数学基础

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

- 课程内容简介
  - 概率测度空间
  - 概率测度空间的度量
  - 随机过程

概率测度空间

- 空间
  - 点的集合，比如欧式空间R^2

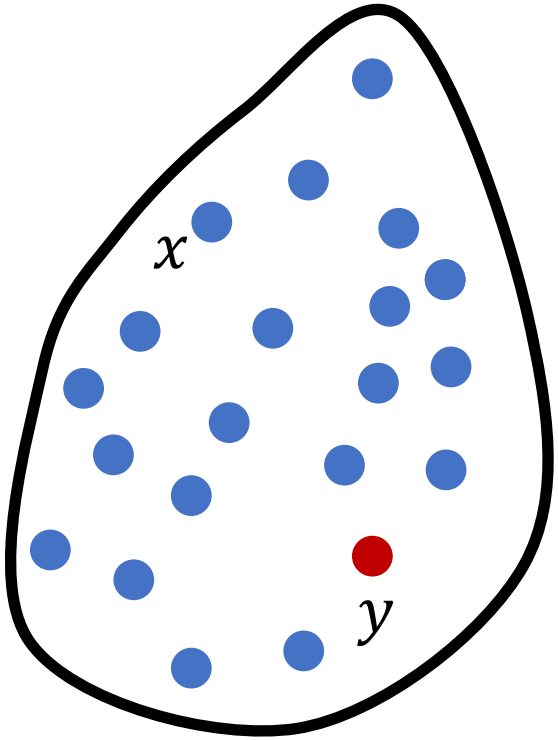
- 度量空间 X
  - 定义任何两个元素之间有距离

非负性：$d(x,y) \geq 0$

且 $d(x,y)=0$等价于$x=y$

对称性：$d(x,y)=d(y,x)$

三角不等式：$d(x,y) \leq d(x,z)+d(z,y)$



度量空间 X

⇒

拓扑空间：开集、闭集等

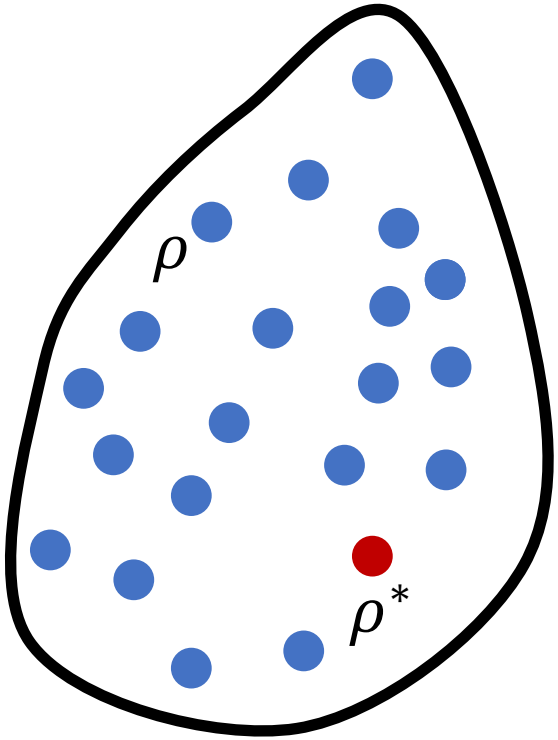
连续映射：$f: X_1 \to X_2$ 连续 $\Leftrightarrow$ 任意X_2中的开集U，$f^{-1}(U)$是X_1中的开集

概率测度空间

- 概率测度空间

点的集合 $\{\rho: R^d \to R\}$

- $\rho(x) \geq 0$
- $\int \rho(x)dx = 1$
- $\rho \in C^\infty(R^d)$



概率测度空间$\mathcal{P}$

注：除非特殊说明，本课程假设概率测度的密度函数存在

概率测度空间

- 参数化的概率测度空间

高斯密度空间 $\{(m, C), C \succ 0\}$

$$\rho(\theta) = \mathcal{N}(\theta; m, C)$$

简化的高斯密度空间 $\{(m, \delta), \delta > 0\}$

$$\rho(\theta) = \mathcal{N}(\theta; m, \delta^2 I)$$

混合高斯近似 $\{(w_k,\ m_k,\ C_k)_{k=1}^K, C_k \succ 0, w_k \geq 0\}$

$$\rho(\theta) = \sum_{k=1}^K w_k \mathcal{N}(\theta; m_k, C_k) \qquad \sum_{k=1}^K w_k = 1$$

……

概率测度空间

- 推前算子 (pushforward operator)

可测函数：

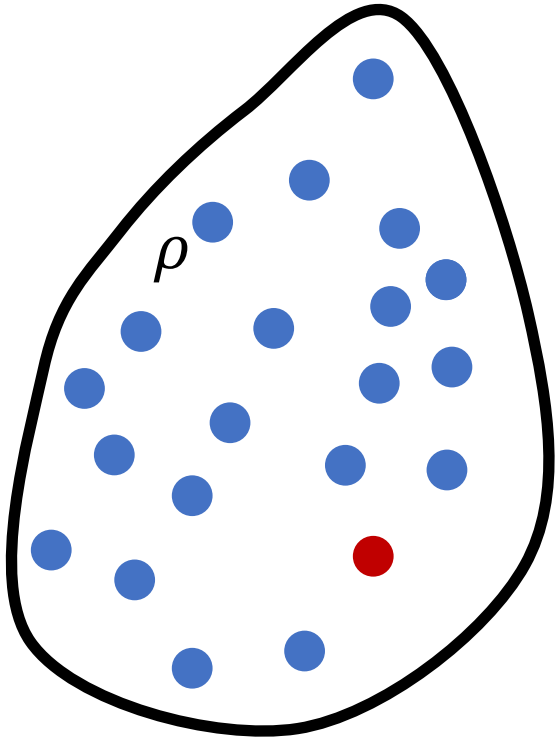
$$T: R^d \to R^d$$

推前算子：

$$T_{\#}: \mathcal{P} \to \mathcal{P}$$

$T_{\#}\rho$是一个概率密度函数：

$$\int_{y \in A} T_{\#}\rho(y)dy = \int_{Tx \in A} \rho(x)dx$$



概率测度空间$\mathcal{P}$

概率测度空间的度量

- 距离函数

  - 全变差距离 (total variation)

$$d_{TV}(\rho,\rho') = \frac{1}{2}\int |\rho - \rho'|\, d\theta = \frac{1}{2}\|\rho - \rho'\|_{L_1}$$

  - 海林格 (Hellinger) 距离

$$d_H(\rho,\rho') = \left(\frac{1}{2}\int \left|\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho'}\right|^2 d\theta\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\|\sqrt{\rho} - \sqrt{\rho'}\right\|_{L_2}$$

- 练习

  验证d_{TV}和d_H是距离

概率测度空间的度量

- 练习

  - 良定性

$$0 \le d_{TV}(\rho,\rho') \le 1 \qquad 0 \le d_H(\rho,\rho') \le 1$$

  - 等价性

$$\frac{1}{\sqrt{2}} d_{TV}(\rho,\rho') \le d_H(\rho,\rho') = \sqrt{d_{TV}(\rho,\rho')}$$

  - 其它估计

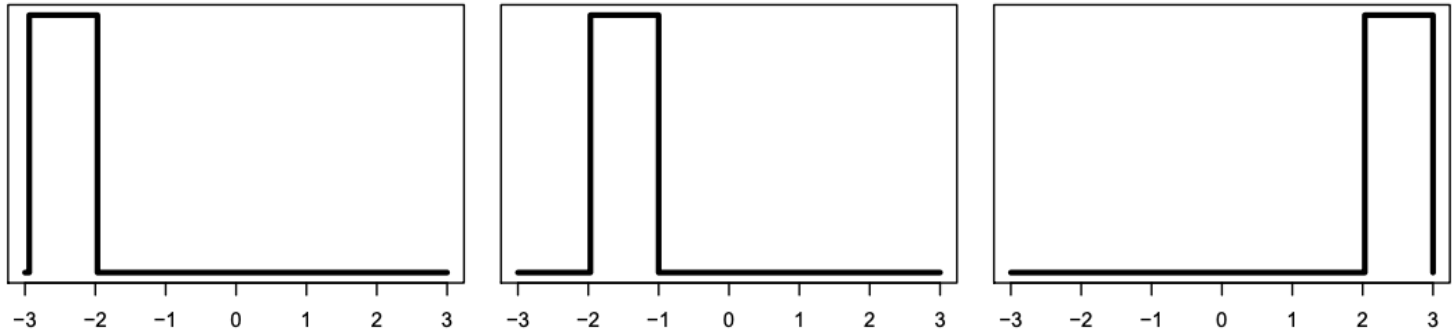
$$d_{TV}(\rho,\rho') = \frac{1}{2} \sup_{|f|_\infty \le 1} \left| \mathbb{E}_\rho[f] - \mathbb{E}_{\rho'}[f] \right|$$

$$\left| \mathbb{E}_\rho[f] - \mathbb{E}_{\rho'}[f] \right| \le 2|f|_\infty d_{TV}(\rho,\rho')$$

$$\left| \mathbb{E}_\rho[f] - \mathbb{E}_{\rho'}[f] \right| \le 2\left(\mathbb{E}_\rho[f^2] + \mathbb{E}_{\rho'}[f^2] \right)^{\frac{1}{2}} d_H(\rho,\rho')$$

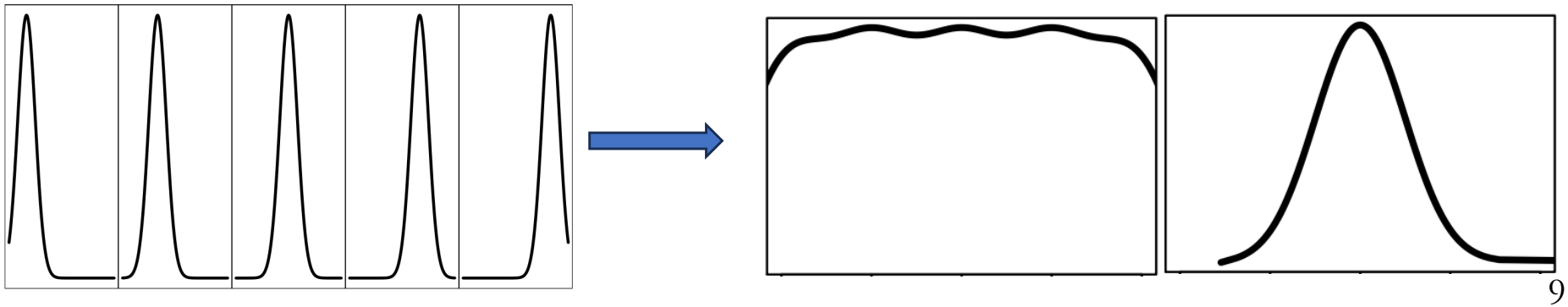
概率测度空间的度量

- 这些距离函数的问题
  - 并没有考虑概率测度空间的几何性质



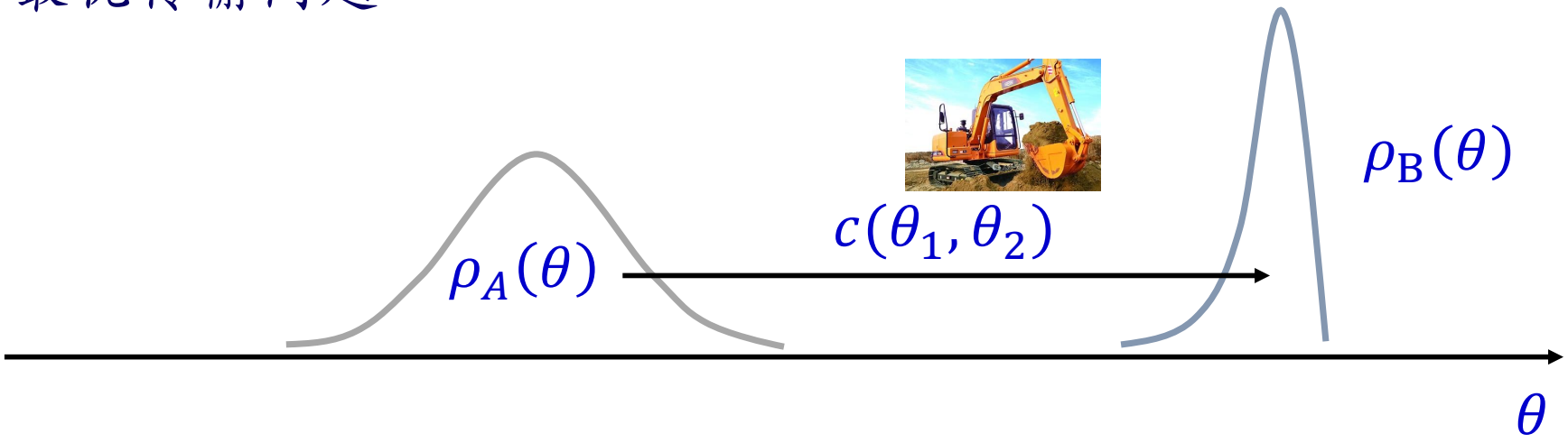
$$d(\rho_1, \rho_2) = d(\rho_1, \rho_3)$$

  - 当我们对不同的对象(如概率分布或图像)求平均(质心)，希望得到的结果仍然是一个相似的对象



最优传输问题

- 最优传输问题



$$\inf_T \iint c(\theta, T(\theta))\rho_A(\theta)d\theta$$

$$T_{\#}\rho_A = \rho_B$$

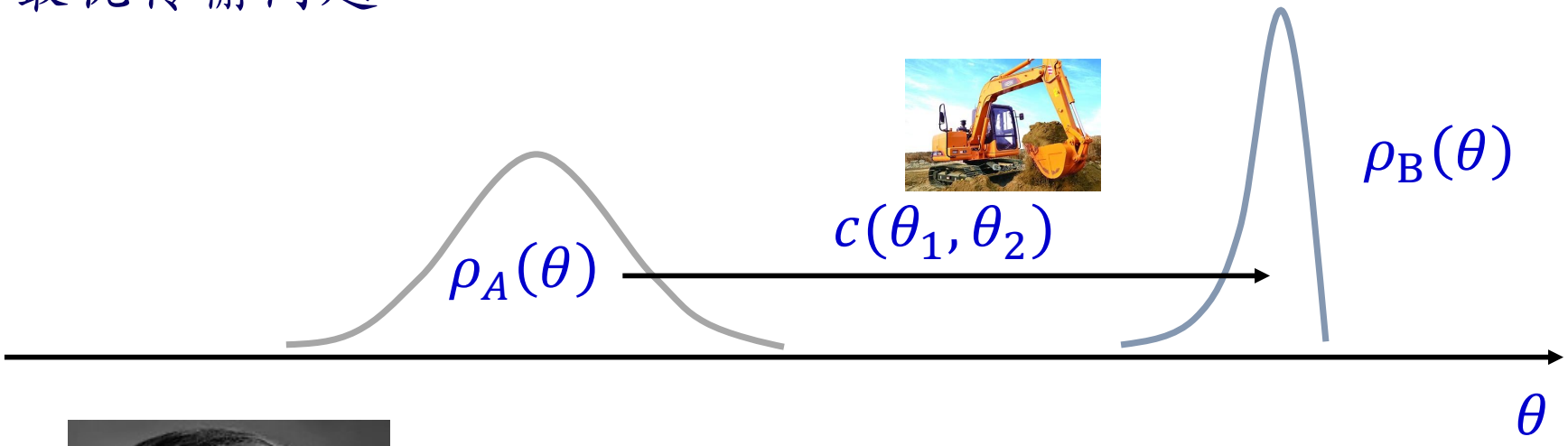
对于一般测度，
解不一定存在！

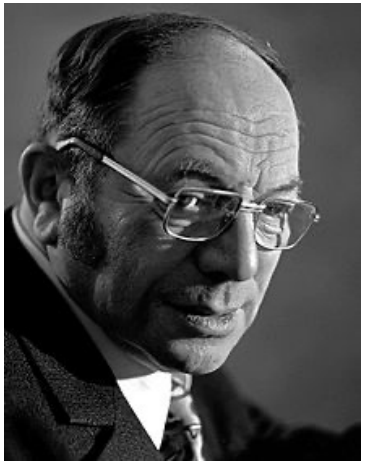
Monge 问题 (1781)

T^*:最优传输映射 (optimal transport map)

最优传输问题

- 最优传输问题





Kantorovich 问题 (1942)

γ^*:最优耦合 (optimal coupling、optimal transport plan)

$$\inf_{\gamma} \iint \gamma(\theta_1, \theta_2) c(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2$$

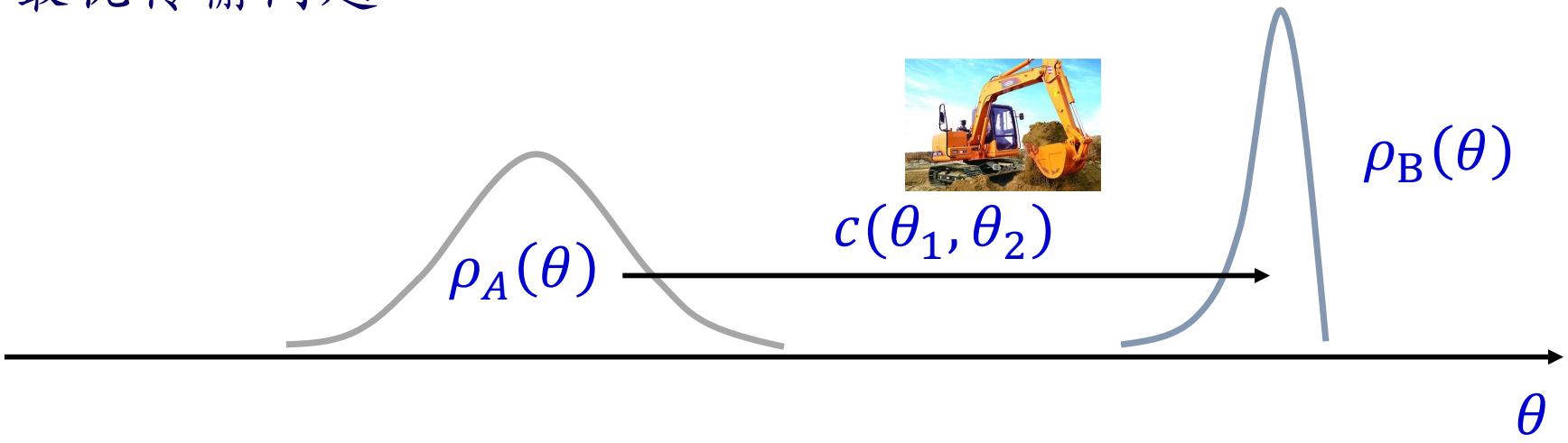
$$\int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_2 = \rho_A(\theta_1)$$

$$\int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_1 = \rho_B(\theta_2)$$

$$\gamma(\theta_1, \theta_2) \geq 0$$

最优传输问题

- 最优传输问题



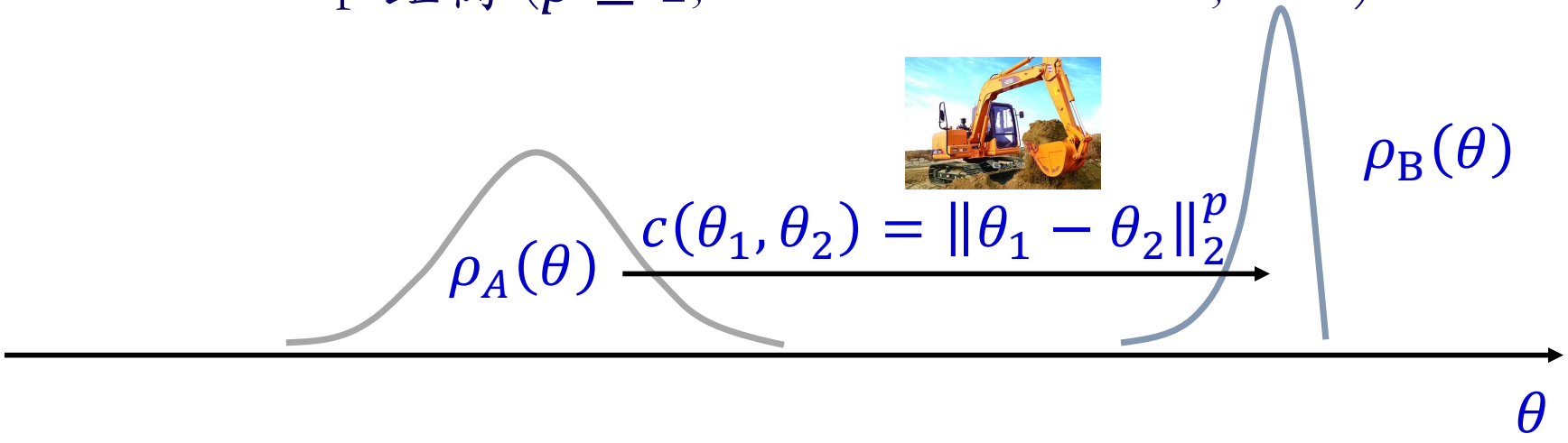
Kantorovich 对偶问题

$$\sup_{f,g} \int \rho_A(\theta) f(\theta) + \rho_B(\theta) g(\theta) d\theta$$

$$f(\theta_1) + g(\theta_2) \leq c(\theta_1, \theta_2)$$

概率测度空间的度量

- Wasserstein-p 距离 ($p \geq 1$, Leonid Vasershtein, 1969)



$$W_p(\rho_A, \rho_B) = \inf_{\gamma} \left(\iint \gamma(\theta_1, \theta_2) \|\theta_1 - \theta_2\|_2^p d\theta_1 d\theta_2 \right)^{1/p}$$

$$\int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_2 = \rho_A(\theta) \quad \int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_1 = \rho_B(\theta)$$

$$\gamma(\theta_1, \theta_2) \geq 0$$

概率测度空间的度量

- Wasserstein-1距离 (Earth Mover distance)

$$c(\theta_1, \theta_2) = \| \theta_1 - \theta_2 \|_2$$

成本函数是欧几里得距离，更贴近物理运输成本

- Wasserstein-2距离

$$c(\theta_1, \theta_2) = \|\theta_1 - \theta_2\|_2^2$$

成本函数是平方距离，导致它的优化目标更倾向于短距离的调整，更适用于平滑变形。多用于描述流体动力学、几何优化

Wasserstein-1距离

Kantorovich 对偶问题

一般的最优输运问题可以转化为

$$\sup_{f,g} \int \rho_A(\theta) f(\theta) + \rho_B(\theta) g(\theta) d\theta$$

$$f(\theta_1) + g(\theta_2) \leq c(\theta_1, \theta_2)$$

当$c(\theta_1, \theta_2) = \| \theta_1 - \theta_2 \|_2$，我们有

$$W_1(\rho_A, \rho_B) = \sup_{h} \int \rho_A(\theta) h(\theta) - \rho_B(\theta) h(\theta) d\theta$$

$$|h(\theta_1) - h(\theta_2)| \leq \| \theta_1 - \theta_2 \|_2$$

Wasserstein-2距离

Brenier 定理

ρ_A和ρ_B是两个概率密度函数，对于Kantorovich问题,

$$\gamma^* = \inf_{\gamma} \iint \gamma(\theta_1, \theta_2) \|\theta_1 - \theta_2\|_2^2 d\theta_1 d\theta_2$$

$$\int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_2 = \rho_A(\theta_1) \quad \int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_1 = \rho_B(\theta_2)$$

$$\gamma(\theta_1, \theta_2) \geq 0$$

那么存在一个凸函数 $\varphi: R^d \to R$，使得$\big(\theta, \nabla\varphi(\theta)\big) \sim \gamma^*$。
且如果存在凸函数 $\psi: R^d \to R$，使得$\nabla\varphi(\theta) \sim \rho_B$，那么几乎处处$\nabla\varphi = \nabla\psi = T$(Monge 问题)。

注：这里ρ_B可以换成概率测度 μ_B

Wasserstein-2距离

测地线

对于Kantorovich问题,

$$\gamma^* = \inf_{\gamma} \iint \gamma(\theta_1, \theta_2) c(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2$$

$$\int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_2 = \rho_A(\theta_1) \quad \int \gamma(\theta_1, \theta_2)\, d\theta_1 = \rho_B(\theta_2)$$

$$\gamma(\theta_1, \theta_2) \geq 0$$

定义

$$T_t(\theta_1, \theta_2) = (1-t)\theta_1 + t\theta_2$$

那么

$$\rho_t = T_{t\#}\gamma^*$$

是连接ρ_A和ρ_B的匀速测地线 (constant-speed geodesic)。

Wasserstein-2距离

动力学观点 (Dynamic formulation, Benamou,Brenier,1999)

$$W_2^2(\rho_A, \rho_B) = \inf_{v_t} \int_0^1 \int \| v_t(\theta) \|_2^2 \, \rho_t(\theta) d\theta dt$$

$$\frac{\partial \rho_t}{\partial t} + \nabla_\theta \cdot (\rho_t v_t) = 0$$

$$\rho(0, \theta) = \rho_A(\theta) \qquad \rho(1, \theta) = \rho_B(\theta)$$

ρ_t为连接ρ_A和ρ_B的匀速测地线。

概率测度空间的度量

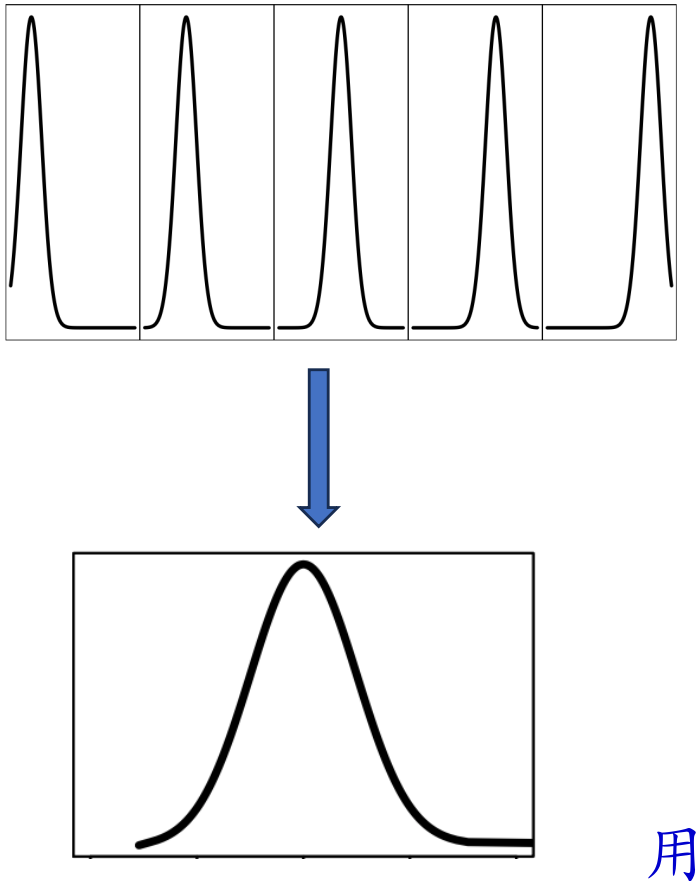
- 测地线

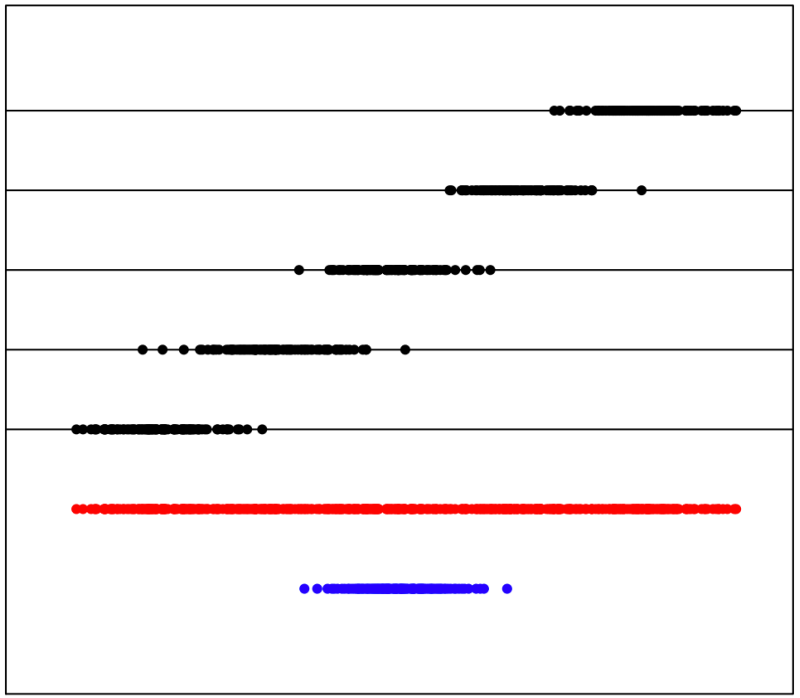
在数据处理中，用于理解和预测数据插值和演变

概率测度空间的度量

- Wasserstein 重心 (barycenter)

$$\rho^* = \mathrm{argmin}_\rho \sum_{j=1}^{m} W_p^p(\rho, \rho_j)$$





用于图像平均、分布对齐等

概率测度空间的“伪度量”

- f-散度

$$D_f[\rho \parallel \rho^*] = \int \rho^* f\left(\frac{\rho}{\rho^*}\right) d\theta$$

其中f是凸函数，$f(1) = 0$。

琴生不等式：

$$\mathbb{E}_{\rho^*}\left[f\left(\psi(\theta)\right)\right] \geq f\left(\mathbb{E}_{\rho^*}[\psi(\theta)]\right)$$

$$\sum_j \rho^*(\theta_j) d\theta f\left(\psi(\theta_j)\right) \geq f\left(\sum_j \rho^*(\theta_j) d\theta \psi(\theta_j)\right)$$

因此

$$D_f[\rho \parallel \rho^*] \geq 0$$

概率测度空间的“伪度量”

- KL-散度

$$f = x\ \log x \qquad \mathrm{KL}[\rho \parallel \rho^*] = \int \rho \log\left(\frac{\rho}{\rho^*}\right) d\theta$$

$$\mathrm{KL}[\rho \parallel Z\rho^*] = \mathrm{KL}[\rho \parallel \rho^*] - \log(Z)$$

- 反向 KL-散度

$$f = -\log x \qquad \mathrm{KL}[\rho^* \parallel \rho] = \int \rho^* \log\left(\frac{\rho^*}{\rho}\right) d\theta$$

- χ^2-距离

$$f = (x-1)^2 \qquad \chi^2[\rho \parallel \rho^*] = \int \frac{\rho^2}{\rho^*} d\theta - 1$$

概率测度空间的“伪度量”

- 最大均值差异(maximum mean discrepancy)

给点任意函数类F

$$\mathrm{MMD}[\rho,\rho^*]=\sup_{f\in F}\left(\mathbb{E}_\rho[f(\theta)]-\mathbb{E}_{\rho^*}[f(\theta)]\right)$$

离散情况：

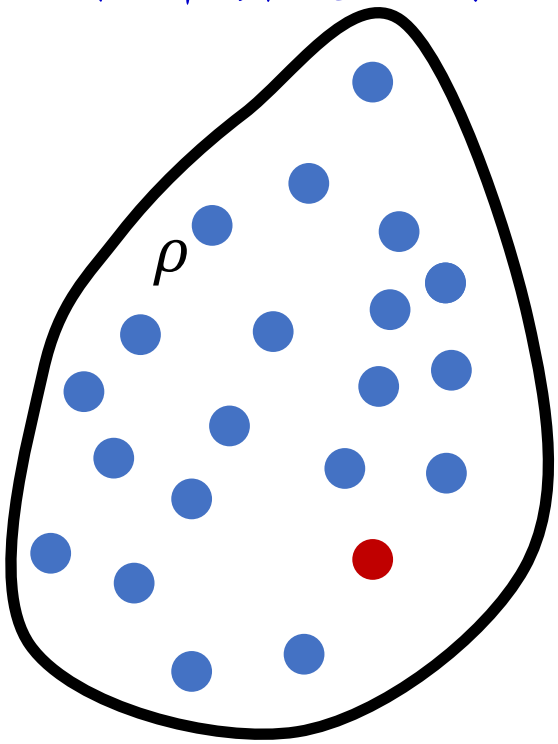
$$\mathrm{MMD}[\mathrm{X},X^*]=\sup_{f\in F}\left(\frac{1}{m}\sum_i f(x_i)-\frac{1}{n}\sum_i f(x_i^*)\right)$$

$F=\{f:|f|_\infty\leq 1\}$，$F=\mathrm{span}\{x,x^2\}\cdots\cdots$

概率测度空间

- 概率密度空间
  - 点的集合 $\{\rho: R^d \to R\}$
  - $\rho(x) \geq 0$
  - $\int \rho(x)dx = 1$
  - $\rho \in C^\infty(R^d)$

概率密度空间$\mathcal{P}$

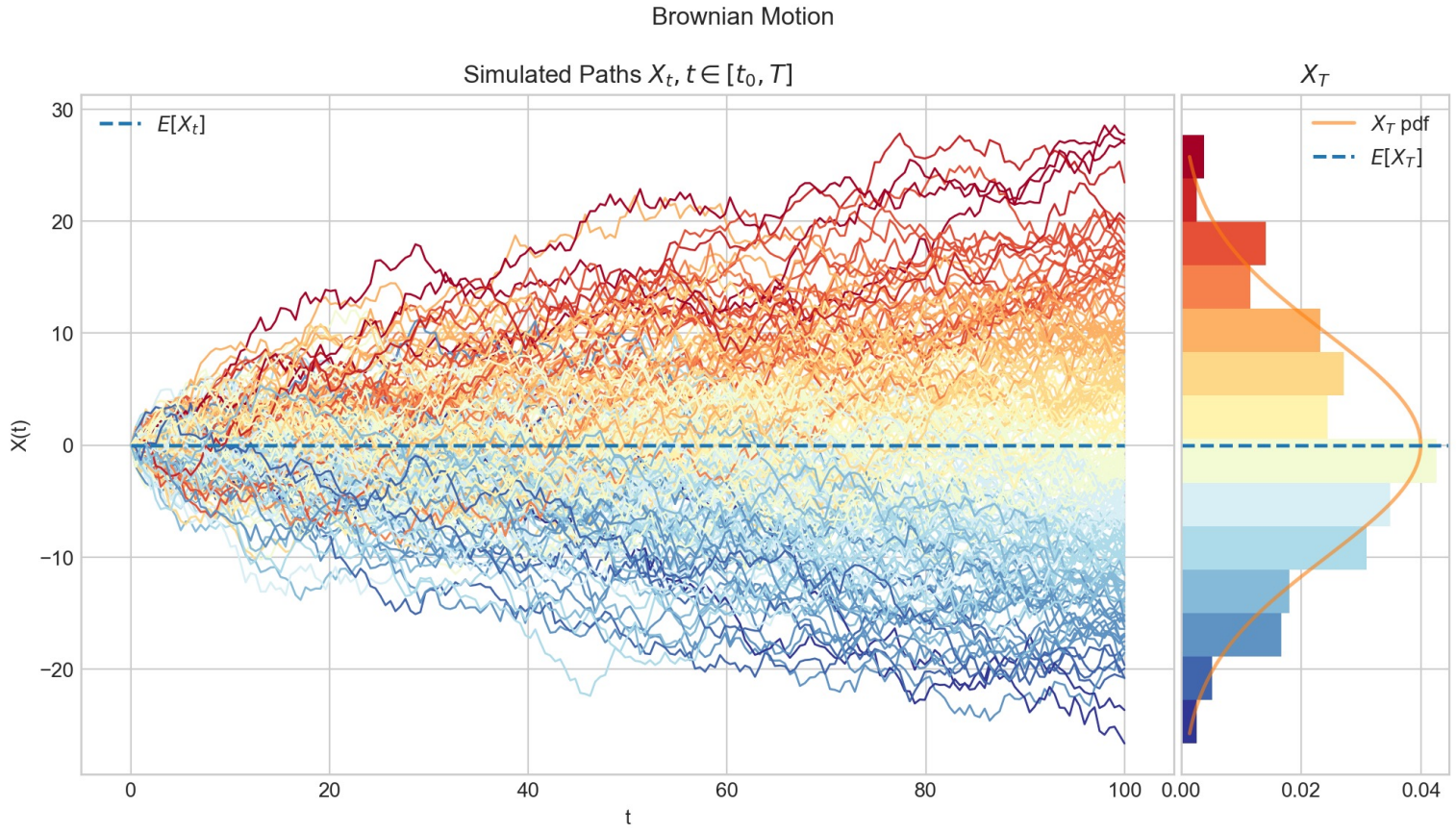


- 概率测度空间的度量、伪度量
  - 概率分布的比较提供严谨的数学框架 （比如收敛性）
  - 提供了在高维分布之间进行优化的可能性

随机过程

随机过程

- 随机过程是描述系统在时间上随机变化的数学模型
- 如果系统状态服从一个概率测度，概率测度在概率密度函数空间的演化



随机过程

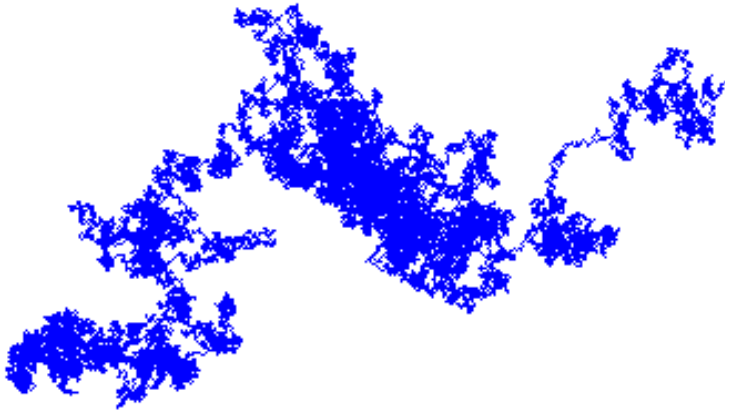
- 布朗运动 $(B_t)_{t\geq 0} \in R^d$

1. $B_0 = 0$
2. 独立增量：对于任意$0 \leq t_1 < \cdots < t_k$，随机变量 $(B_{t_1}, B_{t_2} - B_{t_1}, \cdots, B_{t_k} - B_{t_{k-1}})$相互独立

3. 稳定增量和正态性 ：对于任意$0 \leq s < t < \infty$，

$$B_t - B_s \sim \mathcal{N}(0, t-s)$$

4. $(\mathrm{B}_t)_{t\geq 0}$关于 t几乎处处连续



随机过程

- 随机微分方程$(\theta_t)_{t\geq 0} \in R^d$

$$d\theta_t = b(\theta_t, t)dt + \sigma(\theta_t, t)dB_t \quad X_0 = X(0)$$

其中$b: \mathrm{R}^d \times R \to R^d$，$\sigma: \mathrm{R}^d \times R \to R^{d\times d}$，$dB_t$满足

$$dB_t \sim \mathcal{N}(0, dt)$$

数值计算：$\theta_{t+\Delta t} \approx b(\theta_t, t)\Delta t + \sigma(\theta_t, t)(B_{t+\Delta t} - B_t)$

$$\approx b(\theta_t, t)\Delta t + \sigma(\theta_t, t)\mathcal{N}(0, \Delta t)$$

$$\mathcal{N}(0, \Delta t) \approx \sqrt{\Delta t}$$

伊藤（Itô）公式

$(\theta_t)_{t\geq 0} \in R^d$ 满足 $\dot{\theta}_t = b(X_t, t) + \sigma(\theta_t, t)\dot{B}_t$，定义 $X_t = f(t, \theta_t)$，那么 $(X_t)_{t\geq 0} \in R$ 满足

$$dX_t = \partial_t f(\theta_t, t)dt + \nabla_\theta f(\theta_t)^T b_t dt$$

$$+\frac{1}{2}\nabla_\theta^2 f(\theta_t, t) : \sigma_t \sigma_t^T dt + \nabla_\theta f(\theta_t, t)^T \sigma(\theta_t, t) dB_t$$

随机过程

Fokker Planck方程

$(\theta_t)_{t\geq 0} \in R^d$ 满足 $\dot{\theta}_t = b(\theta_t, t) + \sigma(\theta_t, t)\dot{B}_t$，若 $\theta_t \sim \rho_t$，那么

$$\dot{\rho}_t = -\nabla_\theta \cdot (b_t \rho_t) + \sum_i \sum_j \frac{\partial^2}{\partial_i \partial_j} [D_{ij}\, \rho_t]$$

其中 $D = \frac{1}{2}\sigma_t \sigma_t^T$

系统（参数）在时间上随机变化 $\Leftrightarrow$ 概率测度的演化

扩展阅读

- 最优输运问题

Filippo Santambrogio, “ Optimal transport for applied mathematicians”, Springer, 2015.

Lénaïc Chizat and Luca Nenna, “ Introduction to Optimal Transport Theory”, https://lchizat.github.io/ot2020orsay.html”.

Sinho Chewi, Jonathan Niles-Weed, and Philippe Rigollet. " Statistical Optimal Transport ”, https://arxiv.org/pdf/2407.18163.