贝叶斯反问题的适定性

黄政宇
北京大学北京国际数学研究中心
北京大学国际机器学习研究中心

本堂课大纲

- 贝叶斯统计
  - 贝叶斯学派
  - 条件概率
  - 后验分布
  - 统计估计

- 贝叶斯反问题的适定性
  - 存在唯一性
  - 连续性

频率派统计与贝叶斯统计

- 频率派（Frequentist）统计：假设参数是固定的，存在唯一真值，通过**大量重复实验**估计其值。
- 贝叶斯（Bayesian）统计：假设参数是随机的，通过**现有知识**和数据更新其分布。

抛硬币，估计抛硬币正面朝上的概率θ

频率学派: 抛一枚硬币100次，有48次正面朝上，$\theta = \frac{48}{100} = 0.48$； 抛掷5次，出现5次正面(稀有事件发生)，$\theta = 1$。

贝叶斯学派: 将θ看作是一个随机变量。最初，这个变量遵循先验分布（开始进行抛掷硬币之前我们对于 θ 的知识），我们将会在每次试验之后更新这个分布。

贝叶斯统计

- 贝叶斯统计

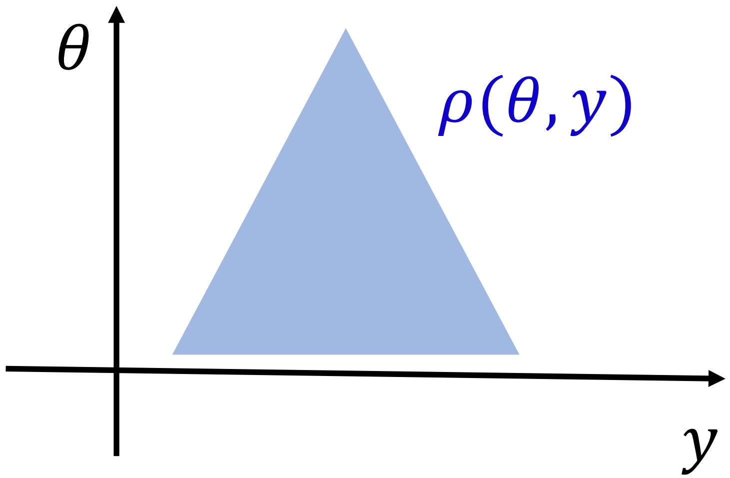
  - 先验分布（先验知识）
  - 是一种信念(belief)，它将会随着观测数据的增加而不断被更新

明天下雨的概率θ？
一种疾病生还的概率 θ？

θ并没有真实值（难以得到），且样本有限

贝叶斯公式

联合概率分布： $\rho(\theta,y)$



边缘分布： $\rho(y)=\int\rho(\theta,y)d\theta$

$$\rho(\theta)=\int\rho(\theta,y)dy$$

条件分布： $\rho(\theta|y)=\frac{\rho(\theta,y)}{\rho(y)}$

$$\rho(y|\theta)=\frac{\rho(\theta,y)}{\rho(\theta)}$$

贝叶斯公式： $\rho(\theta|y)=\frac{\rho(\theta,y)}{\rho(y)}=\frac{\rho(y|\theta)\rho(\theta)}{\rho(y)}$

贝叶斯定理

- 例子

假设某种罕见疾病（比如某种遗传病）的实际患病率是0.5%，而该疾病的检测手段的灵敏度为99%，但误报率也为1%。问检测为阳性（+）时，该人实际患病的概率是多少？

贝叶斯公式：

$$\rho(\text{患病}|+) = \frac{\rho(+|\text{患病})\rho(\text{患病})}{\rho(+)}$$

$$= \frac{\rho(+|\text{患病})\rho(\text{患病})}{\rho(+|\text{患病})\rho(\text{患病}) + \rho(+|\text{不患病})\rho(\text{不患病})}$$

$$= \frac{99\%0.5\%}{99\%0.5\% + 1\%(1 - 0.5\%)}$$

$$= 33.22\%$$

后验分布

- 数学模型

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta$$

- 贝叶斯公式

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) = \rho(\theta|y) = \frac{\rho(\theta, y)}{\int \rho(\theta, y) d\theta} = \frac{\rho(y|\theta)\rho_{\text{prior}}(\theta)}{\int \rho(\theta, y) d\theta}$$

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) = \frac{1}{Z}\rho(y|\theta)\rho_{\text{prior}}(\theta) \qquad Z = \int \rho(y|\theta)\rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta$$

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) \propto \rho(y|\theta)\rho_{\text{prior}}(\theta)$$

$\propto$ 正比于

后验分布

- 数学模型

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta$$

- 似然函数 (likelihood)

假设我们已知噪声分布 $\eta \sim \rho_\eta$

$$L(\theta; y) := \rho(y|\theta) = \rho_\eta(y - \mathcal{G}(\theta))$$

- 后验分布 (posterior)

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) = \frac{1}{Z}\rho_\eta\big(y - \mathcal{G}(\theta)\big)\rho_{\text{prior}}(\theta)$$

$$Z = \int \rho_\eta\big(y - \mathcal{G}(\theta)\big)\rho_{\text{prior}}(\theta)\mathrm{d}\theta$$

θ的估计

- 后验分布

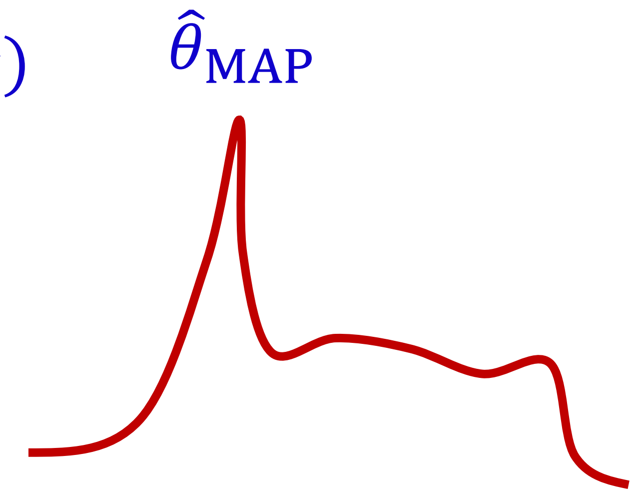
$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) \propto L(\theta; y)\rho_{\text{prior}}(\theta)$$

- 最大似然估计(maximum likelihood estimation, MLE)

$$\hat{\theta}_{\text{MLE}} = \operatorname{argmax}_{\theta} L(\theta; y)$$

- 最大后验估计(maximum a posteriori estimation, MAP)

$$\hat{\theta}_{\text{MAP}} = \operatorname{argmax}_{\theta} \rho_{\text{post}}(\theta; y)$$



- 后验期望

$$\hat{\theta} = \int \theta \rho_{\text{post}}(\theta; y)\, \mathrm{d}\theta$$

高斯分布

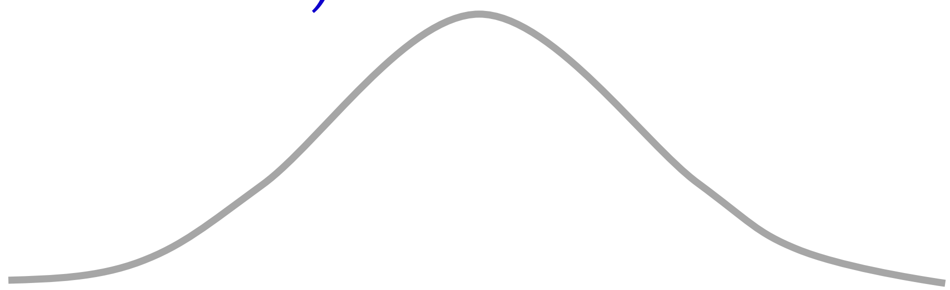
$$\mathcal{N}(x;m,C)=\frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-m)^T C^{-1}(x-m)\right)$$

$$Z=\sqrt{|2\pi C|}=(2\pi)^{N_\theta/2}\sqrt{|C|}$$

能直接计算

$$\mathcal{N}(x;m,C)\propto\exp\left(-\frac{1}{2}(x-m)^T C^{-1}(x-m)\right)$$

$$=\exp\left(-\frac{1}{2}\parallel C^{-\frac{1}{2}}(x-m)\parallel^2\right)$$



$$m=\mathrm{argmax}_x\mathcal{N}(x;m,C)$$

后验分布（高斯假设）

- 数学模型(高斯噪声)

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta \qquad \eta \sim \mathcal{N}(x; 0, \Sigma_\eta)$$

- 似然函数

$$\rho(y|\theta) = \mathcal{N}(y; \mathcal{G}(\theta), \Sigma_\eta) \propto e^{-\Phi(\theta, y)}$$

$$\Phi(\theta, y) = \frac{1}{2} \| \Sigma_\eta^{-\frac{1}{2}} (y - \mathcal{G}(\theta)) \|^2$$

- 后验分布（高斯先验分布 $\rho_{\text{prior}}(\theta) = \mathcal{N}(\theta; r_0, \Sigma_0)$）

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) \propto e^{-\Phi_R(\theta, y)}$$

$$\Phi_R(\theta, y) = \Phi(\theta, y) + \frac{1}{2} \| \Sigma_0^{-\frac{1}{2}} (\theta - r_0) \|^2$$

θ的估计（高斯假设）

- 数学模型(高斯噪声、高斯先验)

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta \qquad \eta \sim \mathcal{N}\left(x; 0, \Sigma_\eta\right) \quad \rho_{\text{prior}}(\theta) = \mathcal{N}(\theta;\, r_0, \Sigma_0)$$

- 最大似然估计 $L(\theta; y) \propto e^{-\Phi(\theta, y)}$

$$\hat{\theta}_{\text{MLE}} = \text{argmin}_\theta \frac{1}{2} \| \Sigma_\eta^{-\frac{1}{2}} (y - \mathcal{G}(\theta)) \|^2$$

- 最大后验估计 $\rho_{\text{post}}(\theta; y) \propto e^{-\Phi_R(\theta, y)}$ 正则项

$$\hat{\theta}_{\text{MAP}} = \text{argmin}_\theta \frac{1}{2} \| \Sigma_\eta^{-\frac{1}{2}} (y - \mathcal{G}(\theta)) \|^2 + \frac{1}{2} \| \Sigma_0^{-\frac{1}{2}} (\theta - r_0) \|^2$$

后验分布

➢ 练习

$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta \qquad \theta = [\theta_1; \theta_2] \qquad \mathcal{G}(\theta) = \theta_1^2 + \theta_2^2$

观测： $y > 0$

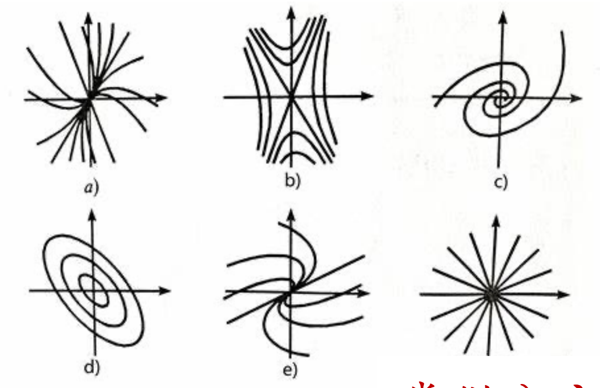
噪声： $\eta \sim \mathcal{N}(0, \gamma^2)$

1. 计算最大似然估计
2. 假设$\rho_{\text{prior}}(\theta) = \mathcal{N}(\theta; 0, c^2\gamma^2 I)$，计算最大后验估计
3. 假设$0 < \rho_{\text{prior}}(\theta) \le \rho_{max} < \infty$，探究当$\gamma \to 0$时，后验分布的变化

适定性

- 物理现象中的数学模型

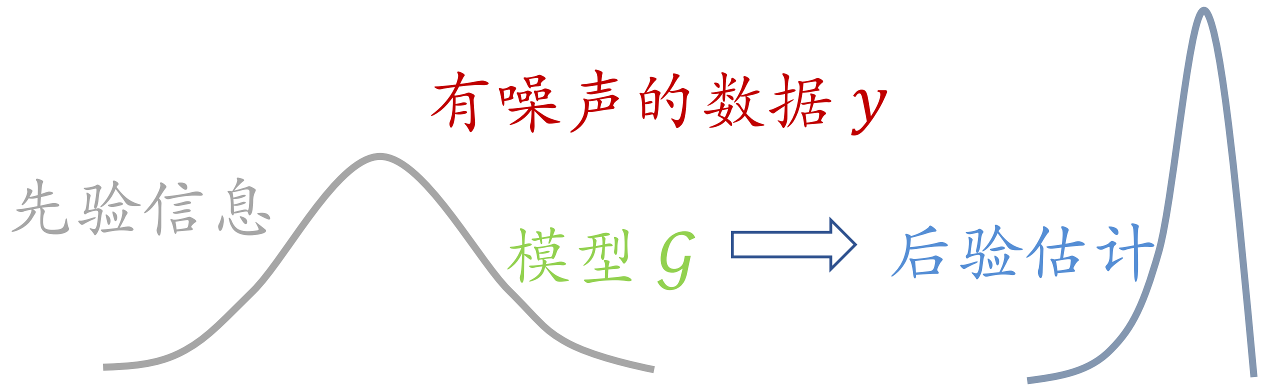
  - 解的存在性
  - 解的唯一性
  - 解连续地取决于初边值条件



常微分方程

- 贝叶斯反问题

  -后验分布的存在性
  -后验分布的唯一性
  -后验分布连续地取决于$y, \mathcal{G}, \rho_\eta, \rho_{\mathrm{prior}}$



存在唯一性

存在性定理

对于贝叶斯反问题

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta \qquad \eta \sim \rho_\eta \qquad \theta \sim \rho_{\text{prior}}$$

假设

θ 和 η 独立

$$Z = \int \rho_\eta\big(y - \mathcal{G}(\theta)\big)\rho_{\text{prior}}(\theta)\mathrm{d}\theta > 0$$

那么后验分布存在

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) = \frac{1}{Z}\rho_\eta\big(y - \mathcal{G}(\theta)\big)\rho_{\text{prior}}(\theta)$$

连续性

- 欧式空间中函数的连续性

$$\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0, s.t.$$
$$|x_\delta - x| < \delta \Rightarrow |f(x_\delta) - f(x)| < \epsilon$$

- 后验分布的连续性

$$\forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0, s.t.$$
$$|\mathcal{G}_\delta - \mathcal{G}| < \delta \Rightarrow \mathcal{D}(\rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G}_\delta), \rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G})) < \epsilon$$

数值离散

$\mathcal{D}(\rho_A, \rho_B)$: 概率密度空间的距离

连续性

- 例子

考虑如下常微分方程描述的系统

$$\frac{dx}{dt} = f(x,\theta) \qquad x(0) = x_0$$

贝叶斯反问题

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta \qquad y = x(1), \quad \eta \sim \mathcal{N}\left(x; 0, \sigma_\eta^2 I\right)$$

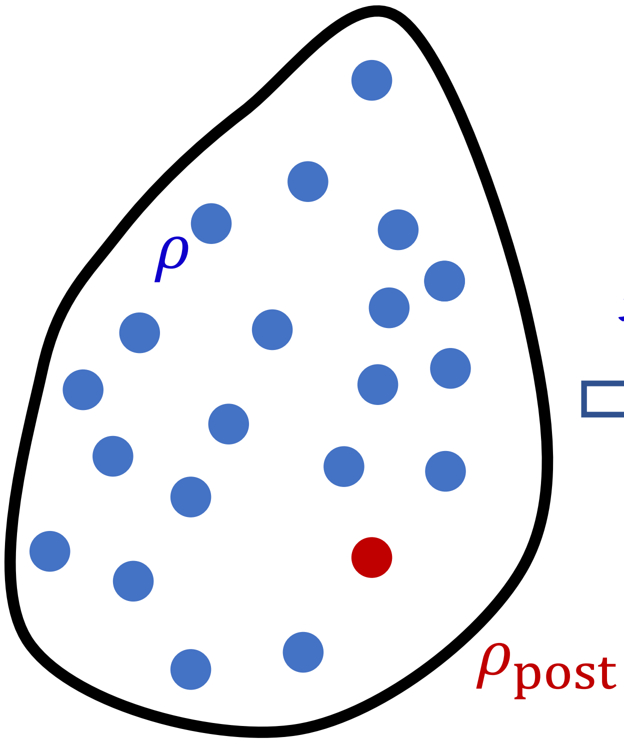
基于向前欧拉方法

$$x_{n+1} = x_n + \delta f(x_n,\theta) \qquad \delta = \frac{1}{N} \qquad \mathcal{G}_\delta(\theta) := x_N$$

的贝叶斯反问题

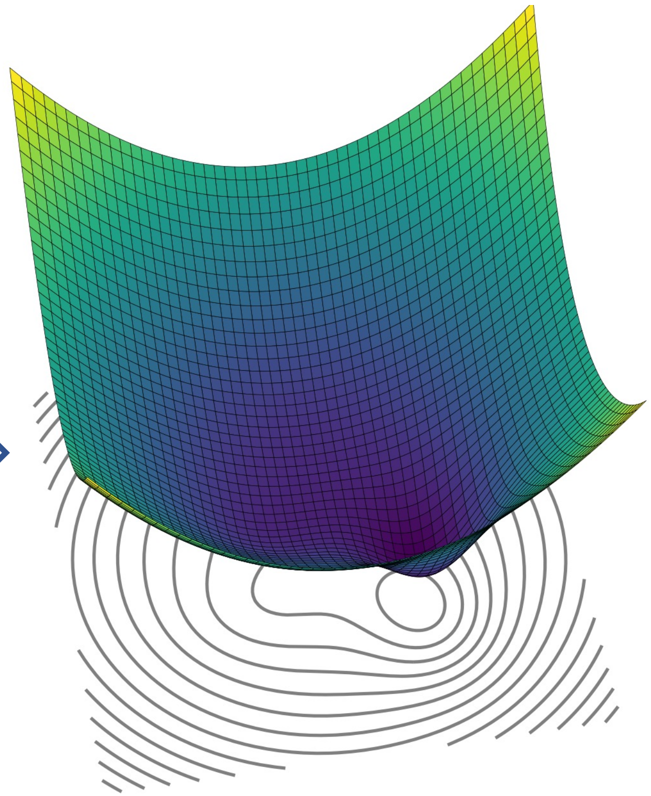
$$y = \mathcal{G}_\delta(\theta) + \eta$$

概率密度函数空间



度量 $M(\rho)$

距离 $\mathcal{D}(\rho_A, \rho_B)$



概率密度空间$\mathcal{P}$

度量空间$(\mathcal{P}, M(\rho))$

概率密度函数空间

- 海林格 (Hellinger) 距离

$$\mathcal{D}_{\mathrm{H}}(\rho_A, \rho_B) := \left(\frac{1}{2}\int \left|\sqrt{\rho_A(\theta)} - \sqrt{\rho_B(\theta)}\right|^2 d\theta\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\|\sqrt{\rho_A(\theta)} - \sqrt{\rho_B(\theta)}\right\|_{L_2}$$

适定性

适定性定理

对于贝叶斯反问题

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta \qquad \eta \sim \rho_\eta \qquad \theta \sim \rho_{\text{prior}}$$

定义

$$L(\theta) := \rho_\eta(y - \mathcal{G}(\theta)) \qquad L_\delta(\theta) := \rho_\eta(y - \mathcal{G}_\delta(\theta))$$

假设存在$K_1, K_2 > 0, \delta^+ > 0$, 对任意$\delta \in (0, \delta^+)$

i) $\left|\sqrt{L(\theta)} - \sqrt{L_\delta(\theta)}\right| \leq \varphi(\theta)\delta,\ \ \mathbb{E}_{\theta\sim\rho_{\text{prior}}}[\varphi(\theta)^2] \leq K_1^2$

ii) $\sup_\theta \left(\sqrt{L(\theta)} + \sqrt{L_\delta(\theta)}\right) \leq K_2$

那么存在$\Delta > 0, c > 0$，后验分布满足

$$\mathcal{D}_H\left(\rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G}_\delta), \rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G})\right) < c\delta \quad \forall \delta \in (0, \Delta)$$

> 练习

考虑如下常微分方程描述的系统

$$\frac{\mathrm{d}x}{dt} = f(x,\theta) \qquad x(0) = x_0$$

贝叶斯反问题

$$y = \mathcal{G}(\theta) + \eta \qquad y = x(1), \quad \eta \sim \mathcal{N}\left(x; 0, \sigma_\eta^2 I\right)$$

假设一致有界和Lipschitz连续，即存在常数$f_{\max}$：

$$|f(x,\theta)|, |\partial_x f(x,\theta)| < f_{\max} \qquad \forall\, x, \theta$$

$$|f(x,\theta) - f(x',\theta)| < f_{\max}|x - x'| \qquad \forall\, x, x', \theta$$

基于向前欧拉方法的贝叶斯反问题

$$y = \mathcal{G}_\delta(\theta) + \eta$$

能近似出θ的后验分布。