \frac{1}{K} C'' t_{k_0,K}^{\frac{1}{2}} \geq \frac{1}{K} C'' (t_K^+)^{\frac{1}{2}}$$

We therefore conclude that

$$\frac{\sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \notin B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \tilde{\alpha}_{k,K}(\mathbf{x})}{\sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \in B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \tilde{\alpha}_{k,K}(\mathbf{x})} \leq \frac{K C' (t_K^-)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 t_K^-\right)}{C'' (t_K^+)^{\frac{1}{2}}} \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0 \quad (\text{since } t_K^- \in \mathcal{G})$$

□

The condition given by (**Growth rate**) imposes that the grid formed by the points (\mathbf{c}_k) is "dense enough". The following proposition, coupled with the lemma 3, shows that it is indeed possible to construct such sequences.

Proposition 2 (Dense grid). *There exists a constant $C > 0$ and a sequence of points \mathbf{c}_k so that*

$$m_K \leq \frac{C}{K^{\frac{1}{L}}}$$

Proof. Letting $K_N = \frac{2^{L(N+1)} - 1}{2^L - 1}$, we build by induction on N a sequence of points \mathbf{c}_k such that

$$m_{K_{N+1}} = \frac{1}{2} m_{K_N}$$

and (m_k) is non increasing. These points are obtained by starting at the center of the square \mathcal{P} and dividing each sub-square in half, and repeating the procedure.

We have then

$$m_{K_N} = \frac{m_1}{2^N}$$

and, since by definition of K_N ,

$$2^N = \frac{((2^L - 1)K_N + 1)^{\frac{1}{L}}}{2^L}$$

we get, for $k \in \{K_N, N \in \mathbb{N}\}$,

$$m_k = \frac{2^L m_1}{((2^L - 1)k + 1)^{\frac{1}{L}}} =: u$$

Since (m_k) and (u_k) are non increasing, we can write, for $k \in \llbracket K_N + 1, K_{N+1} - 1 \rrbracket$,

$$\frac{m_k}{u_k} \leq \frac{m_{K_N}}{u_{K_{N+1}}} = \frac{m_{K_N}}{m_{K_{N+1}}} = 2$$

We thus conclude that

$$\forall k \in \mathbb{N}, m_k \leq 2 u_k \leq \frac{C}{K^{\frac{1}{L}}}$$

where $C = \frac{2^L m_1}{(2^L - 1)^{\frac{1}{L}}}$. □

The rate of convergence of m_K for this grid is actually optimal up to the multiplicative constant, as shown if the following remark.

Lemma 7. *There exists a constant V_L (which depends on L and \mathcal{P}) such that, for any sequence of points \mathbf{c}_k*

$$m_K \geq \frac{V_L}{K^{\frac{1}{L}}}$$

Proof. We notice that the definition of m_K implies that, if $K \in \mathbb{N}$,

$$\mathcal{P} \subset \bigcup_{k=1}^K \overline{B(\mathbf{c}_k, m_K)}$$

Using the sigma-additivity of the Lebesgue measure, we then get

$$\text{Vol}(\mathcal{P}) \leq K \text{Vol}(B(0, m_K)) = K \text{Vol}(B(0, 1)) m_K^L$$

which yields the conclusion, with $V_L := \left(\frac{\text{Vol}(\mathcal{P})}{\text{Vol}(B(0, 1))} \right)^{\frac{1}{L}}$. □

Proposition 3 (Convergence of the direct model). *We keep the same assumptions as in Proposition 1. Let $(\mathbf{A}_{k,K})_{k=1..K}$ be a sequence of sets of matrices with size $D \times L$, uniformly bounded by $M' > 0$:*

$$\forall K \in \mathbb{N}, \forall k \in \llbracket 1, K \rrbracket \|\mathbf{A}_{k,K}\| \leq M' \quad (3)$$

We define $(\mathbf{b}_{k,K})_{k=1..K}$ a sequence of sets of vectors in \mathbb{R}^D by the relation

$$\mathbf{b}_{k,K} := F(\mathbf{c}_k) - \mathbf{A}_{k,K} \mathbf{c}_k \quad (4)$$

We also assume that F is of class \mathcal{C}^2 on \mathcal{P} . We note $\boldsymbol{\theta}_K := \{(\frac{1}{K}), \mathbf{c}_k, \boldsymbol{\Gamma}_{k,K}, \mathbf{A}_{k,K}, \mathbf{b}_{k,K}, \boldsymbol{\Sigma}_{k,K}\}_{k=1..K}$. We then have

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{P}, \mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}]_{G, \boldsymbol{\theta}_K} \xrightarrow{K \rightarrow \infty} F(\mathbf{x})$$

More precisely, there exists R_1, \tilde{R}_1 and R_2 and two constants $C_F, C'_F > 0$ (depending on F) such that, for $\alpha > 0, \mathbf{x} \in \mathcal{P}$,

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{x} \in \mathcal{P}, \left\| \mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}]_{G, \boldsymbol{\theta}_K} - F(\mathbf{x}) \right\| &\leq R_1(\mathbf{x}, \alpha, K) + \tilde{R}_1(\mathbf{x}, \alpha, K) + R_2(\mathbf{x}, \alpha, K) \\ \forall \alpha > 0 R_1(\mathbf{x}, \alpha, K) &\leq C_F \alpha^2 \\ \forall \alpha > 0 \tilde{R}_1(\mathbf{x}, \alpha, K) &\leq (C'_F + M') \alpha \\ \forall \alpha > 0 R_2(\mathbf{x}, \alpha, K) &\xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Proof. From equations (3) and (4), we deduce that there exists a constant M'' such that

$$\forall K \in \mathbb{N}, k \in \llbracket 1, K \rrbracket, \mathbf{x} \in \mathcal{P} \|\mathbf{A}_{k,K} \mathbf{x} + \mathbf{b}_{k,K} - F(\mathbf{x})\| \leq M''$$

Then, we have

$$\begin{aligned} \left\| \mathbb{E}[Y|X = \mathbf{x}]_{G, \boldsymbol{\theta}_K} - F(\mathbf{x}) \right\| &\leq \sum_{k=1}^K \alpha_{k,K}(\mathbf{x}) \|\mathbf{A}_{k,K} \mathbf{x} + \mathbf{b}_{k,K} - F(\mathbf{x})\| \\ &\leq \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \in B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}(\mathbf{x}) (\|(\mathbf{A}_{k,K} - dF_{\mathbf{c}_k})(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k)\| + \|F(\mathbf{x}) - (F(\mathbf{c}_k) + dF_{\mathbf{c}_k}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k))\|) \\ &\quad + M'' \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \notin B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

Now, since F is of class \mathcal{C}^2 , the inequality of Taylor yields a constant $C_F \geq 0$ such that

$$\forall \mathbf{x} \in B(\mathbf{c}_k, \alpha) \|F(\mathbf{x}) - (F(\mathbf{c}_k) + dF_{\mathbf{c}_k}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k))\| \leq C_F \alpha^2$$

Moreover, dF is bounded on \mathcal{P} by say, C'_F , which yields

$$\forall \mathbf{x} \in B(\mathbf{c}_k, \alpha) \|(\mathbf{A}_{k,K} - dF_{\mathbf{c}_k})(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k)\| \leq (C'_F + M') \alpha$$

Eventually, the proposition (1) shows that (5) holds, with

$$\begin{aligned} R_1(\mathbf{x}, \alpha, K) &= \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \in B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}(\mathbf{x}) \|F(\mathbf{x}) - (F(\mathbf{c}_k) + dF_{\mathbf{c}_k}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k))\| \\ \tilde{R}_1(\mathbf{x}, \alpha, K) &= \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \in B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}(\mathbf{x}) \|(\mathbf{A}_{k,K} - dF_{\mathbf{c}_k})(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k)\| \\ R_2(\mathbf{x}, \alpha, K) &= M'' \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k \notin B(\mathbf{x}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

The conclusion follows with a standard argument : if $\epsilon > 0$, we may choose $\alpha > 0$ so that

$$R_1(\mathbf{x}, \alpha, K) + \tilde{R}_1(\mathbf{x}, \alpha, K) \leq \epsilon$$

Then, since $R_2(\mathbf{x}, \alpha, K) \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 0$, there exists $K_0 \in \mathbb{N}$ such that

$$\forall K \geq K_0, R_1(\mathbf{x}, \alpha, K) + \tilde{R}_1(\mathbf{x}, \alpha, K) + R_2(\mathbf{x}, \alpha, K) \leq \epsilon + \epsilon$$

□

Proposition 4 (Unity partition on $\text{Im } F$ space). *We keep the same assumptions as in Proposition 1. As in Proposition 3, we assume $(\mathbf{A}_{k,K})_{k=1..K}$ is a sequence of sets of matrices with size $D \times L$, uniformly bounded by $C > 0$, and that F is M -Lipschitz (for $M > 0$). Let $(\sigma_{k,K})_{k=1..K}$ be a sequence of sets of non negative numbers. We note*

$$s_K^+ := \max_{k=1..K} \sigma_{k,K} \text{ and } s_K^- := \min_{k=1..K} \sigma_{k,K}$$

We assume that σ go to zero with a rate linked to Γ , that is, we assume that there exists $\beta^-, \beta^+ > 0$ such that

$$\forall K \in \mathbb{N} \beta^- \leq s_K^- t_K^- \leq s_K^+ t_K^+ \leq \beta^+ \quad (6)$$

We define $\Sigma_{k,K} := \sigma_{k,K} I_D$, $\mathbf{c}_k^* := F(\mathbf{c}_k)$ and $\Gamma_{k,K}^* := \Sigma_{k,K} + \mathbf{A}_{k,K} \Gamma_{k,K} \mathbf{A}_{k,K}^t$. Then, in the same manner as in Proposition 1, the mixture of the Gaussian densities with equal weights $\frac{1}{K}$, means \mathbf{c}_k^* , and covariances $\Gamma_{k,K}^*$ is an asymptotic partition of the unity on $\text{Im } F$, in the following sense :

$$\forall \mathbf{y} \in \text{Im } F, \forall \alpha > 0, \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k^* \in B(\mathbf{y}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}^*(\mathbf{y}) \xrightarrow{K \rightarrow \infty} 1 \quad (7)$$

Proof. We will apply the proposition 1 to the points \mathbf{c}_K^* and matrices $\Gamma_{k,K}^*$. Since F is M -Lipschitz, we first check that

$$m_K^* := \sup_{\mathbf{y} \in \text{Im } F} \min_{k=1..K} \|\mathbf{y} - \mathbf{c}_k^*\| \leq M m_K$$

Then, we have that

$$\text{Sp } \Gamma_{k,K}^* = \sigma_{k,K} + \text{Sp } \mathbf{A}_{k,K} \Gamma_{k,K} \mathbf{A}_{k,K}^t \quad (8)$$

with leads to

$$\sigma_{k,K} \leq \max \text{Sp } \Gamma_{k,K}^* \leq \sigma_{k,K} + C \max \text{Sp } \Gamma_{k,K}$$

If

$$t_{k,K}^* := \frac{1}{\max \text{Sp } \Gamma_{k,K}^*}; t_K^{*-} := \min_{k=1..K} t_{k,K}^*; t_K^{*+} := \max_{k=1..K} t_{k,K}^*$$

we thus have (using the assumption 6)

$$t_K^{*+} \leq \frac{1}{s_K^-} \leq \frac{t_K^-}{\beta^-} \leq \frac{G}{\beta^- m_K} \leq \frac{GM}{\beta^- m_K^*}$$

and

$$t_K^{*-} \geq \frac{1}{s_K^+ + \frac{C}{t_K^-}}$$

Since, from assumption 6,

$$\frac{1}{s_K^+} \geq \frac{t_K^+}{\beta^+}$$

and since $t_K^+ \in \mathcal{G}$, we use the lemma 2 to conclude that $t_K^* \in \mathcal{G}$. Thus, the assumption (**Growth rate**) also holds for \mathbf{c}_k^* and $\mathbf{\Gamma}_{k,K}^*$. Lastly, equation (8) shows that

$$\begin{aligned} \text{Cond}(\mathbf{\Gamma}_{k,K}^*) &= \frac{\sigma_{k,K} + \max \text{Sp } \mathbf{A}_{k,K} \mathbf{\Gamma}_{k,K} \mathbf{A}_{k,K}^t}{\sigma_{k,K} + \min \text{Sp } \mathbf{A}_{k,K} \mathbf{\Gamma}_{k,K} \mathbf{A}_{k,K}^t} \leq \frac{\sigma_{k,K} + C \max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}_{k,K}}{\sigma_{k,K}} \\ &= 1 + \frac{C}{t_{k,K} \sigma_{k,K}} \leq 1 + \frac{C}{t_K^- s_K^-} \leq 1 + \frac{C}{\beta^-} \end{aligned}$$

This shows the requirements of proposition 1 are fulfilled, yielding the conclusion. \square

Lemma 8. *We keep the same assumptions as in Proposition 4. We define*

$$\begin{aligned} \mathbf{\Sigma}_{k,K}^* &:= \left(\mathbf{\Gamma}_{k,K}^{-1} + \mathbf{A}_{k,K} \mathbf{\Sigma}_{k,K}^{-1} \mathbf{A}_{k,K}^t \right)^{-1} \\ \mathbf{A}_{k,K}^* &:= \mathbf{\Sigma}_{k,K}^* \mathbf{A}_{k,K} \mathbf{\Sigma}_{k,K}^{-1} \\ \mathbf{b}_{k,K}^* &:= \mathbf{\Sigma}_{k,K}^* \mathbf{\Gamma}_{k,K}^{-1} \mathbf{c}_k - \mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{b}_{k,K} \end{aligned}$$

Then, the sequences $(\mathbf{A}_{k,K}^*)$ and $(\mathbf{b}_{k,K}^*)$ are uniformly bounded.

Proof. To simplify the notations, we drop the (k, K) indices here. We have

$$\mathbf{\Sigma}^* = \sigma (\sigma \mathbf{\Gamma}^{-1} + \mathbf{A} \mathbf{A}^t)^{-1}$$

Since $\mathbf{\Sigma}^*$ is still symmetric positive, we have

$$\|\mathbf{\Sigma}^*\| = \sigma \max \text{Sp} (\sigma \mathbf{\Gamma}^{-1} + \mathbf{A} \mathbf{A}^t)^{-1} = \sigma \frac{1}{\min \text{Sp} (\sigma \mathbf{\Gamma}^{-1} + \mathbf{A} \mathbf{A}^t)}$$

Since $\min \text{Sp}(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \geq \min \text{Sp } \mathbf{S}_1 + \min \text{Sp } \mathbf{S}_2$ when \mathbf{S}_1 and \mathbf{S}_2 are symmetric positive matrices, we thus have

$$\|\mathbf{\Sigma}_{k,K}^*\| \leq \frac{\sigma_{k,K}}{\sigma_{k,K} t_{k,K}} \leq \frac{\sigma_{k,K}}{s_K^- t_K^-} \leq \frac{\sigma_{k,K}}{\beta^-}$$

Thus

$$\|\mathbf{A}^*\| \leq \|\mathbf{\Sigma}^*\| \frac{\|\mathbf{A}\|}{\sigma} \leq \frac{\|\mathbf{A}\|}{\beta^-}$$

and

$$\|\mathbf{\Sigma}^* \mathbf{\Gamma}^{-1}\| \leq \frac{\sigma}{\beta^-} \max \text{Sp } \mathbf{\Gamma}^{-1} = \frac{\sigma}{\beta^- \min \text{Sp } \mathbf{\Gamma}} \leq \sigma C_o t \leq C_o s^+ t^+ \leq C_o \beta^+$$

Since the sequences (c) and (b) are bounded, this concludes the proof. \square

We now can prove a result similar to the proposition 3, for the inverse model, assuming F is injective.

Proposition 5 (Convergence of the inverse model). *We keep the same assumptions as in Proposition 4. Furthermore, we assume that there exists a constant $M^* > 0$ such that*

$$\forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{P} \|F(\mathbf{x}_1) - F(\mathbf{x}_2)\| \geq M^* \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|$$

We then have

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{P}, \mathbb{E}[X|Y = F(\mathbf{x})]_{G, \theta_K} \xrightarrow{K \rightarrow \infty} \mathbf{x}$$

Proof. The proof is very similar to the one of Proposition 4. We note $\mathbf{y} := F(\mathbf{x})$. We have

$$\left\| \mathbb{E}[X|Y = \mathbf{y}]_{G, \boldsymbol{\theta}_K} - \mathbf{x} \right\| \leq \sum_{k=1}^K \alpha_{k,K}^*(\mathbf{y}) \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_{k,K}^* - \mathbf{x} \right\|$$

In the one hand, the lemma 8 gives us constants $M', M'' > 0$ such that

$$\begin{aligned} \forall K \in \mathbb{N}, \forall k \in \llbracket 1, K \rrbracket \quad & \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_{k,K}^* - \mathbf{x} \right\| \leq M' \\ \forall K \in \mathbb{N}, \forall k \in \llbracket 1, K \rrbracket \quad & \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* \right\| \leq M'' \end{aligned}$$

Given $\epsilon > 0$, letting $\alpha := \epsilon$ and using the proposition 4, let $K_0 \in \mathbb{N}$ such that

$$\forall K \geq K_0 \quad \sum_{\substack{k=1 \\ \mathbf{c}_k^* \notin B(\mathbf{y}, \alpha)}}^K \alpha_{k,K}^*(\mathbf{y}) \leq \epsilon$$

In the other hand, if $\mathbf{c}_k^* \in B(\mathbf{y}, \alpha)$,

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_{k,K}^* - \mathbf{x} \right\| & \leq \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_{k,K}^* - (\mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{c}_k^* + \mathbf{b}_{k,K}^*) \right\| + \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{c}_k^* + \mathbf{b}_{k,K}^* - \mathbf{x} \right\| \\ & \leq \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* (\mathbf{y} - \mathbf{c}_k^*) \right\| + \left\| \mathbf{c}_k^* - \mathbf{x} \right\| \\ & \leq M'' \alpha + \frac{1}{M^*} \alpha \end{aligned}$$

We then have, for $K \geq K_0$,

$$\sum_{k=1}^K \alpha_{k,K}^*(\mathbf{y}) \left\| \mathbf{A}_{k,K}^* \mathbf{y} + \mathbf{b}_{k,K}^* - \mathbf{x} \right\| \leq M'' \epsilon + \frac{1}{M^*} \epsilon + M' \epsilon$$

which concludes the proof. □

Annexe G

Autour de l'implémentation logicielle

Cette thèse, à l'interface entre les statistiques et la planétologie, est marquée par une forte contribution applicative. La méthodologie étant destinée à être utilisée dans un contexte d'inversion massive, les performances de l'implémentation ne peuvent être négligées. Cette annexe décrit quelques réflexions sur le sujet. Elle se veut plus être un rapport d'expérience personnelle, qu'une rigoureuse discussion académique.

G.1 Un aperçu des langages de calcul scientifique

Durant cette thèse, plusieurs langages ont été utilisés. Le code source du modèle GLLiM était déjà disponible dans les langages R et Matlab, que je ne maîtrisais pas, ce qui m'a conduit à une première implémentation en Python. Ces trois langages sont d'ailleurs les langages de calcul scientifique les plus répandus. R est essentiellement utilisé dans la communauté statistique, et a l'avantage d'un éco-système de bibliothèques spécialisées très complet. Python est extrêmement répandu dans l'industrie, et séduit par sa simplicité, sa syntaxe et son éco-système général. Il est aussi souvent utilisé comme interface avec un langage performant, point sur lequel nous reviendrons. Matlab, quant à lui, tient plus du produit complet que d'un langage. L'environnement fournit au chercheur tous les outils numériques dont il a besoin. Concernant les performances, ces trois langages sont interprétés, avec un typage dynamique. Dans un code scientifique où l'essentiel du temps de calcul est concentré dans des boucles exécutant des opérations numériques simples, le caractère dynamique de ces langages les pénalise lourdement. La principale technique utilisée pour obtenir des performances satisfaisantes est de vectoriser le code et d'appeler une routine implémentée dans un langage plus efficace (C ou Fortran). Je vois deux inconvénients à cette approche. Premièrement, la vectorisation implique un niveau d'abstraction supplémentaire qui rend le code peu compréhensible. Des opérations qui s'écrivent naturellement avec une boucle se transforment en d'astucieux jeux d'indices et de dimensions. Deuxièmement, le code doit être systématiquement vectorisé : on ne peut pas mélanger une approche vectorielle et une approche scalaire, ce qui nuit à la composition et la réutilisation du code.

L'éco-système Python propose certaines approches pour améliorer les performances sans changer complètement de langage. J'ai commencé par la bibliothèque [Numexpr](#), qui analyse une expression mathématique pour l'exécuter de manière optimale. Cette approche est adaptée par exemple à l'évaluation d'un modèle analytique. Une autre approche est proposée par la bibliothèque [Numba](#). Elle permet de remplacer une fonction écrite en Python par une version compilée à l'exécution (JIT, Just-In-Time). Elle supporte un sous-ensemble des capacités du langage et la bibliothèque NumPy, ce qui est suffisant pour la plupart des algorithmes numériques. Finalement, j'ai aussi essayé [Cython](#), qui consiste en un langage très proche de Python, qui est transpilé en C, puis compilé, avant exécution (AOT, Ahead-Of-Time). Là aussi, un sous-ensemble des fonctionnalités de Python est pris en charge.

C'est dans ce paysage que s'inscrit [Julia](#) ([[Bezanson et al., 2017](#)]), un langage récent conçu avant tout pour le calcul scientifique. L'objectif principal de ce langage est d'éviter de devoir utiliser deux langages distincts entre la phase d'exploration (typiquement Python, R) et la phase de passage à l'échelle (Fortran,

C/C++). Le mécanisme principal pour arriver à ce résultat est de combiner une approche de compilation Just-In-Time avec un paradigme dit de *multiple dispatch*. Grossièrement, cela signifie qu'une même fonction va être déclinée en différentes versions, suivant les types de ses paramètres d'entrée. Par exemple, l'opération générique d'addition va être compilée différemment suivant si les arguments sont des entiers ou des flottants. Une fois la fonction compilée, ses performances deviennent comparables à celles des langages bas niveau. Julia permet donc de travailler de façon interactive, ce qui est très appréciable dans les phases d'exploration, tout en pouvant conserver le même code pour passer à l'échelle. Ces atouts m'ont finalement conduit à adopter Julia comme langage principal pour ma thèse.

G.2 Encadrement d'un stage pour passer à l'échelle

J'ai eu l'opportunité pendant ma thèse d'encadrer le stage de Sami Djouadi, étudiant en dernier cycle de l'ESI (École nationale supérieure d'informatique d'Alger), qui avait pour vocation de mettre au point une implémentation permettant à la fois de passer à l'échelle et aussi d'être utilisable par la communauté planétologie. Après réflexion, nous avons décidé d'opter pour une architecture en deux parties : un noyau de calcul en C++ et une interface Web avec un serveur en Python. Une des raisons majeurs de choix était de pouvoir s'intégrer dans l'éco-système Python en proposant une librairie faisant l'interface via Cython avec le noyau de calcul. J'ai beaucoup appris pendant ce stage, et la qualité de l'implémentation effectuée par Sami m'a permis d'améliorer ma propre implémentation.

En revanche, j'observe que les contraintes techniques liées à l'interface entre un langage bas niveau comme C++ et un langage haut niveau comme Python restent importantes. Notamment, elles compliquent la maintenance et l'évolution du code. Dans notre cas, la gestion des dépendances nous a aussi contraint à devoir distribuer le code sous un container Docker, ce qui d'une certaine manière, complique un peu son déploiement. Finalement, la séparation en deux implémentations (un code de recherche qui évolue assez rapidement et une implémentation définitive), nécessite aussi plus de main d'oeuvre pour garder les deux versions à jour. Avec du recul, je conseillerais donc d'éviter de dupliquer les implémentations : c'est d'ailleurs une excellente raison pour adopter Julia.

G.3 Zoom sur un choix d'implémentation : diversité des fonctionnelles

Un des objectifs de cette implémentation est de favoriser au maximum la ré-utilisation du code. Une des difficultés à ce sujet provient du caractère très général des algorithmes proposés : ils s'appliquent en général à n'importe quelle fonctionnelle. Au cours de cette thèse, plusieurs ont été utilisées : des fonctions mathématiques simples pour des expériences synthétiques et des modèles physiques complexes (comme le modèle de Hapke), possiblement paramétrés. Pour unifier ces différents cas, j'ai choisi d'utiliser une interface. Il s'agit d'un type abstrait `Models.Model` qui doit implémenter une série de méthodes qui définissent complètement la fonctionnelle (voir l'encart ci-dessous).

La plupart des fonctionnalités nécessitant l'évaluation de F (génération du jeu d'apprentissage, Importance Sampling, estimation du bruit) prennent alors en argument un objet de type `Models.Model`. Le paradigme de *multiple dispatch* de Julia permet ensuite de définir les méthodes requises pour un contexte particulier, et de pouvoir utiliser directement ce contexte. En plus de simples fonctions mathématiques, le package définit par exemple le type `Models.Hapke`, qui implémente `Models.Model` pour le modèle de Hapke. Un objet de contexte pour le modèle de Hapke est construit en précisant (au moins) le nom de l'expérience et les géométries de mesure : `context = Models.Hapke("Nontronite", geometries)`.

Interface Models.Model

```
# ---- Essential methods, needed by the inversion algorithm ----

# return the dimension of the X space
get_L(m::Model) = error("get_L not implemented for type $(typeof(m))")
# return the dimension of the Y space
get_D(m::Model) = error("get_D not implemented for type $(typeof(m))")

# compute F :
# Write f(x) in 'out', which may be non zero. 'D' is the precomputed length of 'out'.
# 'x' is always in [0,1]^L (eventually normalized beforehand), so re-scaling
# should be applied here if needed
f!(m::Model, x::VecOrSub{T}, out::VecOrSub{T}, D::Int) where T =
    error("f! not implemented for type $(typeof(m))")

# ---- Convenience methods ----

# Convert a mathematical value in [0,1] and a diagonal covariance to physical ones
to_physical(m::Model, x::VecOrSub{T}, cov::VecOrSub{T}) where T = x, cov
# Inverse of 'to_physical'
from_physical(m::Model, x::VecOrSub{T}, cov::VecOrSub{T}) where T = x, cov

# Return a label identifying this context in plots or file names.
label(m::Model) = error("label not implemented for type $(typeof(m))")

# Return an array of variable names, used in plots
variables(m::Model) = ["x$i" for i in 1:get_L(m)]
```

Bibliographie

- [Abdar et al., 2021] Abdar, M., Pourpanah, F., Hussain, S., Rezazadegan, D., Liu, L., Ghavamzadeh, M., Fieguth, P., Cao, X., Khosravi, A., Acharya, U. R., Makarenkov, V., and Nahavandi, S. (2021). A Review of Uncertainty Quantification in Deep Learning : Techniques, Applications and Challenges. *arXiv :2011.06225 [cs]*. 9
- [Andrieu et al., 2018] Andrieu, F., Schmidt, F., Douté, S., and Chassefière, E. (2018). Ice state evolution during spring in Richardson crater, Mars. *Icarus*, 315 :158–173. 7
- [Arridge et al., 2019] Arridge, S., Maass, P., Öktem, O., and Schönlieb, C.-B. (2019). Solving inverse problems using data-driven models. *Acta Numerica*, 28 :1–174. 9
- [Assländer, 2021] Assländer, J. (2021). A Perspective on MR Fingerprinting. *Journal of Magnetic Resonance Imaging*, 53(3) :676–685. 9
- [Balsiger et al., 2018] Balsiger, F., Steindel, C., Arn, M., Wagner, B., Grunder, L., El-Koussy, M., Valenzuela, W., Reyes, M., and Scheidegger, O. (2018). Segmentation of Peripheral Nerves From Magnetic Resonance Neurography : A Fully-Automatic, Deep Learning-Based Approach. *Frontiers in Neurology*, 9 :777. 9
- [Barbieri et al., 2018] Barbieri, M., Brizi, L., Giampieri, E., Solera, F., Castellani, G., Testa, C., and Remondini, D. (2018). Circumventing the Curse of Dimensionality in Magnetic Resonance Fingerprinting through a Deep Learning Approach. *arXiv :1811.11477 [physics]*. 9
- [Beck et al., 2012] Beck, P., Pommerol, A., Thomas, N., Schmitt, B., Moynier, F., and Barrat, J. A. (2012). Photometry of meteorites. *Icarus*, 218(1) :364–377. 53
- [Bernard-Michel et al., 2009] Bernard-Michel, C., Douté, S., Fauvel, M., Gardes, L., and Girard, S. (2009). Retrieval of Mars surface physical properties from OMEGA hyperspectral images using regularized sliced inverse regression. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 114(E6) :E06005. 7
- [Bernard-Michel et al., 2007] Bernard-Michel, C., Douté, S., Gardes, L., and Girard, S. (2007). Estimation of Mars surface physical properties from hyperspectral images using Sliced Inverse Regression. Technical Report RR-6355, INRIA. 9
- [Bertrand et al., 2001] Bertrand, C., Ohmi, M., Suzuki, R., and Kado, H. (2001). A probabilistic solution to the MEG inverse problem via MCMC methods : The reversible jump and parallel tempering algorithms. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, 48(5) :533–542. 10
- [Bezanson et al., 2017] Bezanson, J., Edelman, A., Karpinski, S., and Shah, V. (2017). Julia : A Fresh Approach to Numerical Computing. *SIAM Review*, 59(1) :65–98. 11, 140
- [Bondarenko et al., 2006] Bondarenko, N. V., Kreslavsky, M. A., and Head, J. W. (2006). North-south roughness anisotropy on Venus from the Magellan Radar Altimeter : Correlation with geology. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 111(E6). 52
- [Bugallo et al., 2015] Bugallo, M. F., Martino, L., and Corander, J. (2015). Adaptive importance sampling in signal processing. *Digital Signal Processing*, 47 :36–49. 39
- [Campbell and Shepard, 1996] Campbell, B. A. and Shepard, M. K. (1996). Lava flow surface roughness and depolarized radar scattering. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 101(E8) :18941–18951. 52

- [Cappe et al., 2004] Cappe, O., Guillin, A., Marin, J.-M., and Robert, C. P. (2004). Population monte carlo. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 13 :907–929. [39](#)
- [Carlson et al., 2005] Carlson, R. W., Anderson, M. S., Mehlman, R., and Johnson, R. E. (2005). Distribution of hydrate on Europa : Further evidence for sulfuric acid hydrate. *Icarus*, 177(2) :461–471. [9](#)
- [Carreira-Perpinan, 2000] Carreira-Perpinan, M. (2000). Mode-finding for mixtures of Gaussian distributions. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 22(11) :1318–1323. [31](#)
- [Ceamanos et al., 2013] Ceamanos, X., Douté, S., Fernando, J., Schmidt, F., Pinet, P., and Lyapustin, A. (2013). Surface reflectance of Mars observed by CRISM/MRO : 1. Multi-angle Approach for Retrieval of Surface Reflectance from CRISM observations (MARS-ReCO). *Journal of Geophysical Research : Planets*, 118(3) :514–533. [56](#), [82](#)
- [Chandler et al., 2005] Chandler, J. H., Fryer, J. G., and Jack, A. (2005). Metric capabilities of low-cost digital cameras for close range surface measurement. *The Photogrammetric Record*, 20(109) :12–26. [52](#)
- [Chastaing et al., 2015] Chastaing, G., Prieur, C., and Gamboa, F. (2015). Generalized Sobol sensitivity indices for dependent variables : Numerical methods. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 85(7) :1306–1333. [99](#)
- [Cord et al., 2003] Cord, A. M., Pinet, P. C., Daydou, Y., and Chevrel, S. D. (2003). Planetary regolith surface analogs : : Optimized determination of Hapke parameters using multi-angular spectro-imaging laboratory data. *Icarus*, 165(2) :414–427. [8](#), [53](#)
- [Cornuet et al., 2012] Cornuet, J.-M., Marin, J.-M., Mira, A., and Robert, C. P. (2012). Adaptive Multiple Importance Sampling. *Scandinavian Journal of Statistics*, 39(4) :798–812. [39](#)
- [Darvishzadeh et al., 2012] Darvishzadeh, R., Matkan, A. A., and Ahangar, A. D. (2012). Inversion of a radiative transfer model for estimation of rice canopy chlorophyll content using a lookup-table approach. *IEEE Journal of selected topics in applied earth observations and remote sensing*, 5(4) :1222–1230. [9](#)
- [Deleforge et al., 2015] Deleforge, A., Forbes, F., and Horaud, R. (2015). High-dimensional regression with gaussian mixtures and partially-latent response variables. *Statistics and Computing*, 25(5) :893–911. [10](#), [13](#), [15](#), [20](#), [24](#), [30](#)
- [Deleforge and Horaud, 2012] Deleforge, A. and Horaud, R. (2012). 2D sound-source localization on the binaural manifold. In *2012 IEEE International Workshop on Machine Learning for Signal Processing*, pages 1–6. [13](#)
- [Dinh et al., 2015] Dinh, L., Krueger, D., and Bengio, Y. (2015). NICE : Non-linear independent components estimation. In Bengio, Y. and LeCun, Y., editors, *3rd International Conference on Learning Representations, ICLR 2015, San Diego, CA, USA, May 7-9, 2015, Workshop Track Proceedings*. [10](#)
- [Dobigeon et al., 2009] Dobigeon, N., Moussaoui, S., Coulon, M., Tourneret, J.-Y., and Hero, A. O. (2009). Joint Bayesian Endmember Extraction and Linear Unmixing for Hyperspectral Imagery. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 57(11) :4355–4368. [7](#)
- [Douté and Pilorget, 2017] Douté, S. and Pilorget, C. (2017). Physical state and temporal evolution of icy surfaces in the Mars South Pole. *European Planetary Science Congress*, 11 :EPSC2017–491. [11](#), [82](#)
- [Douté and Schmitt, 1998] Douté, S. and Schmitt, B. (1998). A multilayer bidirectional reflectance model for the analysis of planetary surface hyperspectral images at visible and near-infrared wavelengths. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 103(E13) :31367–31389. [53](#)
- [Douté et al., 2007] Douté, S., Schmitt, B., Langevin, Y., Bibring, J.-P., Altieri, F., Bellucci, G., Gondet, B., and Poulet, F. (2007). South Pole of Mars : Nature and composition of the icy terrains from Mars Express OMEGA observations. *Planetary and Space Science*, 55(1) :113–133. [7](#)
- [Eitel et al., 2011] Eitel, J. U. H., Williams, C. J., Vierling, L. A., Al-Hamdan, O. Z., and Pierson, F. B. (2011). Suitability of terrestrial laser scanning for studying surface roughness effects on concentrated flow erosion processes in rangelands. *CATENA*, 87(3) :398–407. [52](#)
- [Fasiolo et al., 2018] Fasiolo, M., de Melo, F. E., and Maskell, S. (2018). Langevin incremental mixture importance sampling. *Statistics and Computing*, 28(3) :549–561. [39](#), [44](#), [45](#)

- [Fernando et al., 2013] Fernando, J., Schmidt, F., Ceamanos, X., Pinet, P., Douté, S., and Daydou, Y. (2013). Surface reflectance of Mars observed by CRISM/MRO : 2. Estimation of surface photometric properties in Gusev Crater and Meridiani Planum. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 118(3) :534–559. [53](#)
- [Fisher, 1930] Fisher, R. A. (1930). Moments and Product Moments of Sampling Distributions. *Proceedings of the London Mathematical Society*, s2-30(1) :199–238. [34](#)
- [Frau-Pascual et al., 2014] Frau-Pascual, A., Vincent, T., Sloboda, J., Ciuciu, P., and Forbes, F. (2014). Physiologically Informed Bayesian Analysis of ASL fMRI Data. In Cardoso, M. J., Simpson, I., Arbel, T., Precup, D., and Ribbens, A., editors, *Bayesian and graphical Models for Biomedical Imaging*, Lecture Notes in Computer Science, pages 37–48. Springer International Publishing. [7](#)
- [Gal, 2016] Gal, Y. (2016). *Uncertainty in Deep Learning*. PhD thesis, University of Cambridge. [9](#)
- [Gay et al., 2015] Gay, M., Phan, X.-V., Ferro-Famil, L., Karbou, F., Durand, Y., Girard, A., and D ’urso, G. (2015). Simulation de la rétrodiffusion radar du manteau neigeux. Comparaison avec les données d’un radar SOL et TSX (projet NoSREx). In *L’Environnement ElectroMagnétique Des Radars à l’horizon 2020 : Quels Enjeux En Termes de Modélisation et Moyens de Mesures ?*, ENVIREM_FINAL, Gif sur Yvette, France. [11](#), [109](#), [110](#)
- [Geweke, 1989] Geweke, J. (1989). Bayesian Inference in Econometric Models Using Monte Carlo Integration. *Econometrica*, 57(6) :1317–1339. [39](#)
- [Gilavert et al., 2015] Gilavert, C., Moussaoui, S., and Idier, J. (2015). Efficient Gaussian Sampling for Solving Large-Scale Inverse Problems Using MCMC. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 63(1) :70–80. [10](#)
- [Giovannelli and Idier, 2015] Giovannelli, J.-F. and Idier, J. (2015). *Regularization and Bayesian Methods for Inverse Problems in Signal and Image Processing*. John Wiley & Sons, Inc. [7](#)
- [Golbabaee et al., 2019] Golbabaee, M., Chen, D., Gómez, P. A., Menzel, M. I., and Davies, M. (2019). Geometry of Deep Learning for Magnetic Resonance Fingerprinting. *IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, 2019 :7825–7829. [9](#)
- [Gordon et al., 1993] Gordon, N. J., Salmond, D. J., and Smith, A. F. M. (1993). Novel approach to nonlinear/non-Gaussian Bayesian state estimation. *IEE Proceedings F (Radar and Signal Processing)*, 140(2) :107–113. [39](#)
- [Hapke, 1981] Hapke, B. (1981). Bidirectional reflectance spectroscopy. I - theory. *Journal of Geophysical Research : Solid Earth*, 86 :3039–3054. [53](#), [54](#)
- [Hapke, 1984] Hapke, B. (1984). Bidirectional reflectance spectroscopy. III - Correction for macroscopic roughness. *Icarus*, 59 :41–59. [53](#), [54](#)
- [Hapke, 1986] Hapke, B. (1986). Bidirectional reflectance spectroscopy : 4. The extinction coefficient and the opposition effect. *Icarus*, 67(2) :264–280. [53](#), [54](#), [56](#)
- [Hapke, 1993] Hapke, B. (1993). *Theory of Reflectance and Emittance Spectroscopy*. Topics in Remote Sensing. Cambridge University Press, Cambridge. [55](#)
- [Hapke, 2002] Hapke, B. (2002). Bidirectional Reflectance Spectroscopy : 5. The Coherent Backscatter Opposition Effect and Anisotropic Scattering. *Icarus*, 157(2) :523–534. [53](#), [54](#), [55](#), [56](#)
- [Hapke, 2012] Hapke, B. (2012). Bidirectional reflectance spectroscopy 7 : The single particle phase function hockey stick relation. *Icarus*, 221(2) :1079–1083. [53](#), [56](#), [57](#)
- [Hapke, 2021] Hapke, B. (2021). Bidirectional reflectance spectroscopy 8. The angular width of the opposition effect in regolith-like media. *Icarus*, 354 :114105. [56](#)
- [Haubrock et al., 2009] Haubrock, S.-N., Kuhnert, M., Chabrilat, S., Güntner, A., and Kaufmann, H. (2009). Spatiotemporal variations of soil surface roughness from in-situ laser scanning. *CATENA*, 79(2) :128–139. [52](#)
- [Helfenstein and Shepard, 2011] Helfenstein, P. and Shepard, M. K. (2011). Testing the Hapke photometric model : Improved inversion and the porosity correction. *Icarus*, 215(1) :83–100. [8](#), [53](#), [58](#)

- [Helfenstein and Veverka, 1989] Helfenstein, P. and Veverka, J. (1989). Physical characterization of asteroid surfaces from photometric analysis. *Asteroids II*. 53
- [Hennig, 2010] Hennig, C. (2010). Methods for merging Gaussian mixture components. *Advances in Data Analysis and Classification*, 4(1) :3–34. 31
- [Homan and Gelman, 2014] Homan, M. D. and Gelman, A. (2014). The No-U-turn sampler : Adaptively setting path lengths in Hamiltonian Monte Carlo. *The Journal of Machine Learning Research*, 15(1) :1593–1623. 59
- [Hoppe et al., 2017] Hoppe, E., Körzdörfer, G., Würfl, T., Wetzl, J., Lugauer, F., Pfeuffer, J., and Maier, A. (2017). Deep Learning for Magnetic Resonance Fingerprinting : A New Approach for Predicting Quantitative Parameter Values from Time Series. *Studies in Health Technology and Informatics*, 243 :202–206. 9
- [Kabir et al., 2018] Kabir, H. M. D., Khosravi, A., Hosen, M. A., and Nahavandi, S. (2018). Neural Network-Based Uncertainty Quantification : A Survey of Methodologies and Applications. *IEEE Access*, 6 :36218–36234. 9
- [Kahn and Marshall, 1953] Kahn, H. and Marshall, A. W. (1953). Methods of Reducing Sample Size in Monte Carlo Computations. *Journal of the Operations Research Society of America*, 1(5) :263–278. 40
- [Kennedy et al., 2001] Kennedy, J., Eberhart, R. C., and Shi, Y. (2001). Swarm intelligence. In *Swarm Intelligence*, The Morgan Kaufmann Series in Artificial Intelligence, pages xiii–xxvii. Morgan Kaufmann, San Francisco. 8, 53
- [Kenney and Keeping, 1951] Kenney, J. F. and Keeping, E. S. (1951). *Mathematics of Statistics. Part 2*. D. Van Nostrand, Princeton, N.J. 34
- [Kloek and van Dijk, 1978] Kloek, T. and van Dijk, H. K. (1978). Bayesian Estimates of Equation System Parameters : An Application of Integration by Monte Carlo. *Econometrica*, 46(1) :1–19. 10, 39
- [Kobyzev et al., 2020] Kobyzev, I., Prince, S., and Brubaker, M. (2020). Normalizing flows : An introduction and review of current methods. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 10
- [Kruse et al., 2021] Kruse, J., Ardizzone, L., Rother, C., and Köthe, U. (2021). Benchmarking Invertible Architectures on Inverse Problems. *arXiv :2101.10763 [cs]*. 10
- [Kugler et al., 2021] Kugler, B., Forbes, F., and Douté, S. (2021). Fast Bayesian Inversion for high dimensional inverse problems. *Statistics and Computing*. 83
- [Labarre, 2017] Labarre, S. (2017). *Caractérisation et Modélisation de La Rugosité Multi-Échelle Des Surfaces Naturelles Par Télédétection Dans Le Domaine Solaire*. PhD thesis. 99, 101, 114
- [Lathuiliere et al., 2017] Lathuiliere, S., Juge, R., Mesejo, P., Munoz-Salinas, R., and Horaud, R. (2017). Deep Mixture of Linear Inverse Regressions Applied to Head-Pose Estimation. In *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*, pages 4817–4825. 13
- [Lemasson et al., 2016] Lemasson, B., Pannetier, N., Coquery, N., Boisserand, L. S. B., Collomb, N., Schuff, N., Moseley, M., Zaharchuk, G., Barbier, E. L., and Christen, T. (2016). MR Vascular Fingerprinting in Stroke and Brain Tumors Models. *Scientific Reports*, 6 :37071. 7, 9
- [Lemmetyinen et al., 2011] Lemmetyinen, J., Kontu, A., Takala, M., Rautiainen, K., Wiesman, A., and Werner, C. (2011). Technical assistance for the deployment of an x to ku band scatterometer during the nosrex experiment. Technical Report ESA ESTEC Contract No. 22671/09/NL/JA. 109
- [Lim and McCann, 2020] Lim, T. and McCann, R. J. (2020). Geometrical bounds for the variance and recentered moments. *arXiv :2001.11851 [math, stat]*. 36
- [Lucht et al., 2000] Lucht, W., Schaaf, C. B., and Strahler, A. H. (2000). An algorithm for the retrieval of albedo from space using semiempirical BRDF models. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 38(2) :977–998. 53
- [MacKay, 1992] MacKay, D. J. (1992). A practical Bayesian framework for backpropagation networks. *Neural computation*, 4(3) :448–472. 9

- [Marshall, 1956] Marshall, A. (1956). The use of multi-stage sampling schemes in Monte Carlo computations. In Meyer, H. A., editor, *Symposium on Monte Carlo Methods*, pages 123–140, New York. Wiley. [39](#)
- [Martin et al., 2012] Martin, J., Wilcox, L. C., Burstedde, C., and Ghattas, O. (2012). A Stochastic Newton MCMC Method for Large-Scale Statistical Inverse Problems with Application to Seismic Inversion. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 34(3) :A1460–A1487. [10](#)
- [Martino et al., 2015] Martino, L., Elvira, V., Luengo, D., and Corander, J. (2015). An Adaptive Population Importance Sampler : Learning From Uncertainty. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 63(16) :4422–4437. [39](#)
- [McGuire and Hapke, 1995] McGuire, A. F. and Hapke, B. W. (1995). An Experimental Study of Light Scattering by Large, Irregular Particles. *Icarus*, 113(1) :134–155. [56](#)
- [Mesejo et al., 2016] Mesejo, P., Sallet, S., David, O., Bénar, C., Warnking, J. M., and Forbes, F. (2016). A differential evolution-based approach for fitting a nonlinear biophysical model to fMRI BOLD data. *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing*, 10(2) :416–427. [7](#)
- [Mohammad-Djafari et al., 2018] Mohammad-Djafari, A., Dumitru, M., Chapdelaine, C., and Gac, N. (2018). Bayesian Inference with Error Variable Splitting and Sparsity Enforcing Priors for Linear Inverse Problems. In *2018 26th European Signal Processing Conference (EUSIPCO)*, pages 440–444. [89](#)
- [Moussaoui et al., 2008] Moussaoui, S., Hauksdóttir, H., Schmidt, F., Jutten, C., Chanussot, J., Brie, D., Douté, S., and Benediktsson, J. A. (2008). On the decomposition of Mars hyperspectral data by ICA and Bayesian positive source separation. *Neurocomputing*, 71(10) :2194–2208. [7](#)
- [Murchie et al., 2009] Murchie, S. L., Seelos, F. P., Hash, C. D., Humm, D. C., Malaret, E., McGovern, J. A., Choo, T. H., Seelos, K. D., Buczkowski, D. L., Morgan, M. F., Barnouin-Jha, O. S., Nair, H., Taylor, H. W., Patterson, G. W., Harvel, C. A., Mustard, J. F., Arvidson, R. E., McGuire, P., Smith, M. D., Wolff, M. J., Titus, T. N., Bibring, J.-P., and Poulet, F. (2009). Compact Reconnaissance Imaging Spectrometer for Mars investigation and data set from the Mars Reconnaissance Orbiter’s primary science phase. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 114(E2) :E00D07. [82](#)
- [Nataraj et al., 2018] Nataraj, G., Nielsen, J.-F., Scott, C., and Fessler, J. A. (2018). Dictionary-Free MRI PERK : Parameter Estimation via Regression with Kernels. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 37(9) :2103–2114. [7](#)
- [Neal, 1996] Neal, R. M. (1996). *Bayesian Learning for Neural Networks*. Lecture Notes in Statistics. Springer-Verlag, New York. [9](#)
- [Nguyen et al., 2019] Nguyen, H. D., Chamroukhi, F., and Forbes, F. (2019). Approximation results regarding the multiple-output Gaussian gated mixture of linear experts model. *Neurocomputing*, 366 :208–214. [24](#)
- [Nguyen et al., 2020] Nguyen, T. T., Nguyen, H. D., Chamroukhi, F., and McLachlan, G. J. (2020). Approximation by finite mixtures of continuous density functions that vanish at infinity. *Cogent Mathematics & Statistics*, 7(1) :1750861. [24](#)
- [Papamakarios et al., 2021] Papamakarios, G., Nalisnick, E., Rezende, D. J., Mohamed, S., and Lakshminarayanan, B. (2021). Normalizing flows for probabilistic modeling and inference. *Journal of Machine Learning Research*, 22(57) :1–64. [10](#)
- [Perthame et al., 2018] Perthame, E., Forbes, F., and Deleforge, A. (2018). Inverse regression approach to robust nonlinear high-to-low dimensional mapping. *Journal of Multivariate Analysis*, 163 :1–14. [13](#), [30](#)
- [Phan et al., 2014] Phan, X. V., Ferro-Famil, L., Gay, M., Durand, Y., Dumont, M., Morin, S., Allain, S., D’Urso, G., and Girard, A. (2014). 1D-Var multilayer assimilation of X-band SAR data into a detailed snowpack model. *The Cryosphere*, 8(5) :1975–1987. [8](#), [109](#)
- [Pilorget et al., 2016] Pilorget, C., Fernando, J., Ehlmann, B. L., Schmidt, F., and Hiroi, T. (2016). Wavelength dependence of scattering properties in the VIS–NIR and links with grain-scale physical and compositional properties. *Icarus*, 267 :296–314. [11](#), [53](#), [65](#), [66](#)

- [Pilorget et al., 2013] Pilorget, C., Vincendon, M., and Poulet, F. (2013). A radiative transfer model to simulate light scattering in a compact granular medium using a Monte-Carlo approach : Validation and first applications. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 118(12) :2488–2501. [53](#)
- [Pinet et al., 2004] Pinet, P. C., Cord, A., Chevrel, S., and Daydou, Y. (2004). Optical Response and Surface Physical Properties of the Lunar Regolith at Reiner Gamma Formation from Clementine Orbital Photometry : Derivation of the Hapke Parameters at Local Scale. In *Lunar and Planetary Science Conference*, volume 35, League City, Texas. [53](#)
- [Potin et al., 2019] Potin, S., Beck, P., Schmitt, B., and Moynier, F. (2019). Some things special about NEAs : Geometric and environmental effects on the optical signatures of hydration. *Icarus*, 333 :415–428. [11](#), [72](#)
- [Potin et al., 2021] Potin, S., Douté, S., Kugler, B., and Forbes, F. (2021). Simulated observations of small bodies : The effect of shape and topography. In *Lunar and Planetary Science Conference*, volume 52. [11](#), [78](#)
- [Potin et al., 2020] Potin, S., Douté, S., Kugler, B., Forbes, F., Beck, P., and Schmitt, B. (2020). Simulated phase curves of Vesta based on laboratory bidirectional reflectance spectroscopy. In *Europlanet Science Congress 2020*, Virtual meeting. [11](#), [78](#)
- [Qiao and Minematsu, 2009] Qiao, Y. and Minematsu, N. (2009). Mixture of Probabilistic Linear Regressions : A unified view of GMM-based mapping techniques. In *2009 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*, pages 3913–3916. [13](#)
- [Raftery and Bao, 2010] Raftery, A. E. and Bao, L. (2010). Estimating and Projecting Trends in HIV/AIDS Generalized Epidemics Using Incremental Mixture Importance Sampling. *Biometrics*, 66(4) :1162–1173. [39](#), [44](#), [45](#)
- [Ray and Lindsay, 2005] Ray, S. and Lindsay, B. G. (2005). The topography of multivariate normal mixtures. *The Annals of Statistics*, 33(5) :2042–2065. [10](#), [31](#)
- [Robert and Casella, 2004] Robert, C. and Casella, G. (2004). *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer Texts in Statistics. Springer-Verlag, New York, second edition. [10](#)
- [Rubin, 1987] Rubin, D. B. (1987). The Calculation of Posterior Distributions by Data Augmentation : Comment : A Noniterative Sampling/Importance Resampling Alternative to the Data Augmentation Algorithm for Creating a Few Imputations When Fractions of Missing Information Are Modest : The SIR Algorithm. *Journal of the American Statistical Association*, 82(398) :543–546. [39](#)
- [Runnalls, 2007] Runnalls, A. (2007). Kullback-Leibler Approach to Gaussian Mixture Reduction. *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*, 43 :989–999. [31](#)
- [Scherzer et al., 2009] Scherzer, O., Grasmair, M., Grossauer, H., Haltmeier, M., and Lenzen, F. (2009). *Variational Methods in Imaging*. Springer. [8](#)
- [Schmidt and Bourguignon, 2019] Schmidt, F. and Bourguignon, S. (2019). Efficiency of BRDF sampling and bias on the average photometric behavior. *Icarus*, 317 :10–26. [53](#), [103](#)
- [Schmidt and Fernando, 2015] Schmidt, F. and Fernando, J. (2015). Realistic uncertainties on Hapke model parameters from photometric measurement. *Icarus*, 260 :73–93. [7](#), [10](#), [34](#), [35](#), [53](#), [55](#)
- [Schröder et al., 2021] Schröder, S. E., Poch, O., Ferrari, M., Angelis, S. D., Sultana, R., Potin, S. M., Beck, P., De Sanctis, M. C., and Schmitt, B. (2021). Dwarf planet (1) Ceres surface bluing due to high porosity resulting from sublimation. *Nature Communications*, 12(1) :274. [78](#)
- [Shepard and Helfenstein, 2007] Shepard, M. K. and Helfenstein, P. (2007). A test of the Hapke photometric model. *Journal of Geophysical Research : Planets*, 112(E3). [8](#), [53](#), [58](#), [95](#)
- [Shkuratov et al., 1999] Shkuratov, Y., Starukhina, L., Hoffmann, H., and Arnold, G. (1999). A Model of Spectral Albedo of Particulate Surfaces : Implications for Optical Properties of the Moon. *Icarus*, 137(2) :235–246. [53](#)
- [Sisson et al., 2018] Sisson, S. A., Fan, Y., and Beaumont, M. (2018). *Handbook of Approximate Bayesian Computation*. CRC Press. [10](#)

- [Sobol, 1967] Sobol, I. M. (1967). On the distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 7(4) :86–112. 20
- [Sobol, 1993] Sobol, I. M. (1993). Sensitivity Estimates for Nonlinear Mathematical Models. *Mathematical Modelling and Computational Experiments*. 99
- [Song et al., 2019] Song, P., Eldar, Y. C., Mazor, G., and Rodrigues, M. R. D. (2019). HYDRA : Hybrid deep magnetic resonance fingerprinting. *Medical Physics*, 46(11) :4951–4969. 9
- [Souchon, 2012] Souchon, A. (2012). *Influence Des Phases Amorphes Dans La Réponse Optique Des Régolites Planétaires : Caractérisation Des Propriétés Physiques et Application à l'étude Géologique de La Lune*. These de doctorat, Toulouse 3. 56
- [Souchon et al., 2009] Souchon, A. L., Chevrel, S. D., Pinet, P. C., Daydou, Y. H., Shevchenko, V. V., Grieger, B., Josset, J. L., Beauvivre, S., Shkuratov, Y., Kaydash, V. G., and Amie Team (2009). Characterization of the Optical Properties of J. Herschel Pyroclastic Deposit Using SMART-1/AMIE Photometric Data. 40 :1237. 53
- [Souchon et al., 2011] Souchon, A. L., Pinet, P. C., Chevrel, S. D., Daydou, Y. H., Baratoux, D., Kurita, K., Shepard, M. K., and Helfenstein, P. (2011). An experimental study of Hapke’s modeling of natural granular surface samples. *Icarus*, 215(1) :313–331. 56
- [Steele et al., 2006] Steele, R. J., Raftery, A. E., and Emond, M. J. (2006). Computing Normalizing Constants for Finite Mixture Models via Incremental Mixture Importance Sampling (IMIS). *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 15(3) :712–734. 39
- [Tarantola, 2005] Tarantola, A. (2005). *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. SIAM. 9
- [Tarantola et al., 1982] Tarantola, A., Valette, B., et al. (1982). Inverse problems : Quest for information. *Journal of Geophysics*, 50(1) :159–170. 7, 56
- [Tripathi et al., 2018] Tripathi, R. P., Dixit, A., and Bhandari, N. (2018). Characterization of Mukundpura Carbonaceous Chondrite. *Current Science*, 114. 72
- [van Dijk and Kloek, 1980] van Dijk, H. K. and Kloek, T. (1980). Further experience in Bayesian analysis using Monte Carlo integration. *Journal of Econometrics*, 14(3) :307–328. 39
- [Virtue et al., 2017] Virtue, P., Yu, S. X., and Lustig, M. (2017). Better than real : Complex-valued neural nets for MRI fingerprinting. In *2017 IEEE International Conference on Image Processing (ICIP)*, pages 3953–3957. 9
- [Vono et al., 2021] Vono, M., Dobigeon, N., and Chainais, P. (2021). Asymptotically Exact Data Augmentation : Models, Properties, and Algorithms. *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 30(2) :335–348. 89
- [Weiss et al., 2000] Weiss, M., Baret, F., Myneni, R. B., Pragnère, A., and Knyazikhin, Y. (2000). Investigation of a model inversion technique to estimate canopy biophysical variables from spectral and directional reflectance data. *Agronomie*, 20(1) :3–22. 9
- [Xu et al., 1995] Xu, L., Jordan, M. I., and Hinton, G. E. (1995). An Alternative Model for Mixtures of Experts. In Tesauro, G., Touretzky, D. S., and Leen, T. K., editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 7*, pages 633–640. MIT Press. 13