非线性贝叶斯反问题

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
  - 贝叶斯反问题
  - 贝叶斯采样、推理
  - 贝叶斯后验分布

贝叶斯反问题

- 贝叶斯反问题

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

- 假设

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

高斯噪音: $\rho_\eta = \mathcal{N}(x; 0, \Sigma_\eta)$

- 后验分布

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

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) = \frac{1}{Z} e^{-\Phi_R(\theta, y)}$$

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

贝叶斯反问题

- 优化方法

最大似然估计：

$$\operatorname{argmin}\frac{1}{2}\parallel\Sigma_\eta^{-\frac{1}{2}}(y-\mathcal{G}(\theta))\parallel^2$$

最大后验估计：

$$\operatorname{argmin}\frac{1}{2}\parallel\Sigma_\eta^{-\frac{1}{2}}(y-\mathcal{G}(\theta))\parallel^2+\frac{1}{2}\parallel\Sigma_0^{-\frac{1}{2}}(\theta-r_0)\parallel^2$$

非线性最小二乘问题：高斯-牛顿方法，Levenberg Marquardt 方法等

- 贝叶斯方法

采样： $\rho_{\text{post}}(\theta;y)=\frac{1}{Z}e^{-\Phi_R(\theta,y)}$

贝叶斯采样、推理

- 有未知归一化常数的目标分布

$$\rho^*(\theta) = \frac{1}{Z} e^{-\Phi_R(\theta)}$$

未知

已知

- 计算目标分布的期望、协方差等
- 计算目标函数的期望 $\mathbb{E}[f] = \int f(\theta)\rho^*(\theta)d\theta$
- 生成服从目标分布的样本 $\{\theta_j\} \sim \rho^*(\theta)$

贝叶斯采样、推理

- 参数化 (parametric) 方法

  高斯近似：

  $$\rho^*(\theta) \approx \mathcal{N}(\theta; m, C)$$

  混合高斯近似：

  $$\rho^*(\theta) \approx \sum_{j=1}^{J} w_j \mathcal{N}(\theta; m_j, C_j) \qquad \sum_{j=1}^{J} w_j = 1$$

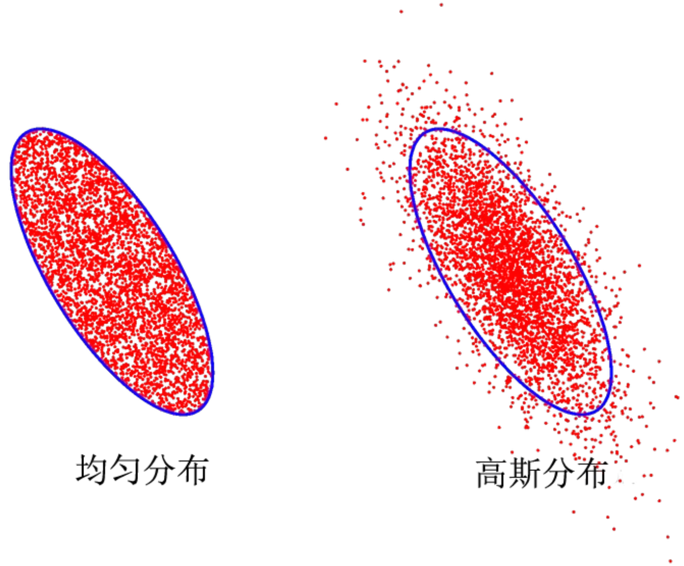
  ……

- 非参数化(nonparametric)方法

  粒子近似 $J \gg 1$ ：

  $$\rho^*(\theta) \approx \{\theta_j\}_{j=1}^{J}$$

  $$\rho^*(\theta) \approx \frac{1}{J}\sum_{j=1}^{J} \delta(\theta - \theta_j)$$



贝叶斯采样、推理

- 输运的方法（直接近似的方法）

暴力网格搜索：假设$N_\theta = 2$,

$$\theta_{i,j} = [-L + \frac{2(i-1)}{N-1}L, -L + \frac{2(j-1)}{N-1}L] \qquad Z = \sum \rho^*(\theta_{i,j})$$

输运：$\{\theta_i\} \sim \rho_{\text{prior}} \qquad \{\mathcal{T}\theta_i\} \sim \rho^*$

- 重要性采样
- 卡尔曼方法
- 标准化流方法

……

贝叶斯采样、推理

- 马氏链蒙特卡洛 (Markov chain Monte Carlo) 方法

暴力网格搜索：假设$N_\theta = 2$,

$$\theta_{i,j} = [-L + \frac{2(i-1)}{N-1}L, -L + \frac{2(j-1)}{N-1}L] \qquad Z = \sum \rho(\theta_{i,j})$$

随机游走：$\theta_n \to \theta_{n+1}$ 概率分布 $\psi_I(\theta_n, \theta_{n+1})$

不变分布是目标分布

$$\rho_{\text{post}}(\theta) = \int \psi_I(\theta', \theta)\rho_{\text{post}}(\theta')d\theta'$$

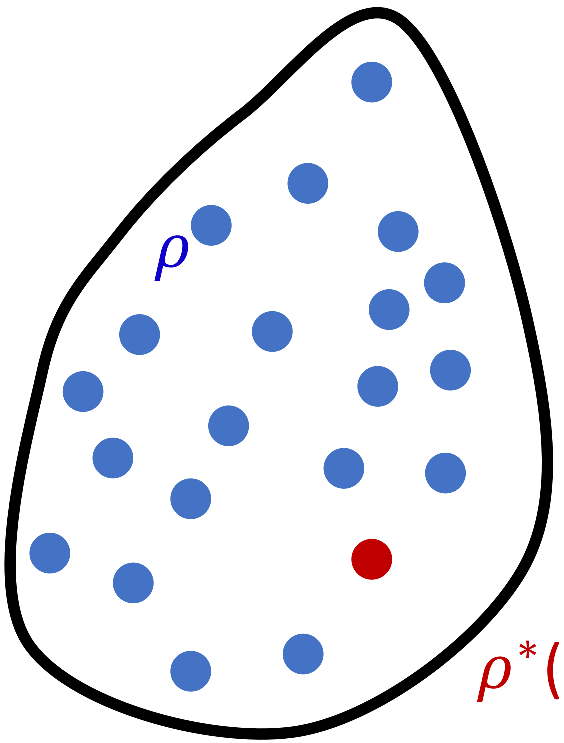
遍历性质

$\{\theta_n\}_{n\geq N} \sim \rho_{\text{post}}(\theta)$

贝叶斯采样、推理

➢ 变分推理 (Variational Inference)

$$\text{minimize}_\rho\ \mathcal{E}(\rho;\rho^*)$$

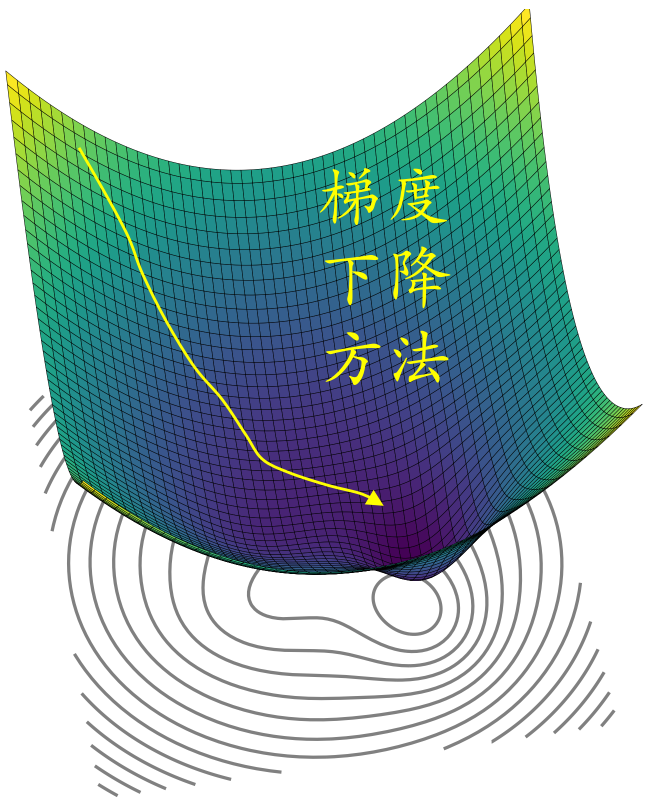


ρ^*(极小值)

概率密度空间$\mathcal{P}$

度量 $M(\rho)$

距离 $\mathcal{D}(\rho_A,\rho_B)$



9

- Rosenbrock 函数（$N_\theta = 2$）

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

$$\mathcal{G}(\theta) = \begin{bmatrix} \theta_2 - c_1\theta_1^2 \\ \theta_1 \end{bmatrix} \qquad y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

高斯先验分布: $\rho_{\mathrm{prior}}(\theta) = \mathcal{N}\left(\theta; 0, \begin{bmatrix} 10^2 & \\ & 10^2 \end{bmatrix}\right)$

高斯噪音: $\rho_\eta = \mathcal{N}\left(x; 0, c_2\begin{bmatrix} \frac{1}{10^2} & \\ & 1 \end{bmatrix}\right)$

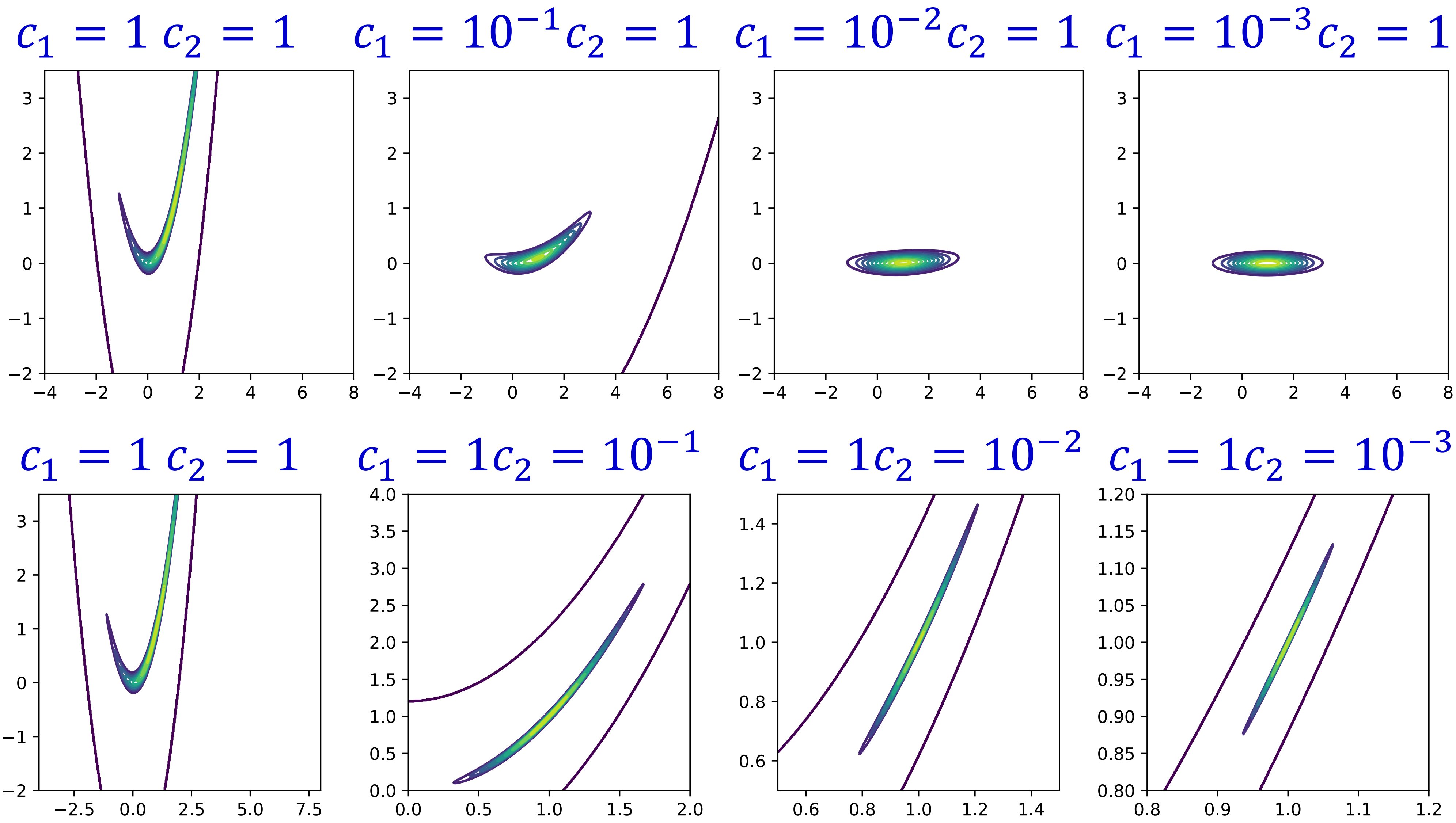
考虑：

$$c_1 = 1, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3} \qquad c_2 = 1$$

$$c_2 = 1, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3} \qquad c_1 = 1$$

贝叶斯后验分布

➢ Rosenbrock 函数 （$N_\theta = 2$）



贝叶斯后验分布

➢ Bernstein Von Mises 理论

对于反问题

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

我们假设噪音满足$\eta \sim \mathcal{N}\left(x; 0, \gamma^2 \Sigma_\eta\right)$，先验分布满足$\theta \sim \rho_{\mathrm{prior}}$。

在一定条件下，当$\gamma \to 0$

$$\rho_{\mathrm{post}}(\theta) \to \mathcal{N}\left(\theta; \theta^\dagger, \gamma^2 \left(\nabla_\theta \mathcal{G}\left(\theta^\dagger\right)^T \Sigma_\eta^{-1} \nabla_\theta \mathcal{G}\left(\theta^\dagger\right)\right)^{-1}\right)$$

其中 $\theta^\dagger$是 $(y - \mathcal{G}(\theta))\Sigma_\eta^{-1}(y - \mathcal{G}(\theta))$的唯一极小值。

贝叶斯后验分布

- Bernstein Von Mises 理论

对于数据

$$y_i = \mathcal{G}(\theta) + \eta, \qquad i = 1,2 \cdots, N$$

我们假设噪音满足$\eta \sim \mathcal{N}(x; 0, \Sigma_\eta)$，先验分布满足$\theta \sim \rho_{\text{prior}}$。

在一定条件下，当$N \to \infty$

$$\rho_{\text{post}}(\theta) \to \mathcal{N}\left(\theta; \theta^\dagger, N^{-1}\left(\nabla_\theta \mathcal{G}(\theta^*)^T \Sigma_\eta^{-1} \nabla_\theta \mathcal{G}(\theta^*)\right)^{-1}\right)$$

其中 $\theta^\dagger$是唯一最大似然估计，θ^*是真实值。

贝叶斯后验分布

- Bernstein Von Mises 理论

对于数据

$$y_i \sim P_\theta(\cdot), \qquad i = 1,2\cdots,N$$

我们假设先验分布满足$\theta \sim \rho_{\text{prior}}$。

在一定条件下，当$N \to \infty$

$$\rho_{\text{post}}(\theta) \to \mathcal{N}(\theta; \theta^\dagger, N^{-1} I(\theta^*)^{-1})$$

其中 $\theta^\dagger$是唯一最大似然估计，θ^*是真实值，$I(\theta^*)$是y分布的Fisher信息矩阵（可逆）

$$I(\theta^*) = -\mathbb{E}_{P_{\theta^*}}[\nabla_\theta^2 \log P_{\theta^*}]$$

贝叶斯后验分布

- 多峰函数（$N_\theta = 2$）

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

$$\mathcal{G}(\theta) = (\theta_1 - \theta_2)^2 \qquad y = 4$$

高斯先验分布: $\rho_{\text{prior}}(\theta) = \mathcal{N}\left(\theta; \begin{bmatrix} c \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix}\right)$

高斯噪音: $\rho_\eta = \mathcal{N}(x; 0, 1)$

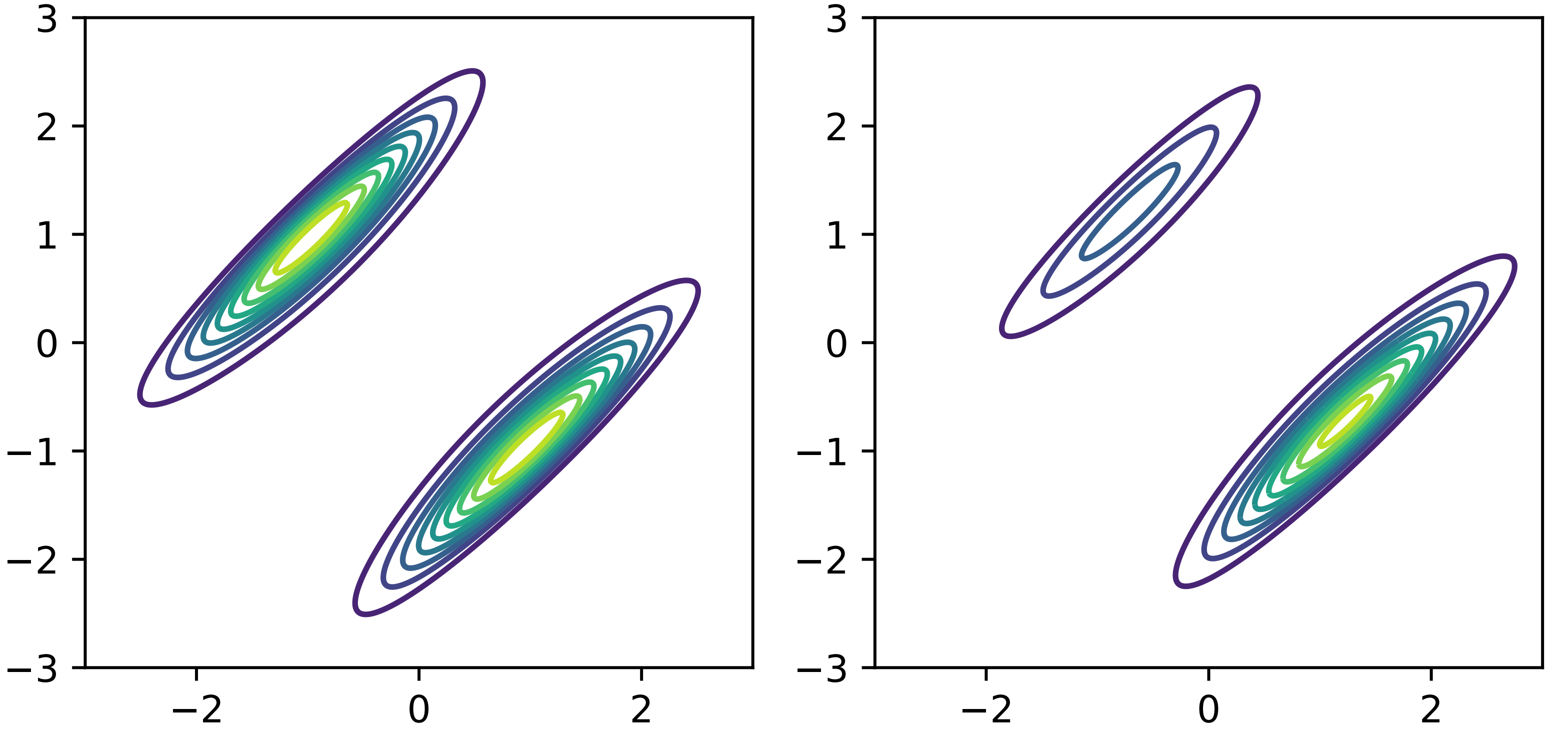
考虑：

$c = 0,\ 0.5$

贝叶斯后验分布

- 多峰函数（$N_\theta = 2$）

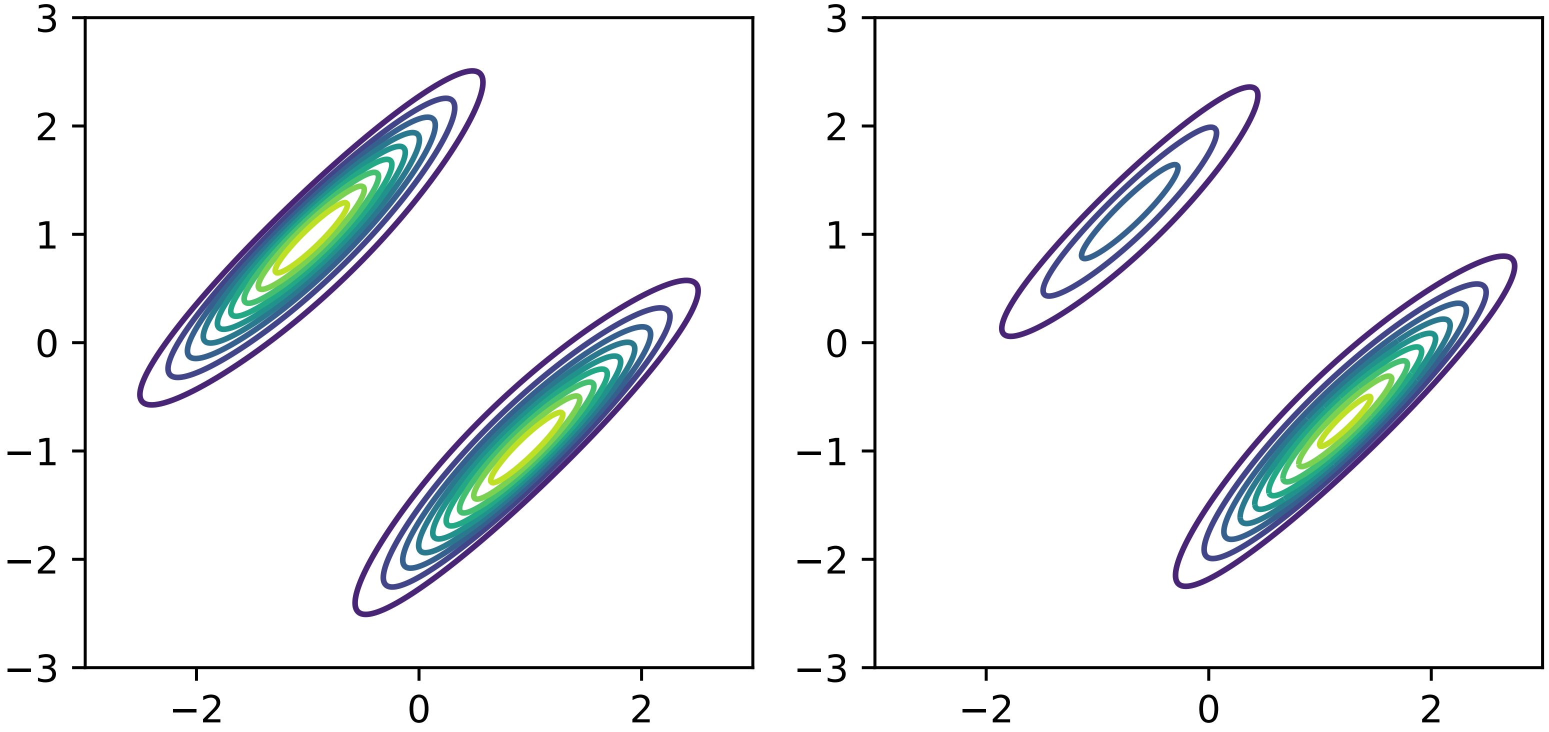
$c = 0$ $\qquad\qquad$ $c = 0.5$



贝叶斯后验分布

➢ 多峰函数（$N_\theta = 2$）

$c = 0$　　　　$c = 0.5$



扩展阅读

- Bernstein Von Mises 理论

  Wikipedia: https://en.wikipedia.org/wiki/Bernstein%E2%80%93von_Mises_theorem.

Bickel, Peter J., and Joseph A. Yahav. "Some contributions to the asymptotic theory of Bayes solutions." Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete 11.4 (1969): 257-276.