

## 1. 练习

考虑反问题：

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

已知：

- 观测： $y > 0$
- 噪声： $\eta \sim \mathcal{N}(x; 0, \gamma^2)$
- 先验分布： $0 < \rho_{\text{prior}}(\theta) \leq \rho_{\text{max}} < \infty$

问题：

- 计算最大似然估计
- 计算当 $\rho_{\text{prior}}(\theta) = \mathcal{N}(\theta; 0, c^2 \gamma^2 I)$  时的最大后验估计
- 探究当 $\gamma \rightarrow 0$  时，后验分布的变化

## 证明

**最大似然估计**

$$L(\theta; y) \propto \exp\left(-\frac{(\theta_1^2 + \theta_2^2 - y)^2}{2\gamma^2}\right)$$

最大似然估计是 $\frac{(\theta_1^2 + \theta_2^2 - y)^2}{2\gamma^2}$  的极小值，满足 $\theta_1^2 + \theta_2^2 = y$  的圆。不唯一！

**最大后验估计**

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) \propto \exp\left(-\frac{(\theta_1^2 + \theta_2^2 - y)^2}{2\gamma^2} - \frac{\theta_1^2 + \theta_2^2}{2c^2\gamma^2}\right)$$

最大后验估计是 $\frac{(\theta_1^2 + \theta_2^2 - y)^2}{2\gamma^2} + \frac{\theta_1^2 + \theta_2^2}{2c^2\gamma^2}$  的极小值：

- 当 $c \leq \frac{1}{\sqrt{2y}}$ ,  $\theta_1 = \theta_2 = 0$
- 当 $c > \frac{1}{\sqrt{2y}}$ ,  $\theta_1^2 + \theta_2^2 = y - \frac{1}{2c^2}$ 。不唯一！

**后验分布**

$$\rho_{\text{post}}(\theta; y) \propto \exp\left(-\frac{(\theta_1^2 + \theta_2^2 - y)^2}{2\gamma^2}\right) \rho_{\text{prior}}(\theta)$$

考虑如下两个区域

$$A^+ := \{\theta : |\theta_1^2 + \theta_2^2 - y|^2 \leq \gamma^{2+\delta}\} \quad A^- := \{\theta : |\theta_1^2 + \theta_2^2 - y|^2 > \gamma^{2-\delta}\}$$

当 $\gamma \rightarrow 0$ ，有对任意 $\theta^+ \in A^+$  和  $\theta^- \in A^-$ ，我们有

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{\text{post}}(\theta^+; y)}{\rho_{\text{post}}(\theta^-; y)} &= \exp\left(-\frac{(\theta_1^{+2} + \theta_2^{+2} - y)^2}{2\gamma^2} + \frac{(\theta_1^{-2} + \theta_2^{-2} - y)^2}{2\gamma^2}\right) \frac{\rho_{\text{prior}}(\theta^+)}{\rho_{\text{prior}}(\theta^-)} \\ &\geq \exp\left(-\frac{1}{2}\gamma^\delta + \frac{1}{2}\gamma^{-\delta}\right) \frac{\rho_{\text{min}}}{\rho_{\text{max}}} \rightarrow \infty \end{aligned}$$

$\rho_{\text{min}} > 0$  是  $\rho_{\text{prior}}$  在半径为  $2\sqrt{y}$  的球里的最小值。

因此，注意到当 $\gamma \rightarrow 0$ 时，后验分布 $\rho_{\text{post}}(\theta|y)$ 会集中在半径为  $\sqrt{y}$  的圆周上。

## 2. 存在性定理

对于贝叶斯反问题

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

假设

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

那么后验分布存在

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

## 证明

对于条件概率，我们有

$$\begin{aligned} \rho(\theta, y) = \rho(\theta|y)\rho(y) &\quad \text{当} \quad \rho(y) > 0 \\ \rho(\theta, y) = \rho(y|\theta)\rho(\theta) &\quad \text{当} \quad \rho(\theta) > 0 \end{aligned}$$

根据假设 $\rho(y) > 0$ ，当 $\rho_{\text{prior}}(\theta) > 0$ ，我们有

$$\rho(\theta|y) = \frac{\rho(\theta, y)}{\rho(y)} = \frac{1}{Z} \rho_\eta(y - \mathcal{G}(\theta)) \rho_{\text{prior}}(\theta)$$

当 $\rho_{\text{prior}}(\theta) = 0$ ，我们有

$$\rho(\theta|y) = 0 = \frac{1}{Z} \rho_\eta(y - \mathcal{G}(\theta)) \rho_{\text{prior}}(\theta)$$

## 3. 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

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

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

- $|\sqrt{L(\theta)} - \sqrt{L_\eta(\theta)}| \leq \varphi(\theta)\delta \quad \mathbb{E}_{\theta \sim \rho_{\text{prior}}}[\varphi(\theta)^2] \leq K_1^2$
- $\sup_\theta |\sqrt{L(\theta)} + \sqrt{L_\eta(\theta)}| \leq K_2$

那么存在 $\Delta > 0, c > 0$ ，后验分布满足

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

## 证明

我们将总误差分为两部分，一部分反映了 $L$ 和 $L_\delta$ 之间的差异，另一部分反映了 $Z := \int L(\theta)\rho_{\text{prior}}(\theta)d\theta$  and  $Z_\delta := \int L_\delta(\theta)\rho_{\text{prior}}(\theta)d\theta$ 之间的差异：

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_H(\rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G}), \rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G}_\delta)) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\| \sqrt{\rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G})} - \sqrt{\rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G}_\delta)} \right\|_{L^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\| \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z}} - \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} + \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} - \sqrt{\frac{L_\delta\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} \right\|_{L^2} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{2}} \left\| \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z}} - \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} \right\|_{L^2} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\| \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} - \sqrt{\frac{L_\delta\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} \right\|_{L^2}. \end{aligned}$$

对于 $Z$ 和 $Z_\delta$ ，我们有

$$\begin{aligned} |Z - Z_\delta| &= \left| \int (L(\theta) - L_\delta(\theta)) \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta \right| \\ &\leq \left( \int |\sqrt{L(\theta)} - \sqrt{L_\delta(\theta)}|^2 \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta \right)^{1/2} \left( \int |\sqrt{L(\theta)} + \sqrt{L_\delta(\theta)}|^2 \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta \right)^{1/2} \\ &\leq \left( \int \delta^2 \phi(\theta)^2 \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta \right)^{1/2} \left( \int K_2^2 \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta \right)^{1/2} \\ &\leq K_1 K_2 \delta, \quad \delta \in (0, \delta^+). \end{aligned}$$

由于 $Z > 0$ ，取 $\Delta = \frac{Z}{2K_1 K_2}$ ，当 $\delta < \Delta < \delta^+$ ，我们有

$$Z_\delta \geq Z - |Z - Z_\delta| \geq \frac{1}{2} Z$$

对于第一项，当 $\delta < \Delta$ ，我们有

$$\begin{aligned} \left\| \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z}} - \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} \right\|_{L^2} &= \left| \frac{1}{\sqrt{Z}} - \frac{1}{\sqrt{Z_\delta}} \right| \left( \int L(\theta) \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta \right)^{1/2} \\ &= \frac{|Z - Z_\delta|}{(\sqrt{Z} + \sqrt{Z_\delta})\sqrt{Z_\delta}} \\ &\leq \frac{K_1 K_2}{Z} \delta, \end{aligned}$$

对于第二项，当 $\delta < \Delta$ ，我们有

$$\begin{aligned} &\left\| \sqrt{\frac{L\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} - \sqrt{\frac{L_\delta\rho_{\text{prior}}}{Z_\delta}} \right\|_{L^2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{Z_\delta}} \left( \int |\sqrt{L(\theta)} - \sqrt{L_\delta(\theta)}|^2 \rho_{\text{prior}}(\theta) d\theta \right)^{1/2} \\ &\leq \sqrt{\frac{2K_1^2}{Z}} \delta. \end{aligned}$$

因此

$$\mathcal{D}_H(\rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G}), \rho_{\text{post}}(\theta; \mathcal{G}_\delta)) \leq \frac{K_1 K_2}{Z} + \sqrt{\frac{2K_1^2}{Z}} \delta = c\delta,$$

其中 $c = \frac{K_1 K_2}{Z} + \sqrt{\frac{2K_1^2}{Z}}$ ，不依赖于 $\delta$ 。

## 4. 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

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

假设一致有界和Lipschitz连续，即存在常数 $f_{\text{max}}$ ：

$$\begin{aligned} |f(x, \theta)|, |\partial_x f(x, \theta)| &< f_{\text{max}} \quad \forall x, \theta \\ |f(x, \theta) - f(x', \theta)| &< f_{\text{max}} |x - x'| \quad \forall x, x', \theta \end{aligned}$$

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 $\theta$ 的后验分布。

## 证明

对于向前欧拉方法，我们有

$$x_{n+1} = x_n + \delta f(x_n, \theta)$$

其中时间步长是 $\delta = \frac{1}{N}$ 。对于近似的贝叶斯反问题，我们有 $\mathcal{G}_\delta(\theta) = x_N$ 。我们需要验证，假设存在 $K_1, K_2 > 0, \delta^+ > 0$ ，对任意 $\delta \in (0, \delta^+)$ ，我们有

- $|\sqrt{L(\theta)} - \sqrt{L_\delta(\theta)}| \leq \varphi(\theta)\delta \quad \mathbb{E}_{\theta \sim \rho_{\text{prior}}}[\varphi(\theta)^2] \leq K_1^2$
- $\sup_\theta |\sqrt{L(\theta)} + \sqrt{L_\delta(\theta)}| \leq K_2$

由于噪声 $\eta \sim \mathcal{N}(0, \delta_\eta^2 I)$  是高斯，我们有

$$\begin{aligned} \sqrt{L(\theta)} &= \sqrt{\rho_\eta(y - \mathcal{G}(\theta))} = \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}} \exp\left(-\frac{1}{4\delta_\eta^2} |y - \mathcal{G}(\theta)|^2\right) \\ \sqrt{L_\delta(\theta)} &= \sqrt{\rho_\eta(y - \mathcal{G}_\delta(\theta))} = \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}} \exp\left(-\frac{1}{4\delta_\eta^2} |y - \mathcal{G}_\delta(\theta)|^2\right). \end{aligned}$$

对于假设一，由于对任意 $w_1, w_2 > 0$ ，我们有 $|e^{-w_1} - e^{-w_2}| \leq |w_1 - w_2|$ 。因此，我们有

$$\begin{aligned} \left| \sqrt{L(\theta)} - \sqrt{L_\delta(\theta)} \right| &\leq \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}} \cdot \left| |y - \mathcal{G}(\theta)|^2 - |y - \mathcal{G}_\delta(\theta)|^2 \right| \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}} \cdot \frac{1}{4\delta_\eta^2} \cdot |2y - \mathcal{G}(\theta) - \mathcal{G}_\delta(\theta)| |\mathcal{G}(\theta) - \mathcal{G}_\delta(\theta)| \\ &\leq c\delta. \end{aligned}$$

这里我们用了关于 $f$ 的假设，以及向前欧拉方法的一阶全局误差性质。

对于假设二，我们有

$$\begin{aligned} \sqrt{L(\theta)} &= \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}} \exp\left(-\frac{1}{4\delta_\eta^2} |y - \mathcal{G}(\theta)|^2\right) \leq \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}} \\ \sqrt{L_\delta(\theta)} &= \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}} \exp\left(-\frac{1}{4\delta_\eta^2} |y - \mathcal{G}_\delta(\theta)|^2\right) \leq \frac{1}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}}. \end{aligned}$$

因此我们可以取 $K_2 = \frac{2}{(2\pi)^{N_x/4} \delta_\eta^{N_x/2}}$ 。