
Master thesis : Conservative Simulation-Based Inference with Bayesian Deep Learning

Auteur : de la Brassinne Bonardeaux, Maxence

Promoteur(s) : Louppe, Gilles

Faculté : Faculté des Sciences appliquées

Diplôme : Master : ingénieur civil en science des données, à finalité spécialisée

Année académique : 2023-2024

URI/URL : <http://hdl.handle.net/2268.2/20480>

Avertissement à l'attention des usagers :

Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.

Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.



Master thesis

Completed in order to obtain the degree of Master of Science in Data Science
Engineering

Conservative Simulation-Based Inference with Bayesian Deep Learning

Submitted by

Maxence de la Brassinne Bonardeaux

Academic Year: 2023-2024

University of Liège

Faculty of Applied Sciences

University supervisor: Pr. Gilles Louppe

Abstract

Simulation-Based Inference (SBI) involves estimating parameters θ of a simulator that are compatible with the observations \mathbf{x} without evaluating the likelihood of the data. Currently, the best solutions for SBI are neural SBI methods, which are trained using datasets built with simulations. However, simulations can be computationally expensive in fields like meteorology or cosmology. Consequently, SBI methods can operate in a data-poor regime in these fields. When only a limited number of simulations are available, traditional SBI methods tend to be overconfident due to neural methods overfitting the data. This overfitting leads to computational uncertainty, as many neural networks may fit the training data equally well but perform differently on the test data.

This thesis introduces a method using Bayesian Deep Learning (BDL) to account for computational uncertainty in SBI. We design a family of Bayesian Neural Network (BNN) priors that yield conservative results with as few as 10 samples, setting it apart from all other SBI methods. We demonstrate that the use of BDL in SBI produces informative and conservative posterior distribution estimates with only a few hundred simulations on a cosmological application. This advancement allows for drawing reliable scientific conclusions using our method, even when the number of available simulations is limited.

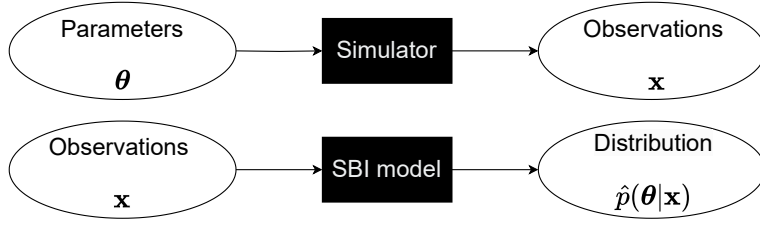


Figure 1: The SBI challenge: Inference of parameters θ that are compatible with the observations \mathbf{x} . We rely solely on pairs (θ, \mathbf{x}) generated by the simulator or gathered from data collection.

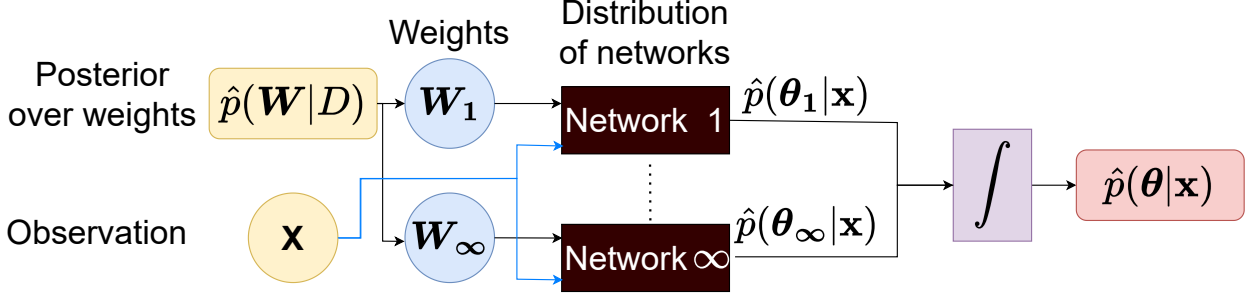


Figure 2: Principle of Bayesian Neural Network. Instead of using a single network to approximate the posterior, a distribution of networks compatible with the data is used to generate a conservative distribution.

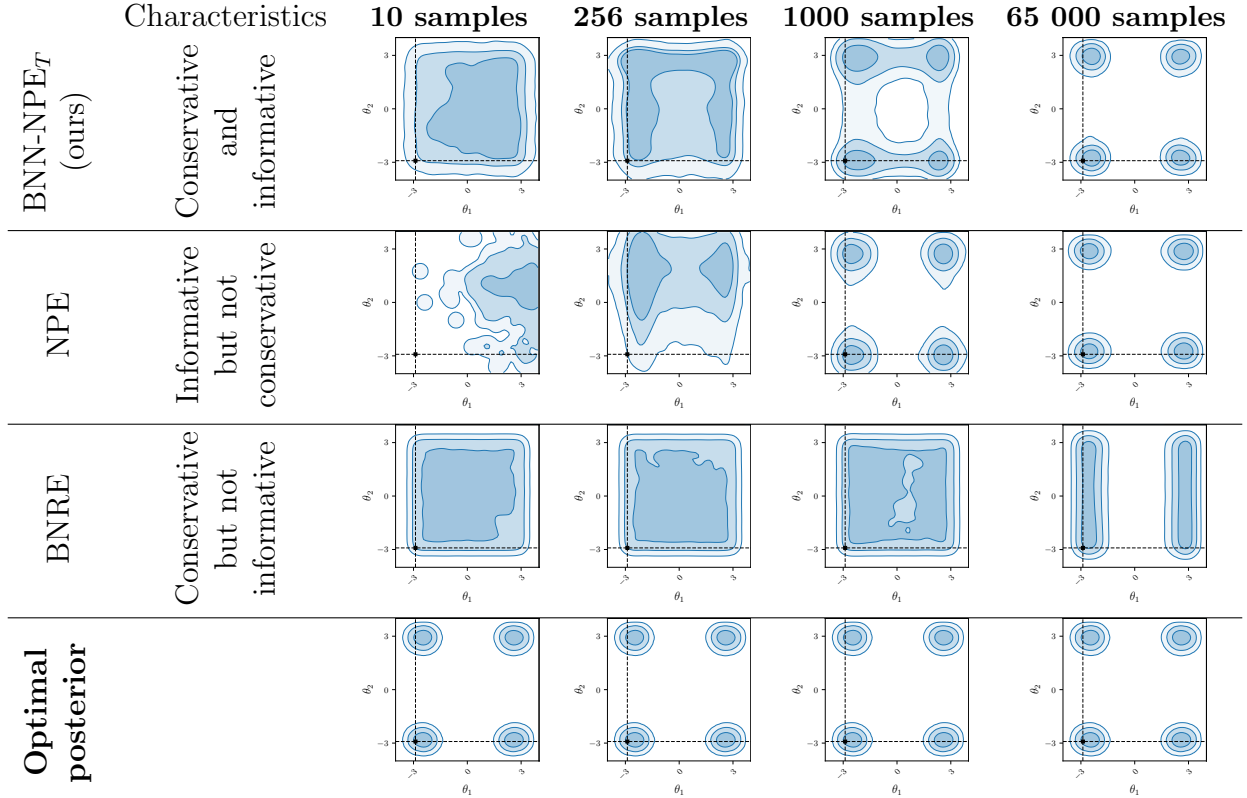


Figure 3: Comparison between our method (BNN-NPE_T) with a traditional method (NPE) and a conservative method (BNRE) depending on the number of simulations available on the SLCP benchmark. Traditional methods provide informative results but are overconfident in data-poor regimes. BNRE is conservative and reliable but produce less informative distributions in most cases. Our method has both advantages as it produces conservative and informative distributions.