Optimal regularized hypothesis testing in statistical inverse problems

Remo Kretschmann Daniel Wachsmuth Frank Werner



Computational Science and Engineering Amsterdam, 3 March 2023

▲ロ ▶ ▲周 ▶ ▲ 国 ▶ ▲ 国 ▶ ● の Q @

Introduction

Optimal regularized hypothesis testing

Adaptive hypothesis testing

Numerical results



Set-up

Consider statistical linear inverse problem

$$Y = T u^{\dagger} + \sigma Z,$$

where

T: *X* → *Y* bounded linear forward operator between real Banach space *X* and real Hilbert space *Y*,

▲□▶ ▲□▶ ▲ 三▶ ▲ 三▶ 三 のへぐ

•
$$u^{\dagger} \in \mathcal{X}$$
 unknown quantity of interest,

- σ > 0 noise level,
- Z Gaussian white noise process on \mathcal{Y} .

Estimation and inference of features

- X, Y typically function spaces such as L^p(Ω) or H^s(Ω) on some domain Ω ⊆ ℝ^d.
- Often one is not interested in whole function u[†] but in certain features of it such as modes, homogeneity, monotonicity, or support.
- Many features can be described by (family of) bounded linear functionals φ ∈ X*.
- We perform inference for such features by means of statistical hypothesis testing. Specifically, we test

$$H_0: \left\langle arphi, u^{\dagger}
ight
angle_{\mathcal{X}^* imes \mathcal{X}} = 0 \quad ext{against} \quad H_1: \left\langle arphi, u^{\dagger}
ight
angle_{\mathcal{X}^* imes \mathcal{X}} > 0.$$

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

Unregularized hypothesis testing

For $\varphi \in \operatorname{ran} T^*$, construct **unregularized test**

$$\Psi_0(Y) := \mathbf{1}_{\langle Y, \Phi_0 \rangle > c_0}$$

using probe element $\Phi_0\in\mathcal{Y}$ such that

$$\varphi = T^* \Phi_0.$$

- Critical value c₀ can be chosen such that Ψ₀ has prescribed level of significance α ∈ (0, 1).
- Ψ₀ has certain optimality properties [Proksch, Werner, Munk 2018].

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

Problems and solutions

Drawbacks

- **1**. Unregularized test Ψ_0 **not defined** for $\varphi \notin \operatorname{ran} T^*$.
- 2. Probe element Φ_0 is solution to **ill-posed equation**

 $T^*\Phi_0=\varphi.$

As a consequence, power of Ψ_0 can be arbitrarily close to level $\alpha.$

Our contribution

We resolve both of these issues by **maximizing** the **power** among a class of level- α tests based upon linear estimators.

Introduction

Optimal regularized hypothesis testing

Adaptive hypothesis testing

Numerical results

◆□▶ ◆□▶ ◆ ≧▶ ◆ ≧▶ ○ ≧ ○ � � �

A class of level- α tests

Consider test

$$\Psi_{\Phi}(Y) := \mathbf{1}_{\langle Y, \Phi \rangle > c}$$

with **arbitrary** probe element $\Phi \in \mathcal{Y}$.

Assumptions

There exists a pair $(\mathcal{V}, \mathcal{V}')$ of Banach spaces such that

 $1. \ \langle \mathbf{v}', \mathbf{v} \rangle_{\mathcal{X}^* \times \mathcal{X}} \leq \|\mathbf{v}'\|_{\mathcal{V}'} \|\mathbf{v}\|_{\mathcal{V}} \text{ for all } \mathbf{v} \in \mathcal{V} \cap \mathcal{X}, \ \mathbf{v}' \in \mathcal{V}' \cap \mathcal{X}^*,$

2.
$$u^{\dagger} \in \mathcal{V} \cap \mathcal{X}$$
 with $\|u^{\dagger}\|_{\mathcal{V}} \leq 1$

3. ran $T^* \subseteq \mathcal{V}'$ and $T^*: \mathcal{Y} \to \mathcal{V}'$ is bounded,

4. $\varphi \in \overline{\operatorname{ran} T^*}$.

For any Φ ∈ 𝒱, critical value c can be chosen such that Ψ_Φ has at most level α ∈ (0, 1) under these assumptions.

▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ▲□ ● ● ●

Optimal regularized hypothesis testing

For any
$$\Phi \in \mathcal{Y} \setminus \{0\}$$
, Ψ_{Φ} has **power**
$$\mathbb{P}_{u^{\dagger}} \left[\Psi_{\Phi}(Y) = 1 \right] = Q \left(q_{\alpha}^{\mathcal{N}} - \frac{\|T^* \Phi - \varphi\|_{\mathcal{V}'} - \langle Tu^{\dagger}, \Phi \rangle_{\mathcal{Y}}}{\sigma \|\Phi\|_{\mathcal{Y}}} \right),$$

where Q and $q_{\alpha}^{\mathcal{N}}$ are the cdf and α -quantile of $\mathcal{N}(0, 1)$. Find optimal probe element Φ^{\dagger} as minimizer of $J_{Tu^{\dagger}}^{\mathcal{Y}}$,

$$J^{\mathcal{Y}}_{\mathcal{T}u^{\dagger}}(\Phi) := rac{\|\mathcal{T}^{*}\Phi - \varphi\|_{\mathcal{V}'} - \langle \mathcal{T}u^{\dagger}, \Phi
angle_{\mathcal{Y}}}{\|\Phi\|_{\mathcal{Y}}}$$

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

Then $\Psi_{\Phi^{\dagger}}$ has maximal power among $\{\Psi_{\Phi} : \Phi \in \mathcal{Y}\}$.

Problem

In practice u^{\dagger} is unknown, so $J_{Tu^{\dagger}}^{\mathcal{Y}}$ is unaccessible.

Introduction

Optimal regularized hypothesis testing

▲□▶ ▲□▶ ▲ 三▶ ▲ 三▶ 三三 - のへぐ

Adaptive hypothesis testing

Numerical results

Adaptive hypothesis testing

• Choose probe element Φ as minimizer of $J_Y^{\mathcal{Z}}$,

$$J_Y^\mathcal{Z}(\Phi) := rac{\|\mathcal{T}^*\Phi - arphi\|_{\mathcal{V}'} - \langle Y, \Phi
angle_{\mathcal{Z}^* imes \mathcal{Z}}}{\|\Phi\|_{\mathcal{Z}}},$$

where $\mathcal{Z} \subset \mathcal{Y}$ is dense continuously embedded subspace such that data Y is **bounded** linear functional on \mathcal{Z} .

- Use two independent samples Y₁ and Y₂ of data, one to construct test, another to evaluate test on.
- Define adaptive test

$$\Psi^*(Y_2;Y_1) := egin{cases} \Psi_\Phi(Y_2) & ext{if } J_{Y_1}^\mathcal{Z} ext{ has global minimizer } \Phi \in \mathcal{Z}, \ 0 & ext{otherwise.} \end{cases}$$

Then Ψ^* has **level** α .

Computability

• Define **convex** surrogate functional $\hat{J}_{\mathbf{v}}^{\mathcal{Z}}: \mathcal{Z} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $\hat{J}_{\mathbf{V}}^{\mathcal{Z}}(e,s) := \|T^*e - s\varphi\|_{\mathcal{V}'} - \langle Y, e \rangle_{\mathcal{Z}^* \times \mathcal{Z}}.$ ▶ If $(e, s) \in \mathcal{Z} \times \mathbb{R}$ is solution to min $\hat{J}_{V}^{\mathcal{Z}}(e,s)$ subject to $\|e\|_{\mathcal{Z}} \leq 1, s \geq 0$ with $e \neq 0$, s > 0, then $\Phi = s^{-1}e$

・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・
 ・

is global minimizer of $J_Y^{\mathcal{Z}}$.

Introduction

Optimal regularized hypothesis testing

▲□▶ ▲□▶ ▲ □▶ ▲ □▶ □ のへぐ

Adaptive hypothesis testing

Numerical results

Numerical simulations: Deconvolution

Consider convolution operator Tu = h ∗ u on X = Y = L²(ℝ) with kernel h ∈ L¹(ℝ) given by

$$(\mathcal{F}h)(\xi) = \left(1 + 0.0009\xi^2\right)^{-2}$$
 for all $\xi \in \mathbb{R}$.

• **Question:** Is supp
$$u^{\dagger} \cap [0, I] = \emptyset$$
?

Choose

$$\mathcal{V}:=L^1(\mathbb{R}), \quad \mathcal{V}':=L^\infty(\mathbb{R}), \quad \mathcal{Z}=H^{0.51}(\mathbb{R}).$$

Choose critical value of all tests such that level is

$$\alpha = 0.1.$$

・ロト ・ 目 ・ ・ ヨト ・ ヨ ・ うへつ

Considered scenarios

Choose φ and u^{\dagger} as β -kernels.

- (S1) Compatible smooth scenario
- (S2) Compatible nonsmooth scenario
- (S3) Incompatible smooth scenario



▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ ▲□▶ □ のQで

Results – compatible smooth scenario (S1)



Figure: Exact power of unregularized test (——), optimal test (——), and empirical power of adaptive test (——) based upon 100 samples.

Results – compatible nonsmooth scenario (S2)



Figure: Exact power of unregularized test (——), optimal test (——), and empirical power of adaptive test (——) based upon 100 samples.

Results – incompatible smooth scenario (S3)



Figure: Exact power of unregularized test (——), optimal test (——), and empirical power of adaptive test (——) based upon 100 samples.

Conclusion

- For given feature $\varphi \in \overline{\operatorname{ran} T^*}$, optimal level- α test based upon linear estimator exists under a priori assumptions on u^{\dagger} .
- Adaptive test can be constructed by solving constrained convex optimization problem.
- Adaptive test allows testing of features for which unregularized testing is unfeasable due to ill-posedness.

Outlook

- Study power of adaptive test for other problems.
- Tikhonov-regularized hypothesis testing

References

- K. Proksch, F. Werner, A. Munk (2018).
 Multiscale scanning in inverse problems.
 Ann. Statist., 46(6B), doi:10.1214/17-AOS1669.
- R. Kretschmann, D. Wachsmuth, F. Werner (2022).
 Optimal regularized hypothesis testing in statistical inverse problems.
 Preprint, arXiv: 2212.12897.