

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

➤ 贝叶斯法则

- 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



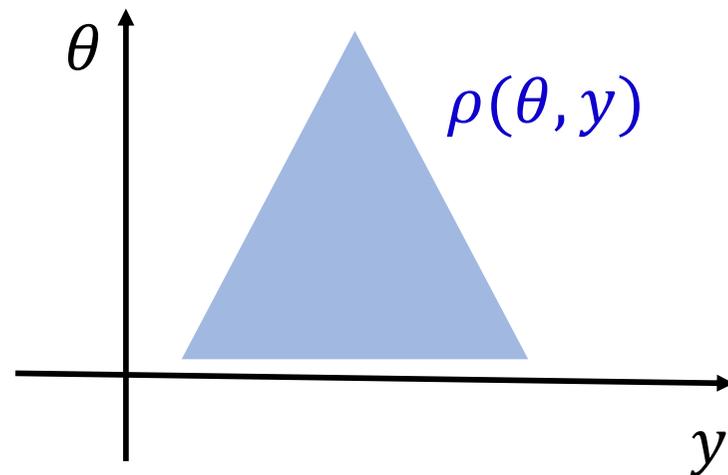
贝叶斯法则

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

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





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？

贝叶斯法则：

$$\begin{aligned}\rho(\text{患病}|+) &= \frac{\rho(+|\text{患病})\rho(\text{患病})}{\rho(+)} \\ &= \frac{\rho(+|\text{患病})\rho(\text{患病})}{\rho(+|\text{患病})\rho(\text{患病}) + \rho(+|\text{不患病})\rho(\text{不患病})} \\ &= \frac{99\%0.5\%}{99\%0.5\% + 1\%(1 - 0.5\%)} \\ &= 33.22\%\end{aligned}$$



后验分布

➤ 数学模型

$$y = g(\theta) + \eta$$

➤ 贝叶斯法则

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

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

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

∝ 正比于



后验分布

➤ 数学模型

$$y = g(\theta) + \eta$$

➤ 似然函数 (likelihood)

假设我们已知噪声分布 $\eta \sim \rho_\eta$

$$L(\theta; y) := \rho(y|\theta) = \rho_\eta(y - g(\theta))$$

➤ 后验分布 (posterior)

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

$$Z = \int \rho_\eta(y - g(\theta)) \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta$$



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)

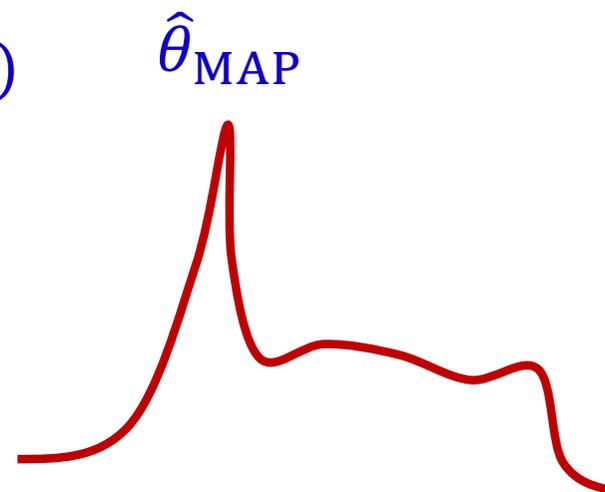
$$\hat{\theta}_{\text{MLE}} = \operatorname{argmax}_{\theta} L(\theta; y)$$

➤ 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

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





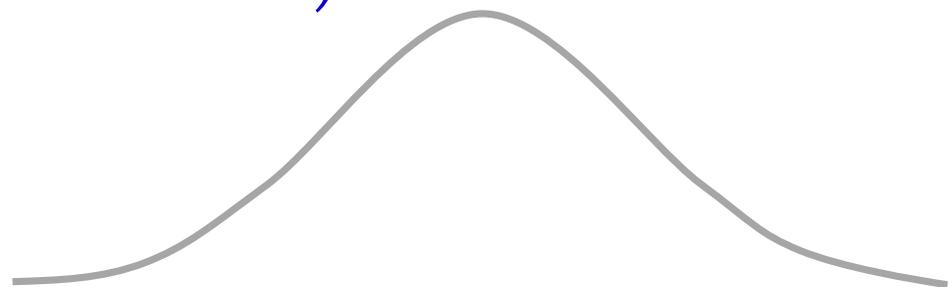
高斯分布

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

$$Z = \sqrt{|2\pi C|} = (2\pi)^{N\theta/2} \sqrt{|C|} \quad \text{能直接计算}$$

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

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



$$m = \operatorname{argmax}_x \mathcal{N}(x; m, C)_{10}$$



后验分布 (高斯假设)

➤ 数学模型(高斯噪声)

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

➤ 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)

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

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

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

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

正则项

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



后验分布

➤ 练习

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

观测： $y > 0$

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

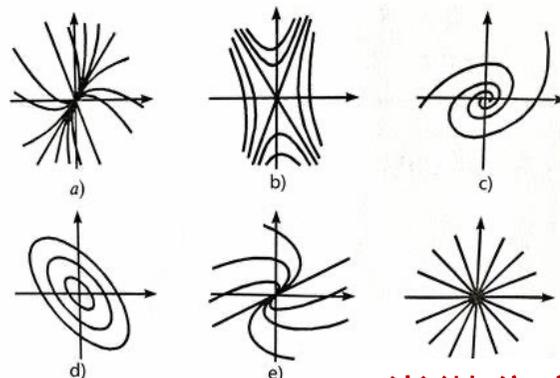
1. 计算最大似然估计
2. 假设 $\rho_{\text{prior}}(\theta) = \mathcal{N}(\theta; 0, c^2 \gamma^2 I)$ ，计算最大后验估计
3. 假设 $0 < \rho_{\text{prior}}(\theta) \leq \rho_{\text{max}} < \infty$ ，探究当 $\gamma \rightarrow 0$ 时，后验分布的变化



适定性

➤ 物理现象中的数学模型

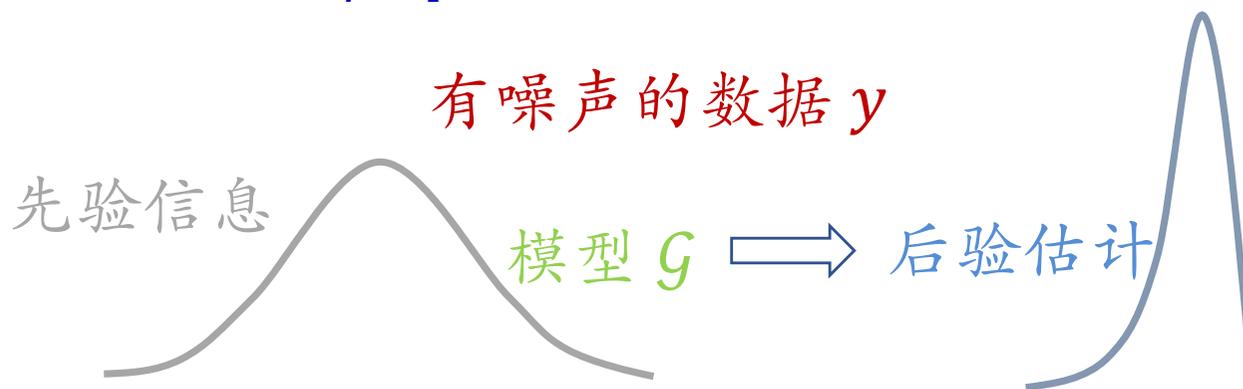
- 解的存在性
- 解的唯一性
- 解连续地取决于初边值条件



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 $y, G, \rho_\eta, \rho_{\text{prior}}$





存在唯一性

存在性定理

对于贝叶斯反问题

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

假设

θ 和 η 独立

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

那么后验分布存在

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



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

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

贝叶斯反问题

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

基于向前欧拉方法

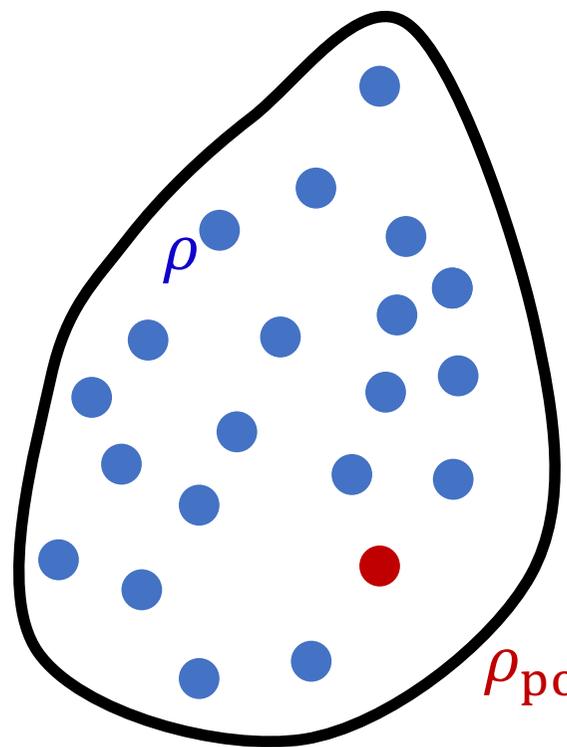
$$x_{n+1} = x_n + \delta f(x_n, \theta) \quad \delta = \frac{1}{N} \quad \mathcal{G}_\delta(\theta) := x_N$$

的贝叶斯反问题

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

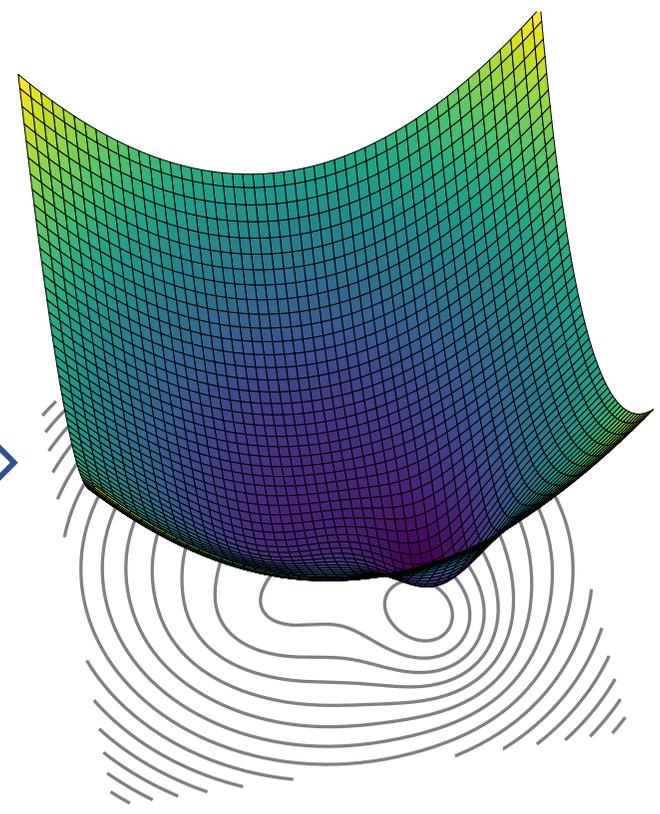


概率密度函数空间



概率密度空间 \mathcal{P}

度量 $M(\rho)$
距离 $\mathcal{D}(\rho_A, \rho_B)$



度量空间 $(\mathcal{P}, M(\rho))$



概率密度函数空间

➤ 海林格 (Hillinger) 距离

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_H(\rho_A, \rho_B) &:= \left(\frac{1}{2} \int \left| \sqrt{\rho_A(\theta)} - \sqrt{\rho_B(\theta)} \right|^2 d\theta \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\| \sqrt{\rho_A(\theta)} - \sqrt{\rho_B(\theta)} \right\|_{L_2} \end{aligned}$$



适定性

适定性定理

对于贝叶斯反问题

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

定义

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

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

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

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

那么存在 $\Delta > 0, c > 0$, 后验分布满足

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



适定性

➤ 练习

考虑如下常微分方程描述的系统

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

贝叶斯反问题

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

假设一致有界和Lipschitz连续，即存在常数 f_{\max} ：

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

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

基于向前欧拉方法的贝叶斯反问题

$$y = G_\delta(\theta) + \eta$$

能近似出 θ 的后验分布。