arXiv:2602.07856v1 [math.NA] 8 Feb 2026

# 贝叶斯逆问题的非齐次先验*

BABAK MABOUDI AFKHAM†、TOM ´AS SOTO‡、MIRZA KARAMEHMEDOVI ´C§，和LASSI ROININEN‡

**摘要**。工程学和应用科学中的许多逆问题涉及具有显著空间非均匀性的未知量，例如局部缺陷或空间变化的材料属性，这使得可靠的不确定性量化尤其具有挑战性。贝叶斯逆问题方法为评估重建可靠性提供了原则性框架，但常用的高斯先验（如 Whittle–Mat´ern 模型）假设全局齐次，因此在大规模场景中难以捕捉此类结构。我们引入一类新的非齐次先验，通过与白噪声卷积来定义，从而得到具有严格数学构造的非平稳 Whittle–Mat´ern 型随机场。这些先验自然适用于现有的贝叶斯适定性理论，并可通过将先验实现转化为求解伪微分方程来实现高效采样；我们还为此开发了具有量化近似误差的数值格式。一维去噪和二维有限角度 X 射线断层成像的数值实验表明，重建质量和不确定性量化均有显著改善，尤其是在数据有限的情形下。

**关键词**。逆问题，贝叶斯框架，先验，伪微分算子，非均匀性

**MSC 分类号**。65J22, 62F15, 60G15, 60B11, 35S05

**1. 引言**。影响最为重大的科学与工程学问题，往往依赖于从间接、不完整或含噪的观测中推断隐藏结构。这类问题称为逆问题，是医学成像的核心，因为必须根据外部测量重建内部解剖结构；也是工业监测的核心，因为缺陷的早期检测可以防止灾难性故障；同时也是科学发现的核心，因为必须根据有限的实验数据推断物理参数。因此，逆问题的建模与求解方式会直接影响重建结果的准确性，以及基于这些结果所做出的决策。

许多应用中的逆问题涉及本质上具有非均匀性的未知量。例如，含有缺陷的材料、性质随空间变化的生物组织，以及呈现分层或断裂结构的地质介质。在可再生能源行业，风力涡轮机叶片容易受到循环风载荷和环境暴露所引发的裂纹、侵蚀和表面腐蚀；如果未能及时发现，这些缺陷会导致可测量的能量输出损失 [19]。类似地，在太阳能光伏系统中，面板部件腐蚀和微观结构缺陷已被确定为长期可靠性的主要挑战

*提交给编辑 DATE。**资助：** 本研究得到芬兰研究理事会（RCF）通过传感、成像与建模高级数学旗舰计划以及逆向建模与成像卓越中心的资助（决定编号 359183 和 353095）。Babak Maboudi Afkham 亦部分获得 RCF 资助，项目编号为 371523，且 Mirza Karamehmedovi´c 获得 Villum 基金会资助，项目编号为 58857。

†数学科学研究组，奥卢大学，佩恩蒂·凯泰兰街1号，林南马，芬兰（babak.maboudi@oulu.fi）。

‡工程科学学院，拉彭兰塔-拉赫蒂理工大学，芬兰（Tomas.Soto@lut.fi，Lassi.Roininen@lut.fi）。

§丹麦技术大学应用数学与计算机科学系，孔恩斯灵比，丹麦（mika@dtu.dk）。

[8]。在这类问题中，要实现准确推断，不仅需要估计未知量本身，还要解析空间变化结构和局部非均匀性，这些因素对于结果解释和决策至关重要。

逆问题往往是不适定的，也就是说，解可能不存在或不唯一，也可能对数据中的微小波动十分敏感。因此，正则化至关重要，它能够有效限制搜索空间，并编码对未知量结构的假设。经典正则化技术通常施加全局假设，例如均匀光滑性或稀疏性，从而隐含地将未知量视为结构均匀的。尽管这些假设在许多情况下有效，但对于变异性局部存在或随空间变化的问题，它们可能并不适用。在这种情况下，局部异质性可能被平滑掉或低估，而噪声则可能被错误地赋予结构意义[1, 3]。

逆问题的贝叶斯表述为不确定性量化提供了一个有原则的框架，其中正则化通过先验概率分布来编码。从这一角度看，先验将建模假设转化为关于未知量的概率分布，并直接影响点估计和不确定性陈述。贝叶斯方法能够量化重建特征所伴随的不确定性，但这种能力从根本上受先验选择的影响。具体而言，最常用的先验大多编码了关于正则性或变异性的平稳或全局均匀假设。因此，这类先验无法适应空间变化结构，可能会过度平滑复杂区域，或对较简单区域施加不足的正则化，从而扭曲重建结果及其相关的不确定性评估。

以对离散化具有稳健性的方式表述贝叶斯逆问题，一种自然做法是直接在函数空间层面开展研究，而不是采用有限维参数化。在这种设定中，未知量被建模为连续体上的随机函数，先验分布和后验分布的定义不依赖于任何特定的离散化。这种无限维视角为不确定性量化提供了数学上自洽的框架，并确保推断在网格细化过程中保持稳定。重要的是，尽管理论上无限维表述能够实现空间分辨建模，但在实践中能否捕捉空间变化结构，很大程度上取决于所选先验分布的表达能力。

随着不确定性量化日益重要，在这一无限维贝叶斯框架内求解高维反问题的需求也不断增长。然而，用于探索后验分布的标准采样方法，例如马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）或 Metropolis–Hastings算法，通常难以随维数扩展。 [38, 7, 22], 开创的无限维贝叶斯反问题理论，通过支持设计离散化不变的马尔可夫链蒙特卡罗算法来应对这一挑战；这些算法的性能在网格细化过程中保持稳定，从而有助于高效探索高维后验分布 [6, 5]。

尽管无限维贝叶斯表述取得了成功，但如何在函数空间上构造合适的先验分布仍是一项核心挑战。一种广泛使用的方法是指定协方差核，从而为高斯先验 [37, 34, 26, 17] 导出协方差算子。然而，在大规模问题中，显式表示这些算子在计算上可能代价高昂。Karhunen–Lo`eve（KL）展开提供了一种可扩展的替代方案，它通过谱分解表示随机函数，并允许在不

显式构造完整协方差算子的情况下隐式定义先验。

Whittle–Mat´ern 先验构成了一类广泛且表现力丰富的高斯先验，其协方差结构和谱性质均已得到充分理解。这些先验由相关长度、光滑度指数和方差参数控制，能够灵活地调节全局正则性和尺度。然而，由于这些参数在空间上均匀不变，Whittle–Mat´ern 先验编码了全局齐次且各向同性的假设，使得所产生的随机场在整个区域内呈现均匀的统计性质。因此，要刻画空间变化的非均匀性或各向异性，就需要超越经典形式进行扩展，这仍是一个活跃的研究领域。

本文介绍一类用于贝叶斯逆问题的非齐次先验，其分布通过与白噪声卷积来定义。在此框架下，空间变化的 Whittle–Mat´ern 协方差算子自然产生，从而为构造非平稳高斯随机场提供了严格的方法。此外，这一表述与现有的贝叶斯适定性理论直接兼容 [38, 23, 22], ，因此无需进一步重建理论，即可纳入此前研究过的逆问题。

我们证明，对所提出的随机变量进行采样可归结为求解一个由伪微分算子 [16, 11] 刻画的随机偏微分方程（SPDE）。为此，我们构建了详尽的数值格式，并量化其近似误差；现有文献对此方面的关注相对有限。此外，当伪微分算子的符号快速衰减时——本文给出的所有数值示例均呈现这一特征——采样过程会大幅简化，可视为对现有 Whittle–Mat´ern 先验算法的直接改造。我们给出了一个完整且可实现的算法，用于从这些非齐次先验中采样。

为大规模逆问题设计求解器和马尔可夫链蒙特卡罗方法仍是一项重大挑战。我们证明，所提出的非齐次先验能够自然地与现代高效的推断算法相结合，包括用于哈密顿蒙特卡罗（HMC）的无转向采样器（NUTS），以及用于计算最大后验（MAP）估计的有限内存 Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno 方法（L-BFGS）。

我们通过一维去噪问题和二维有限角度X射线计算机断层成像示例，评估了所提出方法的性能。这些实验表明，空间变化先验在数据受限场景中尤其有优势，因为此类场景需要适应局部结构。数值结果显示，与标准方法相比，该方法显著提高了重建精度，同时还能提供可靠的不确定性量化。

本文结构如下。第 2 节回顾先验定义在连续体上的贝叶斯逆问题。在第 2.2 小节中，我们介绍一类由特定随机偏微分方程的解构成的空间非齐次随机函数，并将其分布律形式化为贝叶斯逆问题的先验分布。第 3 节介绍一种从这些非齐次先验中采样的计算算法。第 4 节报告一维去噪问题和有限角度二维 X 射线计算机断层成像问题的数值结果，并考察所提出的方法在探索基于非齐次先验构造的后验分布时的性能。第 5 节给出总结性评论。

**2. 连续统上的贝叶斯逆问题**。我们用普通字母 $x$表示标量，用粗体字母 $\boldsymbol{x}$ 表示向量，用大写字母 $X$ 表示随机变量。随机变量取值所在的空间会明确给出，例如，如果$X$取值于空间 $\mathcal{X}$，那么我们称 $X$为一个取值于 $\mathcal{X}$的随机变量。

Le设 $H$ 为一个希尔伯特空间。本文考虑如下类型的逆问题

$$\boldsymbol{y} = \mathcal{G}(\xi) + \boldsymbol{e}, \tag{2.1}$$

其中， $\xi \in H$ 是逆问题中的未知量， $\mathcal{G}\colon H \to \mathbb{R}^m$ 是前向算子， $\boldsymbol{e} \in \mathbb{R}^m$ 是加性噪声向量， $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ 是测量向量。该逆问题旨在根据含噪测量 $\boldsymbol{y}$ 推断式 (2.1) 中的未知量 $\xi$ 。

在逆问题的贝叶斯表述中，我们通过将未知量、噪声和测量建模为随机变量，将式 (2.1) 改写为统计框架。设 $X$ 为一个取值于 $H$ 的随机变量，表示未知量 $\xi$； $Y$ 和 $E$ 为取值于 $\mathbb{R}^m$ 的随机变量，分别对应于 $\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{e}$。于是，式 (2.1) 的统计类比形式为

$$Y = \mathcal{G}(X) + E. \tag{2.2}$$

这里， $\mathcal{G}$ 被视为一个确定性映射，通常代表测量所依据的物理或数学模型。统计逆问题 (2.2) 的目标是刻画给定观测 $Y = \boldsymbol{y}$ 时 $X$ 的条件分布，记作 $X|Y = \boldsymbol{y}$。该分布称为后验分布。

贝叶斯定理 [18] 通常为将后验分布分解为更易处理的组成部分提供标准框架。然而，由于 $X$ 在我们的设定中是函数值的，因此通常无法用相对于某个典范支配测度（例如欧几里得空间上的勒贝格测度）的密度来表示 $X$ 或 $X|Y$的分布律。相反，这些分布是通过无限维函数空间上的概率测度来表述的。

令 $\mu_X$和 $\mu_{X|Y=\boldsymbol{y}}$分别表示先验和后验概率测度。贝叶斯定理的测度论表述为

$$\frac{\mathrm{d}\mu_{X|Y=\boldsymbol{y}}}{\mathrm{d}\mu_X}(\xi) = \frac{1}{c} L(\boldsymbol{y}|\xi), \tag{2.3}$$

其中 $L(\boldsymbol{y}|\xi)$ 表示在未知量 $\xi$为给定值时观测到测量值 $\boldsymbol{y}$ 的似然，而 $c \in \mathbb{R}^+$ 是归一化常数。这里，$\mathrm{d}\cdot/\mathrm{d}\cdot$ 是测度之间的拉东-尼科迪姆导数[17] 。关于后验分布这一表述的详细内容和参考文献见下文第2.3小节。

下一节中，我们将概述在函数空间上构造概率测度（用作先验分布）的常见方法。随后，我们将讨论如何将此类测度的实现解释为某些分数阶随机偏微分方程的解。最后，我们将简要表述统计逆问题，并列出关键随机变量及其依赖关系：

$$\begin{aligned} Y &= \mathcal{G}(X) + E, \\ X &\sim \mu_X, \\ E &\sim \mathcal{N}(0, \Sigma_{\text{noise}}), \\ Y|(X = \xi) &\sim \mathcal{N}(\mathcal{G}(\xi), \Sigma_{\text{noise}}). \end{aligned} \tag{2.4}$$

随着我们在逆问题中引入更多复杂性与层次结构，这一总结将变得越来越重要。

**2.1. 高斯随机函数。** 考虑概率空间（$H, \mathcal{B}(\mathcal{H}), \mathbb{P}$），其中 $H$ 为希尔伯特空间，$\mathcal{B}(H)$为 $H$ 的Borel $\sigma$-代数，且 $\mathbb{P}$ 为Borel概率测度。上一节引入的 $X$的先验分布将采用这种形式。此处我们假设 $H = L^2(\Omega)$，其中$\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 是一个区域，配备标准的 $L^2$ 内积 $\langle \cdot, \cdot \rangle_H$ 以及范数 $\| \cdot \|_H$。

如果对任意 $h \in H$，$\langle X, h \rangle_H$ 都是高斯分布，我们就称博雷尔可测随机元素 $X$ on $H$ 是 $\Omega$ 上取值于 $H$ 的高斯随机函数。等价地，它的特征函数具有如下形式 [17]

$$\phi_X(h) := \mathbb{E}\left[\exp(\boldsymbol{i}\langle X, h\rangle_H)\right] = \exp\left(\boldsymbol{i}\langle m, h\rangle_H - \frac{1}{2}\langle \mathcal{C}h, h\rangle_H\right), \tag{2.5}$$

其中，$\boldsymbol{i} \in \mathbb{C}$ 是虚数单位，$m \in H$ 是均值函数，$\mathcal{C}: H \to H$ 是一个有界、自伴、正且为迹类的协方差算子。在这种情况下，我们将 $X$在 $H$上的分布律记为 $\mu_X := \mathbb{P} \circ X^{-1} := \mathcal{N}(m, \mathcal{C})$，并记作 $X \sim \mu_X$。

下面的结果根据 $\mathcal{C}$ 的谱分解，完整刻画了高斯随机函数。

PROPOSITION 2.1. *[20, 17]* 设 $m \in H$ 和 $\mathcal{C}: H \to H$ 分别为上述均值函数和协方差算子。设 $\{e_j\}_{j=1}^{\infty}$ 为特征函数，$\{\lambda_j\}_{j=1}^{\infty}$ 为 $\mathcal{C}$对应的特征值，并按递减顺序排列。则，$X \sim \mathcal{N}(m, \mathcal{C})$当且仅当 $X$ 具有如下级数展开

$$X = m + \sum_{j=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_j} X_j e_j, \tag{2.6}$$

其中，对所有 $j \geq 1$，$X_j \sim \mathcal{N}(0、1)$ 都是相互独立的实值随机变量。无穷级数按如下意义理解：$(\sqrt{\lambda_j})_{j \geq 1} \in \ell^2$，因此 $\mathbb{E}\left[\|X - m\|_H^2\right] < \infty$。

展开式 (2.6) 称为卡鲁宁-洛埃夫（KL）展开 [17] of$X$。命题 2.1 意味着，要将高斯随机函数定义为先验，可以直接构造协方差算子 $\mathcal{C}$，也可以指定其谱分解。实践中，$X$ 通常通过截断 KL 展开来近似，得到 $\widetilde{X}$，使得近似误差满足 $\mathbb{E}\left[\|X - \widetilde{X}\|_H^2\right] < \delta_{\mathrm{KL}}$，即容许最多 $\delta_{\mathrm{KL}}$ 的方差损失。

在高维反问题中，这两项任务——设计 $\mathcal{C}$ 或其谱分解——都颇具挑战。协方差算子的离散化往往会产生大型协方差矩阵，而探索形式如 (2.4) 的后验分布通常需要耗费大量计算资源进行矩阵求逆和因式分解。另一方面，直接使用谱分解也需要指定无穷多个基函数，这很难以一致且计算上可行的方式实现。

一种有望缓解这些困难的方法 [25, 24] 是将 $X$视为椭圆型随机偏微分方程的解。为说明这一点，设 $\Omega = [0, 1)$ 为周期域（一维环面），且 $k \geq 1$ 为整数。令 $m \equiv 0$，并将特征值和特征函数定义为 $\lambda_j := 1/(\boldsymbol{i}2\pi j)^{2k}$，其中 $j \in \mathbb{N}^+$，且$e_j(x) := \exp(\boldsymbol{i}2\pi j x)$（具有整数频率的傅里叶基）。

在这种情况下，Karhunen–Loève 展开（2.6）变为

$$X = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{(\boldsymbol{i}2\pi j)^k} X_j \exp(\boldsymbol{i}2\pi j x). \tag{2.7}$$

^投影 $X$ 到 $e_j(x)$ 上，即令 $X(j) := \langle X, e_j\rangle_H$，得到

$$\widehat{X}(j) = \frac{1}{(\boldsymbol{i}2\pi j)^k} X_j \qquad \Longrightarrow \qquad (\boldsymbol{i}2\pi j)^k \widehat{X}(j) = X_j.$$

由于在傅里叶域中乘以 $-(\boldsymbol{i}2\pi j)^k$，对应于在物理域中取 $k$ 阶导数，因此这一关系等价于微分方程

$$-\frac{\partial^k}{\partial x^k} X = \Psi, \tag{2.8}$$

其中，源项 $\Psi$ 是一个缓增分布，其傅里叶变换定义为 $\widehat{\Psi}(j) := X_j$，并称为**希尔伯特空间白噪声**。详情见附录 A。

总之，随机偏微分方程 (2.8) 的解是一个高斯随机函数，它具有形式如 (2.6) 的卡鲁宁–洛埃夫展开。根据命题 2.1 的刻画，与之相关的协方差算子具有形式 $\mathcal{C} = (\partial^k/\partial x^k)^{-2}$。这进一步凸显了此类高斯随机函数的协方差算子的复杂性。

设计椭圆型偏微分方程并开发高效求解器，是过去一个世纪以来成功研究的核心主题。这些研究成果为在逆问题中构造新型先验提供了坚实基础。特别是，众所周知 [25, 33]，Whittle–Mat´ern 协方差算子 [10] 可以改写为如下形式的随机偏微分方程的解

$$c(\sigma, \alpha)(\sigma - \Delta)^{\alpha/2} X = \Psi, \tag{2.9}$$

确保 $X$ 是一个具有命题 2.1 中所述 Karhunen–Loève 展开的高斯随机函数。这一表述为设计丰富的高斯先验模型提供了实际的灵活性。然而，据作者所知，先前文献中所有此类先验都是齐次的，即 $c$，$\sigma$，$\alpha$ 以及 $\Delta$ 均与空间变量 $\boldsymbol{x}$无关。

在以下各节中，我们引入一类新的非齐次协方差算子，可作为逆问题的先验。具体而言，我们通过伪微分算子表述推广（2.9），并证明所得的解 $X$ 定义了一个适定的概率测度 $\mu_X$。随后，我们在逆问题的框架下采用这一先验，并展示其增强的灵活性。

**2.2. 空间非齐次随机偏微分方程。**此处我们介绍随机偏微分方程（2.9）的一种扩展，其中包含一个空间非齐次的长度尺度函数 $\sigma$。由于我们将广泛使用以傅里叶变换表示的函数和算子，我们将 $\mathbb{T}^d := [0,1)^d$——即 $d$维环面——固定为该随机偏微分方程的区域。

关于环面白噪声Ψ的显式构造及其泛函分析性质的简要概述，请参见附录 A。关键的是， Ψ是一个随机缓增分布，并且在如下意义上是一个高斯场：对偶配对

$$\langle \Psi, f\rangle_{\mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)\times C^\infty(\mathbb{T}^d)}$$

是一个均值为零、方差为 $\|f\|^2_{L^2(\mathbb{T})}$ 的正态分布随机变量，对每个实值测试函数 $f \in C^\infty(\mathbb{T}^d)$ 都成立。对于任意小的 $\epsilon > 0$，$\Psi$ 存在一个版本，可作为负阶索博列夫空间 $H^{-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$ 中的随机元素（详见附录 A.1）。

接下来，我们考虑随机偏微分方程

$$p_\alpha(\cdot, D)X = \Psi \tag{2.10}$$

对某个 $\alpha > 0$，其中 $p_\alpha(\cdot, D)$ 表示由符号 $p_\alpha(\cdot, \cdot)$ 给出的伪微分算子： $\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d \to \mathbb{C}$，定义如下：

$$\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d \ni (x, \eta) \mapsto c(\sigma, \alpha)\left(\sigma(x) + |\eta|^2\right)^{\alpha/2}. \tag{2.11}$$

更确切地说，在对长度尺度函数 $\sigma$ （我们将在下文讨论）作出适当假设的条件下， $p_\alpha(\cdot, D)$ 作用于测试函数 $f \in C^\infty(\mathbb{T}^d)$ 的结果为

$$p_\alpha(\cdot, D)f(x) := \sum_{\eta \in \mathbb{Z}^d} p_\alpha(x, \eta)\widehat{f}(\eta)e^{i2\pi\eta\cdot x}, \tag{2.12}$$

并且 $p_\alpha(\cdot, D)$ 可通过对偶性扩展为温和分布空间 $\mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)$ 上的连续算子（详情见附录 A.2）。关于周期分析以及$\mathbb{T}^d$上的伪微分算子的更多信息，可参见例如 [35, 第 3 章和 4] 。

我们注意到，根据对 (2.8)–(2.9) 的相关讨论，由符号 (2.11) 定义的算子 $p_\alpha(\cdot, D)$ 可以看作是 (2.9) 左端微分算子的一种变体，其长度尺度随空间变化。从这个意义上说，随机偏微分方程 (2.10) 是 (2.9) 的空间非齐次推广。我们还注意到，尽管伪微分算子的作用是根据复值测试函数的傅里叶变换来定义的，但像 (2.11) 这样的符号**保证** $p(\cdot, D)$ 会将实值测试函数（分别为分布）映射为实值测试函数（分别为分布）；见附录 A.2。

在讨论 (2.10) 的解之前，我们先明确长度尺度函数 $\sigma$ 所满足的假设。为了借助关于伪微分算子的一般结果，我们将只使用 H¨ormander 类$S^m(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$、 $m \in \mathbb{R}$中的符号。就我们的目的而言，只需知道 [35, 定理 4.53] ： 环面符号 $p$： $\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d \to \mathbb{C}$ 属于类 $S^m(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$，当且仅当 $p$ 可以扩展为定义在 $\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$ 上的光滑函数，使得

$$\sup_{(x,\eta) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d} (1 + |\eta|)^{|\beta| - m} \left|\partial_\eta^{(\beta)} \partial_x^{(\gamma)} p(x, \eta)\right| < \infty$$

对所有多重指标 $\beta$、 $\gamma \in \mathbb{N}_0^d$ 均成立。因此可以看出，由 (2.11) 给出的符号 $p_\alpha(\cdot, \cdot)$ 在 $\sigma$: $\mathbb{T}^d \to (0, \infty)$ 光滑且上下均一致有界 时属于 $S^\alpha(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$，这也是我们下文将采用的假设。

因此，由于符号属于 $S^m(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$ 的伪微分算子对所有 $m$， $s \in \mathbb{R}$ [35, 推论 4.83], , 都是从 $H^s(\mathbb{T}^d)$ 到 $H^{s-m}(\mathbb{T}^d)$ 的有界算子，我们可以形式上求逆 (2.10) 左端的伪微分算子，从而得到一个解

$$X = [p_\alpha(\cdot, D)]^{-1}\Psi, \tag{2.13}$$

右侧是 Sobolev空间 $H^{\alpha - d/2 - \epsilon}(\mathbb{T}^d)$中的一个随机元素。如果$\alpha > d$，Sobole夫嵌入定理还将进一步表明，随机场 $X$具有 H¨older $r$-正则的样本函数，其中 $r \in (0, \alpha - d)$；参见附录 A.2。

然而，空间非齐次伪微分算子的求逆通常是一个非常困难的问题，远远超出了本文的范围，因此我们将改为使用算子 $p_\alpha(\cdot, D)$ 的近似逆或参数子。

为此，我们注意到，对于每个 $\alpha > 0$ 和可容许长度尺度函数 $\sigma$，由 (2.11) 给出的符号是椭圆的，也就是说，除了属于类 $S^{\alpha}(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$ 之外，它还满足

$$\inf_{(x,\eta)\in\mathbb{T}^d\times\mathbb{Z}^d}(1+|\eta|)^{-\alpha}|p_\alpha(x,\eta)| > 0.$$

这意味着 [35, 定理 4.9.6] 对于任意 $N \in \mathbb{N}_0 \cup \{\infty\}$，都存在一个算子$q_{-\alpha}^{(N)}(\cdot,\ D)$，其符号为

$$q_{-\alpha}^{(N)}(\cdot,\cdot) := \sum_{j=0}^{N} q_{-\alpha}^{j}(\cdot,\cdot) \in S^{-\alpha}(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d),$$

使得

$$q_{-\alpha}^{(N)}(\cdot, D) \circ p_\alpha(\cdot, D) - I,$$

对每个 $N$，它都是一个符号属于 $S^{-N-1}(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$ 的伪微分算子。更准确地说，我们可以取 $q_{-\alpha}^{0}(\cdot,\ \cdot) = p_\alpha(\cdot,\ \cdot)^{-1}$；关于高阶项 $q_{-\alpha}^{j}(\cdot,\ \cdot),\ j \geq 1$ 的递归公式，参见 [35, 定理 4.9.13] 。

因此，若 $X$ 是 SPDE (2.10) 的一个解（由椭圆性可知，至少模去一个无穷光滑项后，它作为随机元素属于 $H^{\alpha-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$），那么我们可以用 $q_{-\alpha}^{(N)}(\cdot,\ D)\Psi$ 来近似 $X$，这里是指模去一个平滑项，即

$$X - q_{-\alpha}^{(N)}(\cdot, D)\Psi \in H^{\alpha-d/2-\epsilon+N+1}(\mathbb{T}^d) \tag{2.14}$$

以概率 1 成立。当 $N = 0$ 和 $\alpha > d$ 与 $d$ 相对接近时，这一点在粗糙特征的重建中已经非常有用，正如我们将在第 4.2 和 4.4 小节中看到的那样。

总之，对于非齐次随机偏微分方程 (2.10) 的近似解，我们有以下结构性质。此处提及的泛函分析性质和高斯协方差结构的细节可参见附录 A.1 和 A.2。

PROPOSITION 2.2. 设 $q_{-\alpha}(\cdot, D) := q_{-\alpha}^{(N)}(\cdot, D)$，$N \in \mathbb{N}_0 \cup \{\infty\}$ 是上述讨论的式 (2.10) 中伪微分算子 $p_\alpha(\cdot, D)$ 的任意一个近似参数子，其对应的符号为 $q_{-\alpha}(\cdot,\cdot)$。假设 $\alpha > d$。

那么，随机偏微分方程 (2.10) 的近似解 $q_{-\alpha}(\cdot, D)\Psi$ 作为随机元素存在于 *Hölder* 空间 $C^r(\mathbb{T}^d)$ 中，对任意 $r \in (0, \alpha-d)$ 均成立；且 $q_{-\alpha}(\cdot, D)\Psi$ 是一个中心高斯场，其协方差算子为

$$\mathcal{C} := q_{-\alpha}(\cdot, D) \circ q_{-\alpha}^{\intercal}(\cdot, D)$$

在(2.5)的意义下，其中 $q_{-\alpha}^{\intercal}(\cdot, D)$ 表示算子 $q_{-\alpha}(\cdot, D)$关于 $\mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)|_{C^\infty(\mathbb{T}^d)}$ 与 $C^\infty(\mathbb{T}^d)$之间对偶配对的转置。

我们有类*KL*展开

$$q_{-\alpha}(\cdot, D)\Psi(x) = \sum_{\eta\in\mathbb{Z}^d} q_{-\alpha}(x,\eta) w_\eta e^{i2\pi\eta\cdot x},$$

其中，$w_\eta$ 是白噪声 $\Psi$的傅里叶系数，几乎必然逐点收敛，并且具有误差估计

$$\sup_{x\in\mathbb{T}^d} \mathbb{E}\left[\left|q_{-\alpha}(\cdot, D)\Psi(x) - \sum_{|\eta|\leq M} q_{-\alpha}(x,\eta) w_\eta e^{i2\pi\eta\cdot x}\right|^2\right] \leq C_{q,\alpha,d} M^{d-2\alpha}.$$

上述出现的常数 $C_{q,\ \alpha,\ d}$ 在我们的应用场景中可以得到合理估计；参见附录 A.2。

**2.3. 函数型贝叶斯逆问题的设定**。简要回顾一下引言中的内容：我们考虑统计逆问题 (2.2)，其中 $X$ 是表示未知量的随机函数，而 $E$ 和 $Y$ 分别是加性噪声（与 $X$ 在统计上相互独立）和观测值。

具体而言，如第 2.2 小节所述，我们对 $X$ 的先验 $\mu_X$ 是某个 $\alpha > d$ 对应的 (2.10) 的近似解的分布律。从数学角度来看，对于任意 $\epsilon > 0$，$\mu_X$ 可视为可分希尔伯特空间 $H^{\alpha-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$ 上的博雷尔测度（参见附录 A.1 和 A.2）。我们假设噪声 $E$ 是一个 $m$ 维高斯向量，其协方差矩阵为 $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times m}$，并且前向算子

$$\mathcal{G}\colon H^{\alpha-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d) \to \mathbb{R}^m$$

是连续的。例如，如果 $\alpha - \epsilon > d$，逐点评价算子

$$H^{\alpha-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d) \ni \xi \mapsto \mathcal{G}(\xi) := \big(\xi(x_1), \xi(x_2), \cdots, \xi(x_m)\big) \in \mathbb{R}^m$$

对任意 $\{x_1, x_2, \cdots, x_m\} \subset \mathbb{T}^d$，由Sobole夫嵌入定理（见附录 A.2）可知其是连续的。

在这些假设下，逆问题(2.2)的函数型贝叶斯公式为

$$\frac{\mathrm{d}\mu_{X|Y=\boldsymbol{y}}}{\mathrm{d}\mu_X}(\xi) \propto \rho_\Sigma\big(\boldsymbol{y} - \mathcal{G}(\xi)\big), \quad \xi \in H^{\alpha-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d), \tag{2.15}$$

其中 $\rho_\Sigma\colon\ \mathbb{R}^m \to (0,\infty)$表示 $E$的密度函数。详情参见例如 [38,定理6.31] 或 [22, 定理3.3]（就后一文献而言，还有一个更一般的结果）。

尽管观测 $Y$ 的分布是连续的，因而条件概率测度$\mu_{X|Y=\boldsymbol{y}}$严格来说仅对几乎所有的 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$有定义，但(2.15)的右端关于 $\boldsymbol{y}$ 和 $\xi$都是有界且连续的。这意味着我们可以将(2.15)给出的分布视为对所有$\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$的典范后验，并且由控制收敛定理，我们有

$$\mu_{X|Y=\boldsymbol{y}'} \longrightarrow \mu_{X|Y=\boldsymbol{y}} \quad \text{as} \quad \boldsymbol{y}' \to \boldsymbol{y}$$

在 $H^{\alpha-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$上的Borel概率测度空间中，例如相对于全变差度量。

**3. 非齐次先验的计算算法**。本节介绍一种计算算法，该算法从先验分布 $\mu_X$中采样随机函数，从而促进空间非齐次性。为便于阅读，算法以 $d = 1$为例进行介绍，此时空间变量 $x$ 和频率变量 $\eta$ 的离散化可以表示为一个二维张量。必要时，我们将介绍高维情况下算法构造的更多细节。

原则上，从先验 $\mu_X$ 中抽取的样本对应于白噪声的一个右端项实现下，随机偏微分方程（SPDE）（2.10）的解。形式上，我们可以按照公式（2.13）之后的讨论来看待这个解。

考虑对一维环面进行离散化

$$\bar{x} := \{x_i = i\Delta_x \,|\, i = 0, \cdots, N_x - 1\},$$

whe其中 $\Delta_x = 1/N_x$ 表示空间步长，以及一个截断的频带

$$\bar{\eta} := \{\eta_i = i - N_\eta | i = 0, \cdots, 2N_\eta\}$$

对于某个 $N_\eta \in \mathbb{N}$。这种对频率变量的截断方式使我们能够考虑式（2.13）中白噪声 $\Psi$ 的 KL 型展开。

令 $\psi\colon\ \mathbb{T} \to \mathbb{R}$ 为沿着对应于频率 $[-N_\eta, N_\eta] \cap \mathbb{Z}$ 的傅里叶基函数，对 $\Psi$ 的一个实现进行截断展开，即

$$\psi(x) := \sum_{0 \le i \le 2N_\eta} \psi_{\eta_i} e^{\boldsymbol{i} 2\pi \eta_i \cdot x}, \quad x \in \mathbb{T}, \tag{3.1}$$

其中 $\psi_\eta := \widehat{\Psi}(\eta)$ 表示白噪声 $\Psi$ 在 $\eta \in \mathbb{Z}$ 时的傅里叶系数。对于典范实值白噪声，傅里叶系数可采样为 $\psi_0 \sim \mathcal{N}(0, 1)$ 和 $\psi_\eta = (a + \boldsymbol{i}b)/\sqrt{2}$，其中 $\eta \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$，$a$，$b$ 独立同分布$\sim \mathcal{N}(0, 1)$，其依赖结构如下:

$$\psi_{-\eta} = \overline{\psi_\eta} \quad \text{for all } \eta \in \mathbb{Z}, \qquad \psi_{\eta'} \perp\!\!\!\perp \psi_\eta \quad \text{if } \eta' \neq -\eta;$$

参见附录 A。我们令张量 $S$ 存放这些傅里叶系数，即 $[S]_i := \psi_i$对于 $0 \le i \le 2N_\eta$。

为了陈述涉及截断参数近似的计算算法（见第 2.2 小节），我们回顾一下有限差分算子 $\Delta_\eta^\gamma$以及在周期泰勒展开中熟悉的微分算子 $D_x^{(\gamma)}$（第 3 节）。 [35, 4]。

Definition 3.1. ***(i)*** 对于函数 $F\colon\ \mathbb{Z} \to \mathbb{C}$，定义 $\Delta_\eta F$ 为函数 $\eta \mapsto F(\eta + 1) - F(\eta)$。对于整数 $\gamma > 1$，定义

$$\Delta_\eta^\gamma := \underbrace{\Delta_\eta \cdots \Delta_\eta}_{\gamma \ times}.$$

对于 $d \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$，函数 $F\colon\ \mathbb{Z}^d \to \mathbb{C}$ 和 $\gamma \in \mathbb{N}^d$，定义

$$\Delta_\eta^\gamma := \Delta_{\eta_1}^{\gamma_1} \cdots \Delta_{\eta_d}^{\gamma_d},$$

其中约定 $\Delta_{\eta_k}^{\gamma_k} F$ 作用于函数

$$\eta' \mapsto F(\eta_1, \cdots, \eta_{k-1}, \eta', \eta_{k+1}, \cdots, \eta_d). \tag{3.2}$$

***(ii)*** 对于足够光滑的函数 $f\colon\ \mathbb{T} \to \mathbb{C}$ 和 $\gamma \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$，定义

$$D_x^{(\gamma)} f := \prod_{j=0}^{\gamma-1} \left( \frac{1}{\boldsymbol{i} 2\pi} \frac{\partial}{\partial x} - j \right) f.$$

对于 $d \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ 和 $\gamma \in \mathbb{N}^d$，定义微分算子

$$D_x^{(\gamma)} = D_{x_1}^{(\gamma_1)} \cdots D_{x_d}^{(\gamma_d)},$$

在 $\mathbb{T}^d$上，其中 $D^{(\gamma_k)_{x_k}}$ 按坐标方式理解，如(3.2)所示。

***(iii)*** 对于充分正则的函数 $p\colon\ \mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d \to \mathbb{C}$ 与 $\gamma \in \mathbb{N}^d$，$D_x^{(\gamma)} p$ 与 $\Delta_\eta^{(\gamma)} p$分别被理解为作用于空间变量和频率变量的作用。

回顾第 2.2 小节中的讨论，我们感兴趣的是与该符号相关联的随机偏微分方程。

$$p_\alpha(x,\eta) = \left(\sigma(x) + |\eta|^2\right)^{\alpha/2}, \tag{3.3}$$

其中，$\sigma \in C^\infty(\mathbb{T}^d)$由严格为正的常数从下方和上方界定，$|\cdot|$ 是 $\mathbb{R}$ 和 $\alpha > d = 1$上的标准 $\ell_2$范数。我们将 $P_\alpha^\gamma$ 定义为一个离散张量，它相对于 $x$在 $\bar{x}$ 和 $\bar{\eta}$上对 $D_x^{(\gamma)} p_\alpha$ 进行求值，即

$$[P_\alpha^\gamma]_{i,j} = D_x^{(\gamma)} p_\alpha(x_i, \eta_j), \qquad i \in \{0,\dots,N_x - 1\},\ j \in \{0,\dots,2N_\eta\}.$$

接下来，我们还将在二维张量$Q$上应用有限差分算子 $\Delta_\eta^\gamma$；注意，用“Python 风格”的术语来说，我们有

$$\Delta_\eta Q = Q_{:,1:} - Q_{:,:-1},$$

因此，算子 $\Delta_\eta$ 会使张量 $Q$ 在第二个分量上的维数减少一。由此，为了应用 $\gamma$阶有限差分，原始张量 $Q$应使用数量适当的额外节点进行采样。

现在，我们给出随机偏微分方程 (2.10) 解的一个近似离散化，以便从 $\mu_X$中抽取一个样本。不过，我们不直接考虑 (2.13)，而是先用截断参数 ix 对其进行近似

$$\xi = [p_\alpha(\cdot, D)]^{-1}\Psi \approx q_{-\alpha}^{(N)}(\cdot, D)\Psi, \tag{3.4}$$

其中 $\xi \sim \mu_X$，近似是按照（2.14）的含义来理解的。根据伪微分算子的定义（2.12），我们由此得到近似的截断展开

$$\xi(x) \approx \sum_{0 \le i \le 2N_\eta} q_{-\alpha}^{(N)}(x, \eta_i)\psi_{\eta_i} e^{\boldsymbol{i}2\pi\eta_i \cdot x}, \quad x \in \mathbb{T}, \tag{3.5}$$

其中 $\psi_{\eta_i}$ 是白噪声（3.1）的傅里叶系数。

接下来定义张量 $q_{-\alpha}^{(N)}(x_i,\ \eta_j)$，其中包含展开式（3.5）中的离散化项。根据 [35, 定理 4.9.13], ，我们有

$$q_{-\alpha}^{(N)}(x_i, \eta_j) = \sum_{k=0}^{N} [Q_{-\alpha}^k]_{i,j},$$

其中求和项张量可以通过以下递归关系计算

$$\begin{aligned} Q_{-\alpha}^0 &= [P_\alpha^0]^{\circ -1}, \\ Q_{-\alpha}^N &= -Q_{-\alpha}^0 \circ \cdot \left( \sum_{\substack{0 \le k < N \\ |\gamma| = N-k}} \frac{1}{\gamma!} \Delta_\eta^\gamma Q_{-\alpha}^k \circ \cdot P_\alpha^\gamma \right). \end{aligned}$$

这里 $\circ\cdot$ 和 $\circ - 1$ 分别表示逐元素乘法和求逆。

注意，在空间齐次的特殊情况下，即当 $\sigma$ 为常数时，$P_\alpha^\gamma \equiv 0$对于 $\gamma > 0$成立，因此 $Q_{-\alpha}^N = [P_\alpha^0]^{\circ -1}$对所有 $N$均成立。换言之，伪微分算子 $p_\alpha(\cdot, D)$ 只需对其符号求逆即可求逆。

记 $\mathcal{F}^{-1}$ 为离散逆傅里叶变换，并回忆一下， $S$ 是承载白噪声离散化的张量，即对于 $0 \le i \le 2N_\eta$，有 $[S]_i = \psi_{\eta_i}$。然后，根据 (3.1) 和 (3.5)， $\xi \sim \mu_X$ 的离散化可由下式得到

$$\xi(x_i) \approx \mathcal{F}^{-1}([Q_{-\alpha}^N]_{i,:} \circ \cdot S), \qquad i = 1, \dots, N_x. \tag{3.6}$$

此处 $[Q_{-\alpha}^{(N)}]_{i,:}$ 表示从第一个索引中提取第 $i$ 个切片。

我们在下面的算法中总结了 $\xi \sim \mu_X$ 的采样过程。

**算法 3.1** 从非齐次先验中采样 $\xi \sim \mu_X$

**要求：** 白噪声 $S$ 的实现、符号 $p_\alpha(x, \eta)$（如式 (3.3) 所示）以及截断项 $N$

计算张量 $P_\alpha^\gamma$，其中 $\gamma = 0, \dots, N-1$。
组装微分张量 $\Delta_\eta$
计算基本拟参数项 $Q_{-\alpha}^0$
**对于** $k = 1, \dots, N$ **do**
  **对于** $\gamma = 1, \dots, k$ **执行**
    $\Delta_\eta^\gamma Q^{k-\gamma} = \Delta_\eta[\Delta_\eta^{\gamma-1} Q_{-\alpha}^{k-\gamma}]$
    $T_\gamma := \Delta_\eta^\gamma Q^{k-\gamma} \circ \cdot P_\alpha^\gamma$
  **结束循环**
  $Q_{-\alpha}^k = Q_{-\alpha}^{k-1} - Q_{-\alpha}^0 \circ \cdot \left( \sum_{0 \le \gamma < k} \frac{1}{\gamma!} T_\gamma \right)$
**结束循环**
**对于** $i = 1, \dots, N_x$ **执行** $\xi(x_i) = \mathcal{F}^{-1}([Q_{-\alpha}^N]_{i,:} \circ \cdot S)$ ▷ $\mathcal{F}^{-1}$ 是离散逆傅里叶变换**结束循环**

**确保：** 离散实现 $\xi \sim \mu_X$

**4. 数值演示。** 在本节中，我们考察本文所引入的非齐次先验的计算性能。我们首先 рассмотр一个一维示例，在该示例中，我们数值研究伪微分算子 $q_{-\alpha}^{(N)}$ 的截断，并研究其实现。所得的随机偏微分方程（SPDE）（2.10）的近似解将与底层随机偏微分方程的有限差分离散化进行比较。

随后，我们在贝叶斯去噪场景中采用这一先验：具体而言，我们使用非齐次先验构建去噪问题，并分析由此得到的后验分布。最后，我们通过将其应用于一个 X 射线计算机断层成像问题，结束数值实验。

**4.1. 先验离散化。** 此处我们研究具有主符号 (3.3) 的 (2.10) 形式的非齐次先验，其分量为

$$\sigma(x) = 0.05 + 2 \exp\left( -\frac{(x - 0.5)^2}{0.5} \right), \qquad \alpha = 2. \tag{4.1}$$

我们首先将 (3.5) 中的展开系数 $q_{-\alpha}^{(N)}(x, \eta_i)$ 可视化。我们先将空间域 $[0, 1]$ 离散化为 65 个网格点，并选取整数频率 $-32 \le \eta \le 31$。然后，我们按照算法 3.1 中的第一个循环，计算拟参数展开的前四项。

展开系数 $q_{-2}^i(x, \eta)$ 绘制于图 1 中。请注意，颜色映射采用对数刻度显示，清楚地展现了展开系数衰减的速度

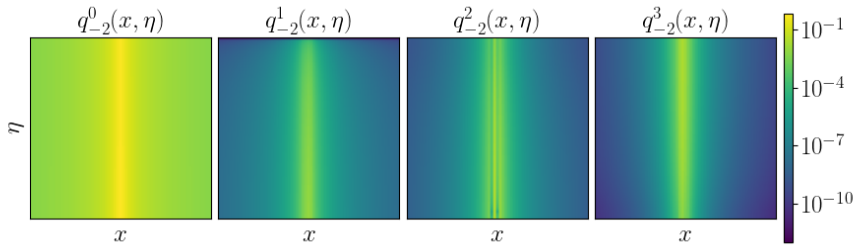


FIG. 1. *Coefficients of the SPDE* (2.10) *with principal symbol* (4.1)

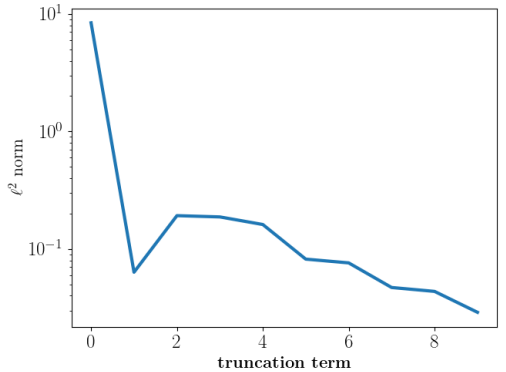


FIG. 2。 *$\ell^2$-norm of the expansion coefficients of the SPDE* (2.10) *with principal symbol* (4.1)*, up to integration constant.*

。此外，第 0 项包含了大部分质量。这一点也在图 2 中得到展示，其中我们给出了前 10 项的范数（相差一个积分常数）。

这些结果证实了我们对展开项快速衰减的直观观察——这一事实也在 [35, 定理 4.913], 中得到了量化，其意义是$q^N_{-\alpha}(\cdot,\cdot) \in S^{-\alpha-N}(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$。不过，我们注意到，当截断指标较大时，数值方法会变得不稳定。伪微分算子的计算方法仍是一个活跃的研究领域，开发能够处理大规模截断的稳定方案则留待未来工作。

在下一个实验中，我们研究非齐次随机偏微分方程的解。我们按照截断白噪声 (3.1) 构造 (2.10) 的噪声右端项。

作为比较，我们还通过在实数轴上使用中心有限差分法对 $\sigma(x)$ 和 $\Delta$进行离散化，来实现式 (2.10) 的有限差分方法。两种方法均使用相同的截断白噪声实现作为源项。

图 3 展示了按照算法 3.1 得到的非齐次随机偏微分方程 (2.10) 的解，分别对应 $\alpha = 1.5$ （第一行）和 $\alpha = 2$ （第二行），两者使用相同的白噪声实现。图 (b)–(d) 和 (g)–(i) 分别对应 $q^0_{-\alpha}$、 $q^1_{-\alpha}$ 和 $q^2_{-\alpha}$。这些截断层级之间的差异在视觉上微乎其微。作为比较，我们还在图 (e) 和 (j) 中分别给出了 $\alpha = 1.5$ 和 $\alpha = 2$ 的有限差分解。

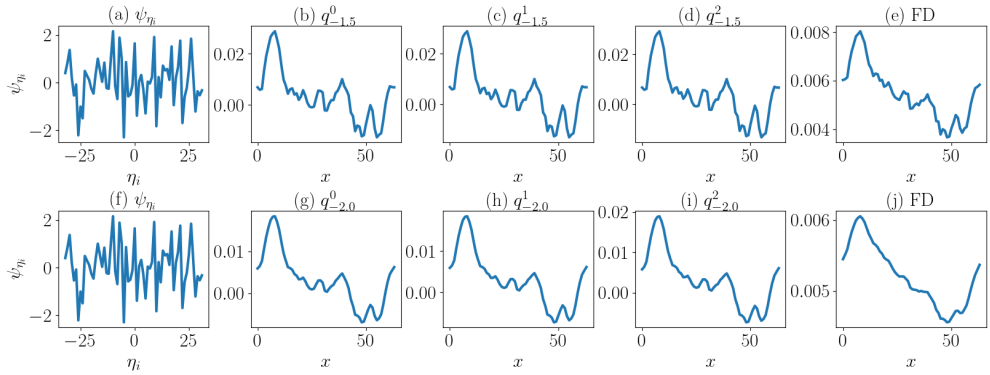


FIG. 3.

*Comparison between the truncated parametrix solution of the SPDE* 2 10 *and the* (.) *finite-difference method.*

请回忆， $q^{(N)}_{-\alpha}$ (·， $D$)Ψ 与 (2.10) 的精确解之间相差一个平滑项，如 (2.14) 所示。因此，尽管我们并不期望这两种方法得到的解在形状或振幅上完全一致，但图 3 中的解展现出了惊人的相似性。尤其是，截断参数近似很好地捕捉到了粗糙度特征。

我们注意到，随着 $\alpha$ 增加，解会变得更加平滑，这与 $\alpha$ 决定随机场正则性的事实一致。然而，截断参数子与有限差分近似之间的差异会随着$\alpha$增加而增大，因为对于较大的 $\alpha$，(2.14)中的平滑余项会变得更加显著。

**4.2. 一维去噪。** 这里，我们在去噪逆问题的贝叶斯表述中采用前文介绍的非齐次先验。我们选择这个简单的例子，旨在说明如何在实践中使用此类先验，以及如何解读结果。

去噪问题对应于(2.4)，其中前向算子 $\mathcal{G}$ 是对 $X$进行均匀空间采样，也就是说，它是在网格上的恒等算子。为生成观测向量 $\boldsymbol{y}$，我们首先从先验中抽取一个实现 $\xi \sim \mu_X$，然后应用(2.4)中的前向模型，得到 $\boldsymbol{y}$的相应实现。这种数据生成方法通常称为逆犯罪 [18] ，在推广新方法时通常会避免使用。不过，我们在此采用这种方法纯粹是为了演示和便于复现。随后，我们将在二维的先验外示例中考察该方法的性能；在该示例中，非均匀性的影响更加显著。

我们首先对问题进行离散化。先验的离散化遵循第4.1小节中的讨论：将区间 $[0,1]$ 均匀离散为65个点，并引入整数频率 $-32 \le \eta \le 31$。此外，我们用 $N = 5$ 项截断先验的伪微分算子展开，并遵循算法 3.1，针对某个噪声向量 $S$计算先验分布中的一个样本。

记 $\mathcal{P}\colon S \mapsto \xi$，即可引入离散对数后验：

$$\log p(\boldsymbol{\xi}|\boldsymbol{y}) = -\frac{1}{2\sigma^2_{\text{noise}}}\|\boldsymbol{y} - \mathcal{P}(S)\|_2^2 - \frac{1}{2}\|S\|_2^2 + c, \tag{4.2}$$

其中 噪声标准差 $\sigma_{\text{noise}}$ 按照关系 $\sigma_{\text{noise}}$ =选取

$0.01 \times \|\boldsymbol{y}\|_2$ 针对无噪声信号 $\boldsymbol{y}$，且 $c \in \mathbb{R}$ 为常数。

我们可以使用点估计来探索这一后验分布，例如最大后验（MAP）估计量——即使 (4.2) 最大化的 $S$ ——或后验均值。此外，我们可以估计后验分布的矩，以量化不确定性。近似这些矩的一种标准方法是马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）采样 [18], ，该方法生成近似后验分布的点云，其中样本集中在后验概率较高的区域。典型示例包括 Metropolis–Hastings算法；有关这类方法的综述，请参见 [18, 12, 30] 。此外，还有专为无限维贝叶斯逆问题设计的 MCMC 格式，例如 [6, 5]。

在本研究中，我们采用无转向采样器（NUTS），这是一种自适应的哈密顿蒙特卡罗（HMC）变体 [15, 27]。HMC 通过引入辅助动量变量扩展参数空间，并利用哈密顿动力学来解释由此得到的联合分布。候选样本通过近似模拟哈密顿能量恒定的轨迹生成，而对此类轨迹可使用高效的数值积分器（例如蛙跳格式）。NUTS 通过检测模拟路径何时开始折返（即出现“U 形转向”），自动调整轨迹长度，从而无需手动调节蛙跳步数，并提高采样效率。尽管 NUTS 并非专为无限维后验分布设计，但我们的数值实验表明，它在存在非齐次先验时表现稳健。不过，仍需进一步研究，以开发适用于无限维情形的最优采样策略。在这个测试问题中，我们选取 200 个样本对 NUTS 方法进行预热（调优），然后从后验分布中抽取 2000 个样本。

我们采用以下经验表达式计算后验均值和 MAP 估计：

$$S_{\mathrm{mean}} = \frac{1}{N_{\mathrm{sample}}} \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{sample}}} S^{(j)}, \qquad S_{\mathrm{MAP}} = \arg\max_{S} \log p(\boldsymbol{\xi}(S)|, \boldsymbol{y}), \tag{4.3}$$

并将逐点 95% 最高后验密度区间（HPD） [2] 作为不确定性的度量。请注意，HPD 是包含 95%（逐点）后验概率质量的最短区间。我们将 $S_{\mathrm{mean}}$ 和 $S_{\mathrm{MAP}}$ 在映射 $S \mapsto \mathcal{P}(S)$ 下的推前记为 $\xi_{\mathrm{mean}}$ 和 $\xi_{\mathrm{MAP}}$ ，由此得到相应的函数估计。

图4展示了该推断问题在噪声水平为 1%、5% 和 10% 时的结果。在所有噪声水平下，我们观察到后验均值和 MAP 估计均为连续函数。噪声水平较低时，这些估计与真实函数非常接近；而噪声水平较高时，与 MAP 估计相比，后验均值的可靠性较低。此外，随着噪声水平升高，重建的不确定性也系统性地增加。

此外，图5展示了估计得到的系数 $\psi_i$。我们观察到，该方法能够准确恢复低频分量。此外，随着噪声水平升高，高置信度估计的参数数量会减少。

总而言之，我们的结果表明，非齐次先验的使用方式与其齐次版本大体相同，也可以像其他无限维齐次先验一样进行解释。因此，这些方法可以轻松融入通常采用齐次先验的应用中，从而得以迅速推广。

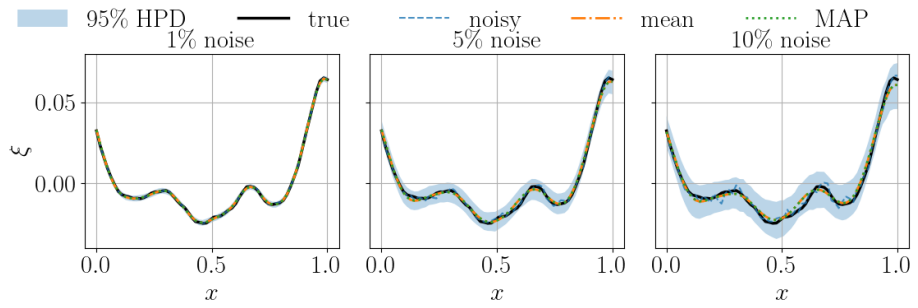


FIG. 4. *MAP estimation and HPD interval in the denoising problem with various noise levels.*

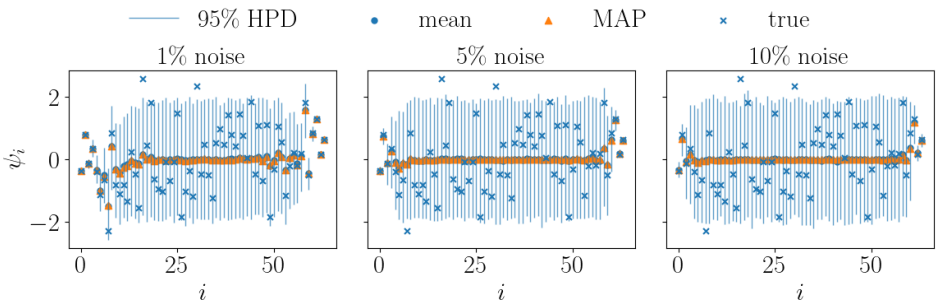


FIG. 5. *MAP estimation and HPD interval for Fourier coefficients in the denoising problem with various noise levels.*

在下一节中，我们将展示非齐次先验在非均匀性（即 $\sigma(x)$）未知、必须与函数 $\xi$ 联合推断的情形下所具有的优势。这凸显了非齐次先验的适用范围超越了齐次先验所能实现的范围。

**4.3. 二维逆问题。**本节中，我们考察非齐次先验在二维情形下的性能，并将其应用于有限角度X射线计算机断层成像问题。第4.1小节中的数值实验表明，非齐次先验对应的伪微分算子的拟参数展开可以大幅截断。因此，我们仅保留展开的第一项（即第0项），这既简化了数值实现，又保留了先验足够的灵活性。我们还在层次贝叶斯框架中使用这些先验，并将非均匀性视为未知量。本节最后将其应用于非均匀性未知情况下的有限角度X射线计算机断层成像重建。

**4.4. 二维层次非均匀先验。**本节构造一种能够适应非均匀性的层次先验分布。首先令 $\sigma(x)$ 为服从对数高斯分布的随机函数。然后，我们可以将其与本文前文讨论的非齐次先验结合，构造一个由其非均匀性参数化的分布族 $\mu_X^\sigma$。

我们可以将这样一个层次问题形式化地建模为

$$
\begin{aligned}
&Z \sim \mathcal{N}(0, a_1(a_2-\Delta)^4),\\
&X \sim \mu_{X|Z=\sigma(x)}, \quad \text{i.e. } c(x)(10^{(a_3+\sigma(x))}-\Delta)X = \Psi.
\end{aligned} \tag{4.4}
$$

这里， $Z$ 是描述样本局部非齐次性的随机函数，因此 $10^{(a_3+Z}{}_{(x)}$ 表示 $X$实现中空间变化的逆相关长度。这里，我们稍微滥用一下符号，用 $\sigma$ 表示相关长度的指数。 $Z$ 的协方差由（$a_2 - c_1\Delta$）$^4$, 给出，它产生具有相对较大空间相关长度的光滑场，而 $a_1$ 控制总体方差。在这个测试问题中，我们选择 $a_2 = 6.25$ 和 $a_2 = 2.5$，以获得所需的空间相关长度范围；然后，使用傅里叶谱方法，通过求解（$a_2 - \Delta$）$^2\sigma$（$x$） $= \psi$（$x$），从$\mathcal{N}$（0， $a_1$（$a_2 - \Delta$）$^4$）中抽取一个实现 $\sigma$（$x$），其中白噪声实现 $\psi$（$x$）定义于（3.1），其傅里叶系数收集在张量 $S_1$中。在傅里叶域中，这对应于

$$
\widehat{\sigma}_{\eta_i} = \frac{1}{c_1}(6.25 + |\eta_i|^2)^{-2}\psi_{\eta_i}, \tag{4.5}
$$

其中， $\eta_i$ 表示离散整数频率的第 $i$个二维多重指标（例如 $\eta_i$ =($i_1$， $i_2$)），而 $\widehat{\sigma}_{\eta_i}$ 是相应的离散傅里叶系数。将分量 $\frac{1}{a_1}(6.25 + |\eta_i|^2)^{-2}$ 汇集为张量 $\Sigma_{\text{hyper}}$。函数 $\sigma(x)$ 随后通过离散傅里叶逆变换得到，即 $\mathcal{F}^{-1}(\Sigma_{\text{hyper}} \circ \cdot S_1)$，由此得到离散值 $\sigma(x_i)$ 、 $i = 1$， ....., $N_x$。我们选择 $c_1$ 使得 $\mathsf{Var}(Z) = 1$，即

$$
a_1 = \sum_{|\eta_i|\in\mathbb{N}^2} (a_2 + |\eta_i|^2)^{-4}, \tag{4.6}
$$

在我们的数值设置中，这得到 $a_1 = 6.4 \times 10^6$。

生成一个实现 $\sigma(x)$ 后，我们可以组装与 $X$ 的协方差相对应的伪微分算子。我们采用式 (3.4) 中的近似，并在第一项之后截断符号展开，即

$$
\xi = [p_1(\cdot, D)]^{-1}\Psi \approx q^0_{-1}(\cdot, D)\Psi. \tag{4.7}
$$

此次截断的近似误差由 (2.14) 刻画。在这一简化下，计算可化为

$$
Q^0_{-1} = [P^0_1]^{\circ -1}, \qquad [P^0_1]_{i,j} = p_1(x_i, \eta_j) = c_2(x_i)\big(10^{2.5+\sigma(x_i)} + |\eta_i|^2\big), \tag{4.8}
$$

这给出了参数化伪微分算子的零阶近似。

与第 4.1 小节的讨论相比，我们引入局部归一化因子 $c(x)$。这是必要的，因为空间变化的相关长度$_{10^{a_3+\sigma(x_i)}}$ 会影响 $X$ 的实现的平均振幅。若不进行归一化，空间相关长度较小的区域将产生局部方差趋于零的实现。图 7 展示了这一效应，下面将进一步阐述。为避免这种退化，我们选择 $c(x)$，使得

$$
c(x_i)^2 = \sum_{\eta_i\in\mathbb{N}^2} (10^{2.5+\sigma(x_i)} + |\eta_i|^2)^{-2}. \tag{4.9}
$$

因此，第二个方程 (4.4) 可以理解为求解形式为 (2.10) 的随机偏微分方程，其中有色噪声为 $c(x)^{-1}\Psi$。假设可以计算这种有色噪声的傅里叶变换，或将其近似到足够精确的程度，就可以按照第 3 节中的方法求解。

给定 (3.1) 中定义的白噪声实现 $\psi(x)$，其离散傅里叶系数收集在张量 $S_2$ 中，我们可据此计算近似样本 $\xi$

$$\xi(x_i) \approx \mathcal{F}^{-1}([Q_{-1}^0]_{i,:} \circ \cdot S_2), \qquad i = 1, \ldots, N_x. \tag{4.10}$$

We 在算法 4.1 中总结从该层次先验进行的采样过程。

**算法 4.1**从分层非均匀先验 (4.4) 中抽取一个样本**要求：**分别为超先验和先验的白噪声实现 $S_1$ 和 $S_2$。常数 $a_2$ 和 $a_3$。根据 (4.6) 计算 $a_1$ 计算张量 $[\Sigma_{\text{hyper}}]_i = \frac{1}{a_1}(a_2 + |\eta_i|^2)^{-2}$计算 $\mathcal{F}^{-1}(\Sigma_{\text{hyper}} \circ \cdot S_1)$，得到 $\sigma(x_i)$，对于 $i = 1, \ldots\ldots, N_x$根据 (4.9) 计算 $c(x_i)$ 根据 (4.8) 计算 $Q_{-1}^0$ **对于** $i = 1, \ldots\ldots, N_x$ **执行**由 (4.10) 求出 $\xi(x_i)$**结束循环 确保：**离散实现 $\xi \sim \mu_{X,\ Z}$

我们在图 6 中给出了非齐次层次先验的代表性样本。第一列展示了空间变化的相关长度 $10^{a_3+\sigma\ (x)}$ 的实现。固定该随机场后，我们从 $X \sim \mu_{X|\sigma(x)}$中抽取三个样本，其定义见 (4.4)。正如预期，$\sigma(x)$ 值较大的区域在 $\xi$中呈现更精细尺度的特征，体现了预期的非均匀性。作为比较，我们还展示了未应用归一化因子时得到的样本，即在 (4.4) 中取$c(x) \equiv 1$，并见图 7。在这种情况下，$\xi$ 在 $\sigma(x)$ 较大的区域呈现出明显的振幅衰减，展示了前文讨论的方差消失效应。

在许多逆问题中，未知量通常是分段常数。为适应这一结构，我们将非均匀水平集先验定义为一种非线性推前映射，它将 $X$ 变换为分段常数随机场

$\tilde{}$ $\tilde{}X$。一种自然的选择是使用 Heaviside 函数 $H$，令 $X(x) = c^+ + (c^+ - c^-)H(X)$，其中 $c^+$ 和 $c^-$ 对应两个水平。然而，为了计算最大后验估计并使用 NUTS 采样算法，我们需要一种可微变换，同时仍能生成近似分段常数的样本。这可以通过以下形式的 Sigmoid 映射实现：

$$\tilde{X}(x) = \frac{1}{1 + \exp(-kX(x))}, \tag{4.11}$$

其中，参数 $k$ 控制跃迁的锐利程度。从这种非均匀水平集先验中抽取的样本如图8所示。与前一种情况类似，逆 $\sigma$ 较大的区域对应着较细小的夹杂体。下一节将采用这一先验来处理有限角度X射线计算机断层成像问题。

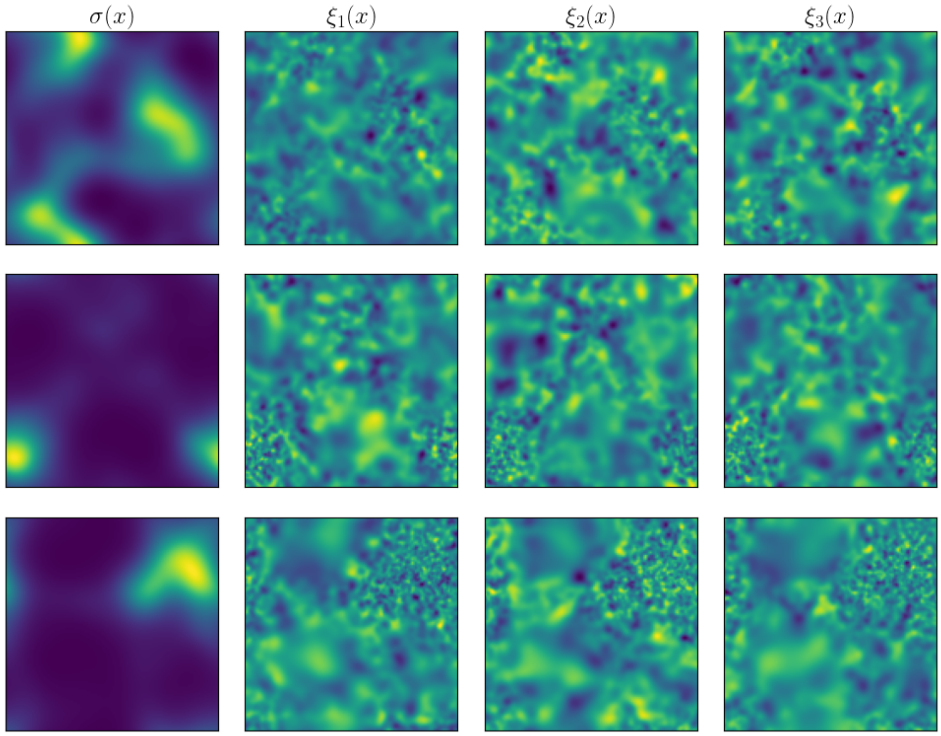


FIG. 6。 *Smooth prior samples with inhomogeneity*

**4.5 有限角度X射线计算机断层成像**。 计算机断层成像（CT）是一种成熟的方法，它利用投影数据重建物体横截面的图像；这些数据表示X射线束穿过物体时强度的损失或衰减。根据朗伯-比尔定律[13]，，X射线的衰减可用线积分或投影进行数学建模。

X射线计算机断层成像的一个简单数学模型由衰减场的*Radon* 变换表示，该变换由线性算子 $\mathcal{R}$ 表示，可将二维衰减场转换为一维投影，这些投影称为正弦图。沿平行直线进行投影的情形称为X射线计算机断层成像的平行束几何。在这种情况下，Radon 变换可以用以下积分方程表示：

$$\mathcal{R}[\xi](\theta, s) = \int_{\ell(\theta,s)} \xi(x,y)\, d\ell, \qquad \theta \in [0,\alpha),\ s \in [-1,1], \tag{4.12}$$

其中，积分沿直线 $\ell(\theta,\ s)$ 进行，该直线由角度 $\theta$ 和截距 $s$ 参数化。 $\theta \in [0, 2\pi)$。我们假设 $\xi \equiv 0$ 在单位圆盘之外。

在许多应用中，由于物理限制，无法在区间 $[0, 2\pi)$ 内完成 $\theta$ 的一整周旋转。具有 $\alpha \ll \pi$ 的情形称为有限角度X射线计算机断层成像，这类问题通常是不适定的，即未知 $\xi$ 的许多种构型都可能与数据相符。

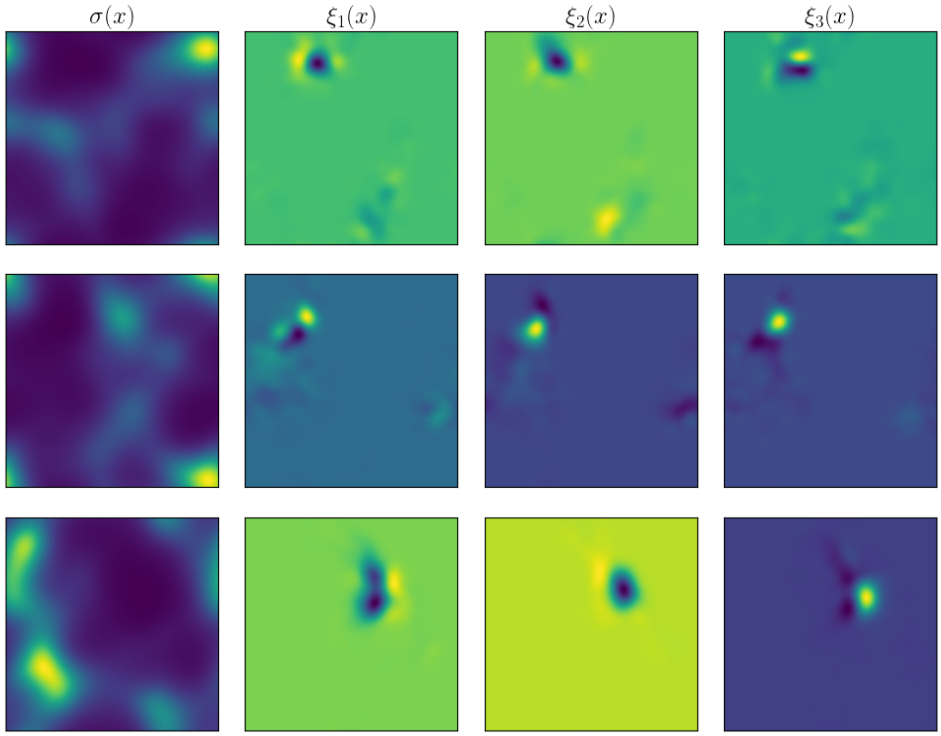


FIG. 7。 *Smooth un-normalized prior samples with inhomogeneity*

本节考虑具有 $\alpha = \pi/4$ 的有限角度X射线CT，同时有时会与具有 $\alpha = \pi$的全角度X射线计算机断层成像进行比较。我们将 $s \in [-1, 1]$ 离散化为 64 或 128 个探测器单元，并根据探测器单元的离散化级别，使用含 64 或 128 个点的高斯求积法则对 (4.12) 进行离散化。此外，我们将 $\theta$ 离散化为在 $[0, \pi]$ 中包含 250 个等距投影，并在有限角度情形下提取其中的一个子集。我们可以将离散前向映射形式化地写为

$$Y = \mathcal{R}X + \varepsilon,$$

其中， $X$是未知截面图像， $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2_{\text{noise}} I)$ 是相对噪声水平为 1% 的高斯加性噪声，即对于某个真实截面图像 $\xi_{\text{true}}$，若 $\boldsymbol{y}_{\text{true}} = \mathcal{R}\xi_{\text{true}}$，则有 $\sigma_{\text{noise}} = 0.01 \times \|\boldsymbol{y}_{\text{true}}\|_2$。

为针对该 X射线计算机断层成像问题建立贝叶斯逆问题，我们引入非齐次超参数 $Z$ ，并为 $(X, Z)$ 配备非齐次先验 (4.4)，定义联合对数后验为

$$\log p(X, Z|Y) = -\frac{1}{2\sigma^2_{\text{noise}}} \|\boldsymbol{y} - \mathcal{R}(\xi(\sigma))\|_2^2 - \|S_1\|_2^2 - \|S_2\|_2^2 + c. \tag{4.13}$$

其中， $S_1$ 和 $S_2$ 是第4.4小节中讨论的 $\Psi_1$ 和 $\Psi_2$ 的离散化， $\boldsymbol{y}$对应X射线衰减数据，而by $\xi(\sigma)$指的是以下映射的拼接：

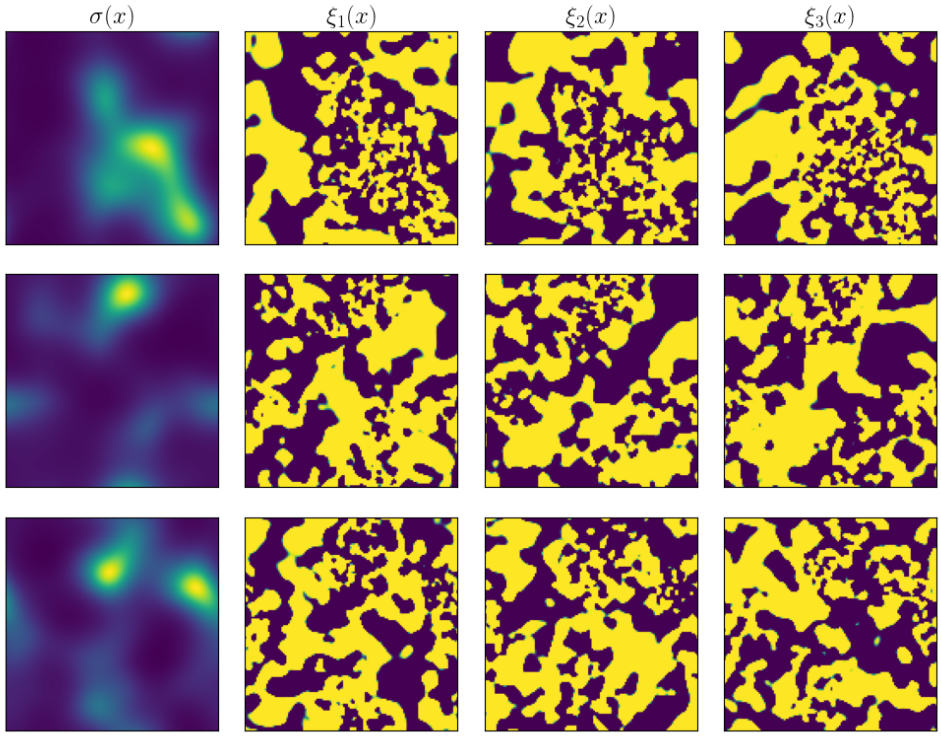


FIG. 8。 *Piecewise constant prior samples with inhomogeneity*

映射 $S_1 \mapsto \sigma(x)$和$(\sigma(x)\ S_2) \mapsto \xi$，遵循第4.4小节。

为创建分片常数且超出先验范围的非齐次样本，我们采用一种贪心算法，在单位圆盘内放置直径和中心随机的圆盘夹杂物。在该算法中，当施加夹杂体不重叠条件时，生成的图像自然会包含夹杂物较小的区域和夹杂物较大的区域。本节使用的真实图像见图9和图10。

我们建议将该层次问题的最大后验点进行近似评估，并将其作为该有限角度X射线CT问题的点估计。我们使用L-BFGS优化算法来最大化式（4.13）中定义的代价函数。L-BFGS是一种拟牛顿优化算法，仅使用少量存储的向量对来近似逆海森矩阵或负对数后验，因此对于大规模问题而言非常高效 [29]。在实践中，我们使用自动微分和PyTorch [31]来求解最大化问题。

我们采用上文讨论的步骤，对3幅随机生成的图像估计最大后验点。在本实验中，我们为探测器像素以及线积分的求积近似选择128个离散化点。我们将该实验在全角度设置下进行一次，并在有限角度设置下再进行一次。结果见图9，其中估计的 $\sigma$共用同一色标。我们报告，层次先验能够正确识别较小空间的区域

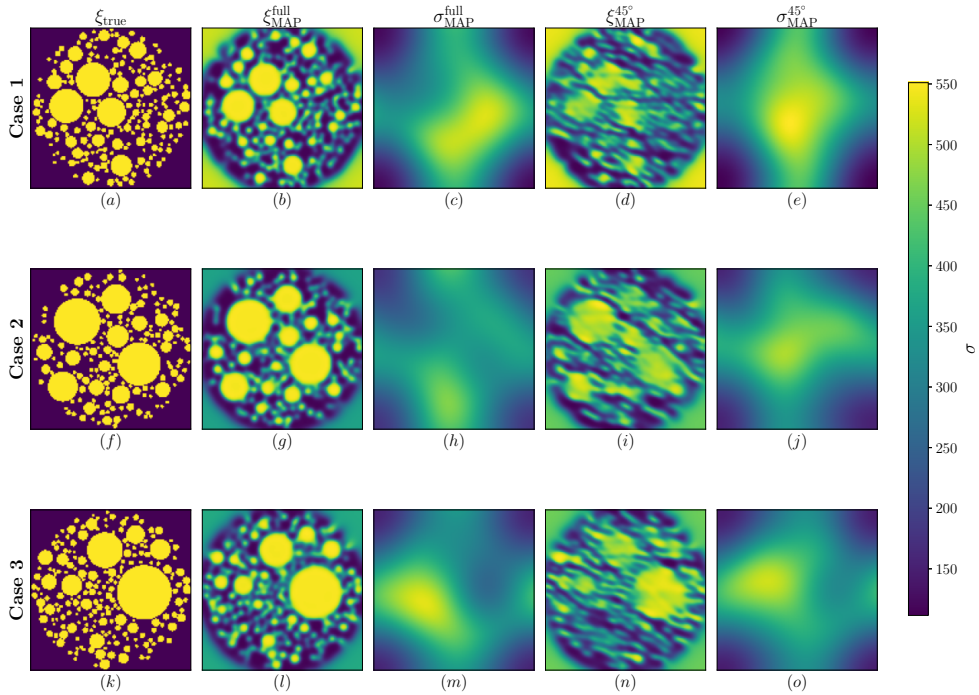


FIG. 9. *MAP estimation of the attenuation and inhomogeneity of 2 randomly generated and out of prior attenuation field. The first column present the ground truth attenuation fields the , second and third columns correspond to the MAP estimate for full angle X-ray CT respectively and the last two columns correspond to the MAP estimate of the attenuation and inhomogeneity for a limited-angle X-ray CT.*

相关性，如 $\sigma$的最大后验估计所示。尽管我们注意到，在有限角度情形下 $\xi$ 和 $\sigma$ 的估计有所下降，但重建结果与全角度重建以及真实图像保持一致。此外，在案例2中，模体呈现出大夹杂体更为均匀的分布，与其他情形相比，$\sigma$ 的估计具有更小的空间变异，表明检测到了更为均匀的模体。我们指出，45度有限角度X射线CT是一个具有挑战性的计算问题，而我们的重建显著改进了标准重建方法（典型重建见图10）。因此，我们得出结论：通过识别高空间相关性和低空间相关性区域，层次方法降低了重建对数据的依赖。

接下来，我们将 $\sigma$ 固定为其最大后验估计，并尝试量化 $\xi$重建中的不确定性。我们创建一个新的随机真实衰减场，并使用 64 个探测器像素和求积点对问题进行离散化。针对该测试问题，$\sigma$（$x$）和 $\xi$的最大后验估计结果如图 11 所示。我们注意到，较大的 $\sigma$ 能够正确识别含有小型夹杂物的区域。此外，最大后验估计还会在 $\sigma$值较高的区域中包含更小的夹杂物。我们指出，即使在有限角度设置下，$\xi$ 的最大后验估计也会优先考虑夹杂物。作为对比，我们在图 10 中给出了该有限角度X射线CT问题的滤波反投影（FBP） [13] 重建结果。采用这种方法得到的重建

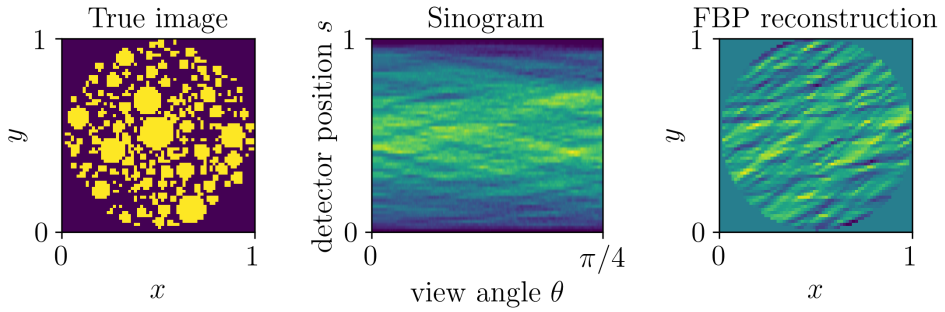


FIG. 10. *True X-ray image together with its limited angle attenuation data and an FBP reconstruction.*

显著改善了FBP重建。我们指出，还有一些更先进的重建方法会优先考虑分片常数图像，例如全变分正则化重建 [13]。然而，鉴于数据如此稀疏（有限角度设置），我们预计与FBP重建相比，不会有显著改善。通过识别相关长度较小/较大的区域，我们的方法可以大幅降低重建对数据的依赖。

为量化重建中的不确定性，我们将 $\sigma(x)$固定为其最大后验估计，然后按照第4.2小节所述，对 $\xi$ 执行不确定性量化过程。我们使用NUTS采样方法，从条件后验分布中抽取样本（该分布以 $\sigma(x)$的最大后验估计为条件）。我们使用Pyro Python软件包中的NUTS方法 [4] ，进行200步预热，并抽取2000个后验样本。我们报告，所有 $S_2$ 分量的有效样本量（由Pyro内置功能计算，该功能基于样本的自相关函数）至少为1628，表明后验样本质量很高，适用于均值和后验方差的遍历估计。

我们在图 10 中给出了 $\xi$ 的后验均值和逐点方差。可以看到，均值与最大后验估计之间存在显著差异。需要提醒读者的是，本节所构建的X射线计算机断层成像问题是非线性的，这是由先验的分片常数特性导致的。对于非线性多峰后验，最大后验估计与均值通常并不一致。作为比较，我们还在图 12 中给出了一些后验样本。显然，后验样本仍保留了先验的包含结构，这与最大后验估计类似。因此，我们认为，后验均值可能并不是这个问题的合适点估计。

我们还提供逐像素方差，作为估计不确定性的指标。我们注意到，不确定性的方向与 45 度线对齐，这证实了微局部分析所预期的不确定性 [13]。此外，高不确定性区域与最大后验估计中的一些伪影相对应。

**5. 结论**。我们通过定义非平稳 Whittle–Mat´ern 型随机场，将其构造为与白噪声卷积的结果（等价地，可将其表征为伪微分随机偏微分方程的解），由此为贝叶斯逆问题引入了一类新的非齐次高斯先验。所得先验符合标准的无限维贝叶斯适定性框架，并可通过

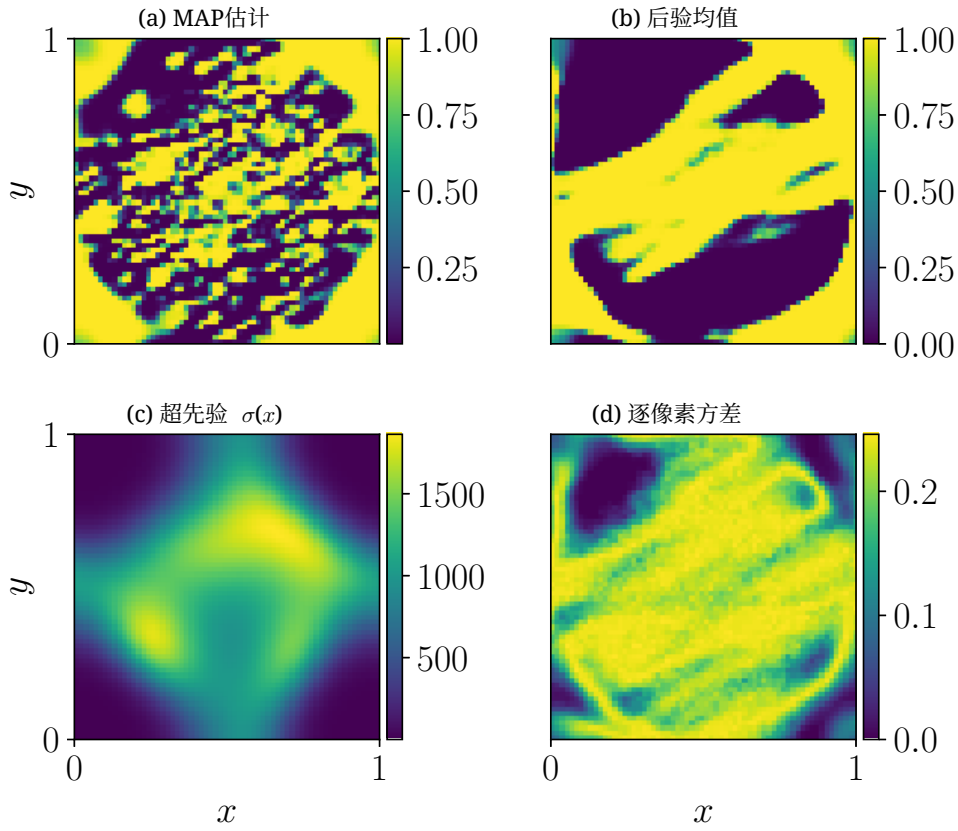


FIG. 11. *Estimation and uncertainty visualization of the X-ray CT problem with hierarchical inhomogeneous prior. This plot shows (a) the MAP estimation of the image (b) posterior mean , estimation of the image, (c) MAP estimation of the inhomogeneity (d) pixel-wise variance as a measure of uncertainty*

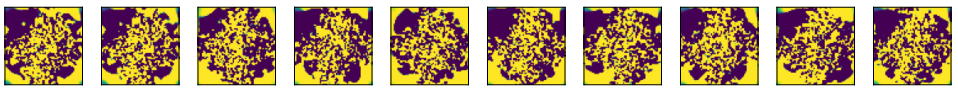

FIG. 12。 *Samples from the posterior distribution of the X-ray CT problem with hierarchical inhomogeneous prior*

基于参数子（parametrix）的近似实现高效采样，且截断误差可量化。一维去噪和二维有限角度X射线计算机断层成像的数值结果表明，在数据受限情形下，该方法能改善重建结果并提供更有参考价值的不确定性量化。

未来工作的自然方向包括：通过修改伪微分表述中的微分/算子符号来纳入局部各向异性结构，针对大规模逆问题中的这些先验开发专门的采样策略，以及设计仍保持稳定的数值稳健方案

以适用于拟参数展开的高阶截断。

**附录 A. 白噪声分析。**

本节简要回顾 $d$ 维环面 $\mathbb{T}^d := [0,1)^d$ 上高斯白噪声的存在性及其一些映射性质。为此，我们回顾光滑复值周期测试函数空间 $C^\infty(\mathbb{T}^d)$，并赋予其由以下半范数生成的拓扑

$$f \mapsto \|\partial^\alpha f\|_{L^\infty(\mathbb{T}^d)}, \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^d.$$

关于周期分析以及此处出现的其他几个函数空间的定义，更详细的介绍可参见例如 [35，第 3 章和 4]。我们将函数 $f \in C^\infty(\mathbb{T}^d)$ 的傅里叶变换 $\widehat{f}\colon \mathbb{Z}^d \to \mathbb{C}$ 定义为

$$\mathbb{Z}^d \ni \eta \mapsto \int_{\mathbb{T}^d} f(x) e^{-\boldsymbol{i}2\pi\eta\cdot x}\,\mathrm{d}x \in \mathbb{C},$$

其中，“$\mathrm{d}x$”表示 $\mathbb{T}^d$ 上的标准（未归一化）勒贝格测度。

设 $w_0$、$(a_\eta)_{\eta\in\mathbb{Z}^d\setminus\{0\}}$ 和 $(b_\eta)_{\eta\in\mathbb{Z}^d\setminus\{0\}}$ 是相互独立的随机变量，其分布为 $\mathcal{N}(0,1)$。$\mathbb{T}^d$ 上的（实）白噪声 $\Psi$ 定义为

$$\Psi(x) := w_0 + \sum_{\eta\in\mathbb{Z}^d\setminus\{0\}} \left(a_\eta \cos(x\cdot\eta) + b_\eta \sin(x\cdot\eta)\right), \tag{A.1}$$

其中，级数的收敛是指在温和分布意义下的收敛。更准确地说，我们有

$$\left|\int_{\mathbb{T}^d} f(x)\cos(x\cdot\eta)\,\mathrm{d}x\right| \le C(f,d)(1+|\eta|)^{-(d+1)}$$

对所有 $\eta\in\mathbb{Z}^d$ 和测试函数 $f\in C^\infty(\mathbb{T}^d)$ 均成立；用 $\sin(\cdot)$ 替换 $\cos(\cdot)$ 时也同样成立。因此，例如，由于 $\mathbb{E}[\sum_{\eta\in\mathbb{Z}^d\setminus\{0\}}(1+|\eta|)^{-d-1}(|a_\eta|+|b_\eta|)] < \infty$，(A.1) 右端以概率 1 定义了 $f\in C^\infty(\mathbb{T}^d)$ 的一个博雷尔可测随机连续泛函。

经过相对简单的计算可知，$\Psi$ 的傅里叶变换为 $\widehat{\ }$，频率为 $\eta=0$ 时为 $\Psi(0) = w_0$，而对于 $\eta\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}$，则为

$$\widehat{\Psi}(\eta) = \frac{a_\eta + a_{-\eta}}{2} + \boldsymbol{i}\frac{b_{-\eta} - b_\eta}{2} =: w_\eta, \tag{A.2}$$

因此，当 $\eta\in\mathbb{Z}\setminus\{0\}$ 时，傅里叶系数满足 $w_\eta = w_{-\eta}$；否则,一它们是相互独立的圆对称复高斯随机变量。

进一步的计算表明，$\Psi$ 是一个实值高斯场，其含义是

$$(\langle\Psi, f_1\rangle, \langle\Psi, f_2\rangle, \cdots, \langle\Psi, f_n\rangle)$$

对于所有实值测试函数 $(f_j)_{j\in 1:n}\subset C^\infty(\mathbb{T}^d)$，它都是一个中心正态随机向量，其协方差结构为

$$\mathbb{E}\left[\langle\Psi, f\rangle\langle\Psi, g\rangle\right] = \langle f, g\rangle_{L^2(\mathbb{T}^d)} \tag{A.3}$$

对所有实值测试函数 $f$和 $g$均成立。因此，当 $fg\equiv 0$时，$\langle\Psi,\ f\rangle$和 $\langle\Psi,\ g\rangle$相互独立。后一事实意味着，尽管 $\Psi$ 无法实现为逐点定义的随机函数，但在分布意义上，它具有“每一点处的独立值” [9,第三章，第 4] 节。

**A.1. Sobolev空间中的白噪声**。回顾一下，对于 $s \in \mathbb{R}$，Sobolev空间 $H^s(\mathbb{T}^d)$ 定义为由缓增分布 $u \in \mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)$ 构成的线性空间，满足

$$\|u\|_{H^s(\mathbb{T}^d)} := \sqrt{\sum_{\eta\in\mathbb{Z}^d} (1+|\eta|^2)^s |\widehat{u}(\eta)|^2} < \infty.$$

注意到，上述级数中的每一项都是 $u \in \mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)$ 的连续函数，这意味着扩展范数

$$\|\cdot\|_{H^s(\mathbb{T}^d)} \colon \mathcal{D}'(\mathbb{T}^d) \to [0,\infty]$$

是温和分布空间上的 Borel可测函数。

从现在起固定 $\epsilon > 0$。白噪声 $\Psi$ 具有 $(-d/2-\epsilon)$-正则性，即

$$\mathbb{P}\left(\Psi \in H^{-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)\right) = 1.$$

例如， [39, 定理 3.4] 中给出了复白噪声在 $\mathbb{T}^d$ 上的这一结果；但对我们的目的而言，只需注意到，根据 (A.2),

$$\mathbb{E}\left[\|\Psi\|^2_{H^{-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)}\right] = \sum_{\eta\in\mathbb{Z}^d} (1+|\eta|^2)^{-d/2-\epsilon} \mathbb{E}\left[|w_\eta|^2\right] < \infty.$$

接下来注意到， $\Psi$ 的分布律的一个版本可以实现为可分 Hilbert 空间 $H^{-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$ 上的 Borel 概率测度。相关论证实质上已包含在例如 [21, 命题 3.1]，的证明中；为求完整，下面简要回顾其细节。另见 [14, 附录 A]，其中给出了实数轴$\mathbb{R}$上局部Sobolev空间中的高斯白噪声的类似结果。

关键在于，对于每个 $f \in H^{-d/2-\varepsilon}(\mathbb{T}^d)$ 和 $r > 0$，我们可以将 $f$ 处半径为 $r$ 的闭 $H^{-d/2-\epsilon}$球写成

$$\bigcap_{N\in\mathbb{N}} \left\{ u \in \mathcal{D}'(\mathbb{T}^d) \,:\, \sum_{\eta\in\mathbb{Z}^d,\, |\eta|\le N} (1+|\eta|^2)^{-d/2-\epsilon} |\widehat{u-f}|^2 \le r^2 \right\},$$

交集中的每个集合根据连续性都是 $\mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)$ 的闭子集。这意味着 $\mathcal{D}'(\mathbb{T})$ 中的闭球是 $H^{-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$ 的 Borel子集，而这一结论继而推广到 $H^{-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$ 的所有 Borel 子集。

**A.2. 白噪声与伪微分算子**。回顾先前在附录 A.2 中引入的 H¨orman-der 符号类 $S^m(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$， $m \in \mathbb{R}$。伪微分算子 $q(\cdot, D)$ 的符号为 $q(\cdot,\cdot)$，其作用于缓增分布的定义如下：若 $u \in \mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)$，则 $q(\cdot, D)u \in \mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)$ 定义为

$$\langle q(\cdot,D)u, f\rangle = \langle u, q^\intercal(\cdot,D)f\rangle, \quad f \in C^\infty(\mathbb{T}^d), \tag{A.4}$$

其中， $q^\intercal(\cdot,\ D)$ 是算子 $q(\cdot,\ D)$ 的转置（相对于 $\mathcal{D}'(\mathbb{T}^d)_{C^\infty(\mathbb{T}^d)}$ 与 $C^\infty(\mathbb{T}^d)$ 之间的对偶配对），其符号为 $q^\intercal(\cdot,\ \cdot) \in S^m(\mathbb{T}^d,\ \mathbb{Z}^d)$；例如参见 [35,定理 4.7.3]。注意，若符号 $q(\cdot,\ \cdot)$ 满足

$$q(x,\eta) = \overline{q(x,-\eta)} \qquad \forall (x,\eta) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d \tag{A.5}$$

（我们的应用中正是如此），则 $q(\cdot,\ D)$ 和 $q^\intercal(\cdot,\ D)$ 将实值测试函数映射为实值测试函数。

那么回顾上一小节可知，在我们的设定中，白噪声 $\Psi$ 是 Sobolev空间 $H^{-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$ 中的一个随机元素，其中 $\epsilon > 0$ 是任意给定的固定值。

设 $q(\cdot, D)$ 是某个 $\alpha > 0$ 对应的类 $S^{-\alpha}(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$ 中的伪微分算子，并满足 (A.5)。例如，根据 [35, 推论 4.8。3]， $q(\cdot, D)\Psi$ 是 Sobolev空间 $H^{\alpha-d/2-\epsilon}(\mathbb{T}^d)$ 中的一个随机元素。根据 (A.3) 和 (A.4) 附近的讨论，这个随机分布是一个实值高斯场，其协方差结构为

$$\mathbb{E}\left[\langle q(\cdot, D)\Psi, f\rangle\langle q(\cdot, D)\Psi, g\rangle\right] = \langle q^\intercal(\cdot, D)f, q^\intercal(\cdot, D)g\rangle_{L^2(\mathbb{T}^d)}$$

对所有测试函数 $f$ 和 $g$ 都成立，因此 $q(\cdot, D)\Psi$ 的协方差算子为

$$\mathcal{C} = q(\cdot, D) \circ q^\intercal(\cdot, D)$$

其意义如 (2.5) 所述。

特别地，如果 $\alpha > d$，我们可以取 $\epsilon > 0$ 使得 $\alpha > d + \epsilon$。那么 $q(\cdot, D)\Psi$ 是一个正则性阶为

$$\alpha - d/2 - \epsilon > d/2,$$

的随机场。根据索博列夫嵌入定理，该随机场的样本函数属于 H¨older 空间 $C^{\alpha-d-\varepsilon}(\mathbb{T}^d)$（或者在 $\alpha - d - \varepsilon$为整数时，属于阶为 $\alpha - d - \varepsilon$ 的齐格蒙德空间） [36, 定理 3.5.4 和 3.5.5]。

尽管上述协方差算子 $\mathcal{C}$ 的特征值通常不易确定，但在此情况下， $q(\cdot, \cdot) \in S^{-\alpha}(\mathbb{T}^d \times \mathbb{Z}^d)$随 $\alpha > d$ 的衰减直接推出随机函数 $q(\cdot, D)\Psi$的如下 Karhunen-Lo`ève 类展开:

$$q(\cdot, D)\Psi(x) = \sum_{\eta\in\mathbb{Z}^d} q(x, \eta)w_\eta e^{i2\pi\eta\cdot x},$$

该展开关于 $x \in \mathbb{T}^d$ 绝对逐点收敛，且此结论以概率 1 成立。

上述展开的收敛速率可按如下方式估计。对于满足 (A.5) 的符号 $q(\cdot,\ \cdot)$，绝对逐点收敛结合富比尼定理可得

$$\begin{aligned}
&\sup_{x\in\mathbb{T}^d} \mathbb{E}\left[\left|q(\cdot, D)\Psi(x) - \sum_{|\eta|\le M} q(x, \eta)w_\eta e^{i2\pi\eta\cdot x}\right|^2\right] \\
&\quad= \sup_{x\in\mathbb{T}^d} \sum_{|\eta|>M} |q(x, \eta)|^2 \\
&\quad\le \sup_{x\in\mathbb{T}^d,\, \eta\in\mathbb{Z}^d} \left(|\eta|^\alpha |q(x, \eta)|\right)^2 \sum_{|\eta|>M} |\eta|^{-2\alpha} \\
&\quad\le \sup_{x\in\mathbb{T}^d,\, \eta\in\mathbb{Z}^d} \left(|\eta|^\alpha |q(x, \eta)|\right)^2 \sum_{k=M}^{\infty} A_d(k)k^{-2\alpha},
\end{aligned}$$

其中， $A_d(k)$表示满足 $k < |\eta| \le k+1$的格点 $\eta \in \mathbb{Z}^d$ 数量。该数量按 $k^{d-1}$ 的阶增长（例如，对于.....，可以更明确地量化其增长）。

$d \in \{1, 2\}$)，因此后一个级数趋于零，其速度为 $M^{d-2\alpha}$，当 $M \to \infty$时。还需指出，在第4节的二维实验中，其中 $q(\cdot,\ \cdot) := q_{-\alpha}(\cdot,\ \cdot)$简单地定义为 $p_\alpha(\cdot,\ \cdot)^{-1}$，后一个上确界为 $\leq 1$。

## 参考文献


[1] S. Agapiou and S. Wang, *Laplace priors and spatial inhomogeneity in bayesian inverse problems* 30 2024 878 10 3150 22 1563 , 伯努利, ( ), 第 –910 页, https://doi.org/ . / -BEJ .

[2] J. M. Bernardo, A. F. Smith, and M. Berliner, *Bayesian theory*, 第 586 卷, Wiley Online Library, 1994, https://doi.org/10.1002/9780470316870.

[3] S. Bhadra, V. A. Kelkar, F. J. Brooks, and M. A. Anastasio, *On hallucinations in tomographic image reconstruction* 40 2021 3249 , IEEE 医学成像汇刊, ( ), 第 – 3260 页, https://doi.org/10.1109/TMI.2021.3077857.

[4] E. Bingham, J. P. Chen, M. Jankowiak, F. Obermeyer, N. Pradhan, T. Karaletsos, R. Singh P. Szerlip P. Horsfall and N. D. Goodman *Pyro: Deep universal probabilistic programming* 2018 , , , , , 机器学习研究杂志, ( ).

[5] G. Boehl, *Ensemble MCMC sampling for robust Bayesian inference*, 技术报告, IMFS 工作论文系列, 2022.

[6] S. L. Cotter, G. O. Roberts, A. M. Stuart, and D. White, *MCMC methods for functions: modifying old algorithms to make them faster* 28 2013 424 446, , 统计科学, ( ), 第 – 页 https://doi.org/10.1214/13-sts421.

[7] M. Dashti and A. M. Stuart, *The Bayesian Approach to Inverse Problems*, Springer 国际出版公司, 2017, 第 311–428 页, https://doi.org/10.1007/978-3-319-12385-1 7.

[8] L. Dubchak, _ *Modern renewable energy sources and methods for detecting their defects*, 计算机系统与信息技术, (2024), 第 21–26 页, https://doi.org/10.31891/ csit-2024-2-3.

[9] I. M. Gel'fand and N. Y. Vilenkin, *Applications of Harmonic Analysis*, 广义函数第 4 卷, Academic Press, 纽约, 1964.

[10] M. G. Genton, *Classes of kernels for machine learning: a statistics perspective*, 机器学习研究杂志, 2 (2001), 第 299–312 页.

[11] G. Grubb, *Functional calculus of pseudodifferential boundary problems*, 第 65 卷, Springer 科学与商业媒体, 2012, https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0769-6.

[12] J. Hammersley, *Monte Carlo methods*, Springer 科学与商业媒体, 2013.

[13] P. C. Hansen, J. Jørgensen, and W. R. Lionheart, *Computed tomography: algorithms, insight and just enough theory* 2021, 10 1137 1 9781611976670 , , SIAM, https://doi.org/ . / . .

[14] T. Helin, M. Lassas, and L. Oksanen, *Inverse problem for the wave equation with a white noise source* 332 2014 933 , 数学物理通讯, ( ), 第 – 953 页, https: //doi.org/10.1007/s00220-014-2115-9.

[15] M. D. Hoffman, A. Gelman, et al., *The No-U-Turn sampler: adaptively setting path lengths in Hamiltonian Monte Carlo* 15 2014 1593 1623 , 机器学习研究杂志, ( ), 第 – 页.

[16] L. Hörmander, *The Analysis of Linear Partial Differential Operators III: Pseudo-Differential Operators* 274 , 数学科学基础丛书第 卷, Springer-Verlag, 柏林, 1985, https://doi.org/10.1007/978-3-540-49938-1.

[17] I. A. Ibragimov and Y. A. Rozanov, *Gaussian random processes*, 第 9 卷, Springer 科学与商业媒体, 2012, https://doi.org/10.1007/978-1-4612-6275-6.

[18] J. P. Kaipio and E. Somersalo, *Statistical and computational inverse problems*, Springer, 2005, https://doi.org/10.1007/b138659.

[19] K. Kong, K. Dyer, C. Payne, I. Hamerton, and P. M. Weaver, *Progress and trends in damage detection methods maintenance and data-driven monitoring of wind turbine blades–a review* 44 2023 390 412, , , 10 1016 , , 页 https://doi.org/ . /j.ref. 2022.08.005.

[20] H.-H. Kuo, *Gaussian measures in banach spaces*, 巴拿赫空间中的高斯测度, (2006), 第 1–109 页, https://doi.org/10.1007/BFb0082007.

[21] S. Kusuoka, *The support property of a Gaussian white noise and its applications*, 东京大学理学部纪要。第一辑 A，数学, 29 (1982), 第 387–400 页.

[22] S. Lasanen, *Non-Gaussian statistical inverse problems. Part II: Posterior convergence for approximated unknowns* 6 2012 267 287, , 逆问题与成像, ( ), 第 – 页 https: //doi.org/10.3934/ipi.2012.6.267.

[23] J. Latz, *On the well-posedness of Bayesian inverse problems*, SIAM/ASA 不确定性量化杂志, 8 (2020), 第 451–482 页, https://doi.org/10.1137/19M1247176.

[24] F. Lindgren, D. Bolin, and H. Rue, *The SPDE approach for Gaussian and non-Gaussian fields: 10 years and still running* 50 2022 100599, , 空间统计学, ( ), 第 p. https://doi.org/ 10.1016/j.spasta.2022.100599. 专题：空间统计学的影响。[25] F. Lindgren, H. Rue, and J. Lindström, *An explicit link between Gaussian fields and Gaussian Markov random fields: The stochastic partial differential equation approach*, 英国皇家统计学会会刊B辑: 统计方法学, 73 (2011), 第 423–498 页, https://doi.org/10.1111/j.1467-9868.2011.00777.x. [26] V. S. Mandrekar and L. Gawarecki, *Stochastic analysis for Gaussian random processes and fields: With applications* 2015, 10 1201 18622 , CRC出版社, https://doi.org/ . /b . [27] T. Marwala, R. Mbuvha, and W. T. Mongwe, *Hamiltonian Monte Carlo methods in machine learning* 2023 , Elsevier, .

[28] B. Matérn, *Spatial Variation*, 统计学讲义第 36 卷, Springer-Verlag, 纽约, 第 2 版, 1986, https://doi.org/10.1007/978-1-4615-7892-5. [29] J. Nocedal, *Updating quasi-Newton matrices with limited storage*, 计算数学, 35 (1980), 第 773–782 页, https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1980-0572855-7. [30] A. B. Owen, *Monte Carlo theory, methods and examples*, https://artowen.su.domains/mc/, 2013.[31] A. Paszke, S. Gross, F. Massa, A. Lerer, J. Bradbury, G. Chanan, T. Killeen, Z. Lin, N. Gimelshein L. Antiga A. Desmaison A. Kopf E. Yang Z. DeVito M. Raison , , , , , , , A. Tejani S. Chilamkurthy B. Steiner L. Fang J. Bai and S. Chintala , , , , , , *PyTorch: An imperative style, high-performance deep learning library*, 载于《神经信息处理系统进展》第 32 卷, Curran Associates, Inc., 2019. [32] E. Porcu, M. Bevilacqua, R. Schaback, and C. J. Oates, *The Matérn model: A journeythrough statistics, numerical analysis and machine learning*, 统计科学, 39 (2024), 第 469–492 页, https://doi.org/10.1214/24-STS923. [33] L. Roininen, J. M. Huttunen, and S. Lasanen, *Whittle-Matérn priors for bayesian statistical inversion with applications in electrical impedance tomography*, 逆问题与成像, 8 (2014), https://doi.org/10.3934/ipi.2014.8.561. [34] H. Rue and L. Held, *Gaussian Markov Random Fields. Theory and Applications*, Chapman and Hall, 2005, https://doi.org/10.1201/9780203492024. [35] M. Ruzhansky and V. Turunen, *Pseudo-Differential Operators and Symmetries. Back- ground Analysis and Advanced Topics* ¨ 2010, 10 1007 , Birkhauser, https://doi.org/ . / 978-3-7643-8514-9.[36] H.-J. Schmeisser and H. Triebel, *Topics in Fourier analysis and function spaces*, Wiley, 1987.[37] M. Seeger, *Gaussian processes for machine learning*, 国际神经系统杂志, 14 (2004), 第 69–106 页, https://doi.org/10.1142/S0129065704001899. [38] A. M. Stuart, *Inverse problems: A Bayesian perspective*, 数值学报, 19 (2010), 第 451–559 页, https://doi.org/10.1017/S0962492910000061. [39] M. Veraar, *Regularity of Gaussian white noise on the d-dimensional torus*, 2010, https:// arxiv.org/abs/1010.6219. [40] P. Whittle, *Stochastic processes in several dimensions*, 国际统计学会公报, 40 (1963), 第 974–994 页.