

利用最小相对熵解线性反问题

一. 熵

1.1 熵 Entropy

Shannon 提出了熵的概念，解决了以上这个问题。对于上述离散型随机事件，可以用离散熵定义其不确定性：

熵是一个随机变量不确定性的度量。对于一个离散型随机变量 $X \sim p(x)$ ，其离散熵可以定义为：

$$H(X) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log p(x) \quad (1.1)$$

其中：花体 \mathcal{X} 表示为包含所有小 x 元素的集合， \log 以2为底。一个随机变量的熵越大，意味着不确定性越大，那么也就是说，该随机变量包含的信息量越大

由熵的定义，知道：

$$H(X) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log p(x) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log \frac{1}{p(x)} = E \left[\log \frac{1}{p(X)} \right] \quad (1.2)$$

即，熵实际上是随机变量 X 的函数 $\log \frac{1}{p(X)}$ 的期望。（注：必然事件的熵为0，因为必然事件不含有不确定性，也就是说不含有信息量）

1.2 相对熵 relative entropy

相对熵又被称为 Kullback-Leibler 散度（Kullback-Leibler divergence）或信息散度（information divergence），是两个概率分布（probability distribution）间差异的非对称性度量。在信息理论中，相对熵等价于两个概率分布的信息熵（Shannon entropy）的差值

对于孤立的一个随机变量我们可以用熵来量化，对于两个随机变量之间相差多少则是用相对熵来量化。它给出了两个分布之间的差异程度的量化，也就说相对熵代表的是这个两个分布的“距离”。

两个概率密度函数 $p(x)$ 和 $q(x)$ 之间的相对熵定义为：

$$H(p, q) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} \quad (1.3)$$

相对熵的一个应用场景就是，假设某一个样本服从分布 $q(x)$ ，我们通过样本拟合出来的分布是 $p(x)$ ，那么他们之间的差异程度就是 $H(p, q)$ ，再一步而言，根据分布 $p(x)$ 我们得出表示随机变量的信息量为其熵 $H(p)$ （该表达等价于 $H(X)$ ），而我们估计的分布为 $q(x)$ ，那么他们的关系可以表达为：

$$H(q) = H(p) + H(p, q) \quad (1.4)$$

这样就量化了两个分布之间的“距离”。

二. MRE 方法解线性反问题

2.1 线性反问题:

给出一下形式的线性反问题:

$$\mathbf{G}\mathbf{m} = \mathbf{d} \quad (2.1)$$

其中 \mathbf{G} 是 $N \times M$ 的矩阵, \mathbf{m} 为 M 长包含未知模型参数的向量, \mathbf{d} 是长度为 N 的数据向量。向量 \mathbf{d} 由测量数据组成, 通常包括测量误差。在这里已知 \mathbf{G} 和 \mathbf{d} , 从而求出 \mathbf{m} 的最优解。值得注意的是矩阵 \mathbf{G} 通常条件很差, 而且常欠定 (underdetermined), 使得传统的最小二乘方法不切实际。

2.2 MRE 方法:

2.2.1 概述

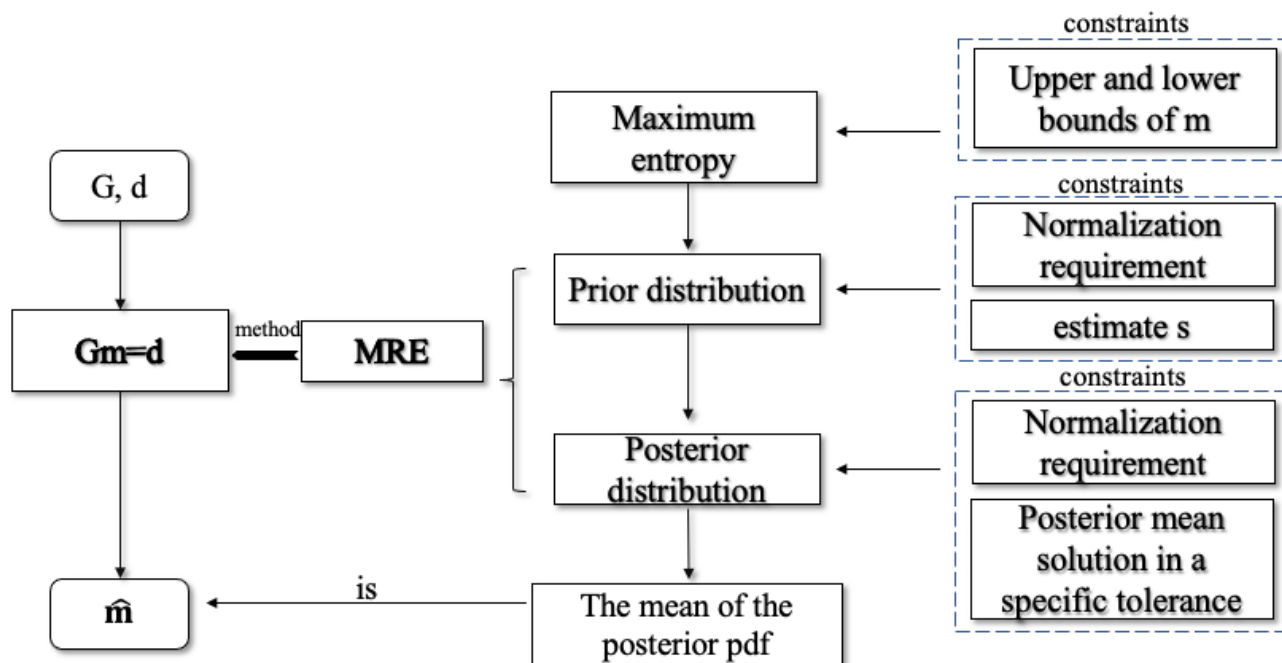
在 MRE 方法中, 将模型未知参数 \mathbf{m} 视为随机变量, 由 \mathbf{m} 的多元概率密度函数(pdf)求出反问题的解。

MRE 主要分为一下 2 个步骤中:

1. 生成先验分布, 使其熵在 \mathbf{m} 的上下界为 U 、 L (最大熵原理); 期望值的估计值为 s 这 2 个条件约束下最大化 (包含更多不确定性, 即更多信息)。这个先验分布保证了反问题的解在 \mathbf{m} 的指定范围内, 但不足以满足公式 $\mathbf{G}\mathbf{m} = \mathbf{d}$
2. 选择 \mathbf{m} 的后验分布, 使其熵在测量数据 \mathbf{d} 限制下最小化 (即去掉部分不确定性)。

最后通过后验 pdf 得到的均值 $\hat{\mathbf{m}}$ 即为这个反问题的解。后验分布的第 5 和第 95 个百分位定义了一个 90% 的“贝叶斯”概率区间, 类似于经典统计方法中的 90% 置信区间。解的这个性质可以通过生成 \mathbf{m} 的多个后验分布来观测。

MRE 方法的具体流程图如下:



2.2.2 先验分布估计

对于许多参数, 可以得到合理的上界 U 和下界 L 。有了上下界, 那么采用最大熵的想法, 设定 \mathbf{m} 满足均值分布:

$$b(\mathbf{m}) = \prod_{i=1}^M \frac{1}{U_i - L_i} \text{ for } L_i \leq m_i \leq U_i \quad (2.2)$$

$$b(\mathbf{m}) = 0 \text{ otherwise}$$

其中 U_i 为参数 m_i 的上界, L_i 为下界, M 是为模型参数总数。

对于非零下界, 问题可以通过公式 $\hat{\mathbf{m}} = \hat{\mathbf{m}}_0 + \mathbf{l}$ 转换为下界为 0 的情况求解, 其中 $\hat{\mathbf{m}}$ 是真实的解, $\hat{\mathbf{m}}_0$ 是 0 下界对应的模型解, \mathbf{l} 是下界的向量。我们可以用 MATLAB 求解 $\hat{\mathbf{m}}_0$, 同时将数据修改为 $\mathbf{d}_L = \mathbf{d} - \mathbf{G}\mathbf{l}$, 其中 \mathbf{d}_L 是 MRE 程序中使用的数据向量, \mathbf{d} 是真实的数据向量, \mathbf{G} 是核值矩阵。上界和期望值必须分别替换为 $U_i - L_i$ 和 $s_i - L_i$, 其中 L_i 是模型参数 m_i 的下界。用 MRE 方法计算 $\hat{\mathbf{m}}_0$ 后, 由 $\hat{\mathbf{m}} = \hat{\mathbf{m}}_0 + \mathbf{l}$ 得到真解。因此在这里, 我们假设下界为 0, 从而使简化计算过程。下述步骤均基于下界为 0 的假设。

然后我们利用相对熵的思路得到先验分布 $p(\mathbf{m})$ 关于 $b(\mathbf{m})$ 的熵

$$H(p, b) = \int_{\mathbf{m}} p(\mathbf{m}) \ln \left[\frac{p(\mathbf{m})}{b(\mathbf{m})} \right] d\mathbf{m} \quad (2.3)$$

此相对熵受归一化条件 (normalization requirement) ($\int_{\mathbf{m}} p(\mathbf{m}) d\mathbf{m} = 1$) 和期待值 ($\int_{\mathbf{m}} m_i p(\mathbf{m}) d\mathbf{m} = s_i \quad i = 1, 2, \dots, M$) 两个约束最小化。在这两个约束下, 要最小化的目标函数为:

$$\phi = H(p, b) + \mu \left[\int_{\mathbf{m}} p(\mathbf{m}) d\mathbf{m} - 1 \right] + \sum_{i=1}^M \beta_i \left[\int_{\mathbf{m}} m_i p(\mathbf{m}) d\mathbf{m} - s_i \right] \quad (2.4)$$

其中 μ 和 β_i 为拉格朗日乘子。

当下列等式成立时, 目标函数对 $p(\mathbf{m})$ 最小化 (利用变分法推出欧拉公式):

$$0 = \ln \left[\frac{p(\mathbf{m})}{b(\mathbf{m})} \right] + b(\mathbf{m}) + \mu + \sum_{i=1}^M \beta_i m_i \quad (2.5)$$

解此方程从而得到:

$$p(\mathbf{m}) = b(\mathbf{m}) \exp \left[-b(\mathbf{m}) - \mu - \sum_{i=1}^M \beta_i m_i \right] \quad (2.6)$$

为了解拉格朗日乘子 μ , 我们采用归一化条件, 即 $\int_{\mathbf{m}} p(\mathbf{m}) d\mathbf{m} = 1$ 。设 $c = \exp(-b(\mathbf{m}) - \mu) \prod_{i=1}^M (U_i - L_i)^{-1}$, 带入 Eq.(2.6) 得到:

$$p(\mathbf{m}) = c \prod_{i=1}^M \exp(-\beta_i m_i) \quad (2.7)$$

将这个表达式与所有 \mathbf{m} 进行积分得到:

$$c \int_{\mathbf{m}} \prod_{i=1}^M \exp(-\beta_i m_i) d\mathbf{m} = 1 \quad (2.8)$$

积分后为:

$$c \prod_{i=1}^M \left[-\frac{1}{\beta_i} \exp(-\beta_i U_i) + \frac{1}{\beta_i} \exp(-\beta_i L_i) \right] = 1$$

因为假设了下界 L 为 0，因此上式改写为：

$$c \prod_{i=1}^M \left[-\frac{1}{\beta_i} \exp(-\beta_i U_i) + 1 \right] = 1 \quad (2.9)$$

解出 c 后带入 Eq.(2.7) 解出 $p(\mathbf{m})$ 的表达式

$$p(\mathbf{m}) = \prod_{i=1}^M \frac{\beta_i \exp(-\beta_i m_i)}{1 - \exp(-\beta_i U_i)} \quad (2.10)$$

进一步得到：

$$p(m_i) = \frac{\beta_i \exp(-\beta_i m_i)}{1 - \exp(-\beta_i U_i)} \quad (2.11)$$

取这个表达式的极限 $\beta_i \rightarrow 0$ 就得到：

$$p(m_i) = \frac{1}{U_i} \quad (2.12)$$

因此依据拉格朗日乘数 β_i 的先验分布为

$$\begin{aligned} p(m_i) &= \frac{\beta_i \exp(-\beta_i m_i)}{1 - \exp(-\beta_i U_i)} \text{ for } \beta_i \neq 0 \\ p(m_i) &= \frac{1}{U_i} \text{ for } \beta_i = 0 \\ p(\mathbf{m}) &= \prod_{i=1}^M p(m_i) \end{aligned} \quad (2.13)$$

对于先验分布中存在的未知拉格朗日乘子 β_i ，则是通过对 $p(m_i) = \frac{\beta_i \exp(-\beta_i m_i)}{1 - \exp(-\beta_i U_i)}$ 积分得到期望值 s_i 来计算得到，即

$$\int_{\mathbf{m}} m_k p(\mathbf{m}) d(\mathbf{m}) = s_k \quad k = 1, 2, \dots, M \quad (2.14)$$

其中 s_k 为模型参数 m_k 的期望值。根据归一化条件的要求， $i \neq k$ 时在 m_i 上的积分等于 1 (unity)。因此，期望值约束简化为：

$$\int_0^{U_i} m_i \frac{\beta_i \exp(-\beta_i m_i)}{1 - \exp(-\beta_i U_i)} dm_i = s_i \quad i = 1, 2, \dots, M; \beta_i \neq 0 \quad (2.15)$$

最后得到表达式 Eq.2.16，从而求出拉格朗日乘数 β_i ，将此代入 Eq.2.13 求出先验分布 $p(\mathbf{m})$ 的概率密度函数。

$$\frac{-(\beta_i U_i + 1) \exp(-\beta_i U_i) + 1}{\beta_i [1 - \exp(-\beta_i U_i)]} = s_i \quad (2.16)$$

2.2.3 后验分布估计：

为了得到后验分布 $q(\mathbf{m})$ ，我们最小化其关于先验分布 $p(\mathbf{m})$ 的相对熵。 $q(\mathbf{m})$ 关于 $p(\mathbf{m})$ 的相对熵为：

$$H(q, p) = \int_{\mathbf{m}} q(\mathbf{m}) \ln \left[\frac{q(\mathbf{m})}{p(\mathbf{m})} \right] d\mathbf{m} \quad (2.17)$$

熵的最小化受到以下两个约束限制：

- 归一化条件 (normalization requirement) $\int_{\mathbf{m}} q(\mathbf{m}) d\mathbf{m} = 1$;
- 后验分布的均值解在规定的公差 $\|\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}\|^2 \leq \xi^2 \varepsilon^2$ (L2-norm) 内拟合数据的要求。其中 $\hat{\mathbf{m}}$ 是后验分布的均值, ε 是测量误差, ξ 是一个依赖于假设误差模型的参数。(Johnson and Shore, Woodbury and Ulrych)

因此, 该优化问题采用拉格朗日乘子最小化法求解,

$$\phi = H(q, p) + v \left[\int_{\mathbf{m}} q(\mathbf{m}) d\mathbf{m} - 1 \right] + \gamma \left[\sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^M g_{ji} \hat{m}_i - d_j \right)^2 - \xi^2 \varepsilon^2 \right] \quad (2.18)$$

其中 v 和 γ 为拉格朗日乘子。

这里, 用 $\|\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}\|^2 = \xi^2 \varepsilon^2$ 代替 $\|\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}\|^2 \leq \xi^2 \varepsilon^2$ 。如果解决方案的初始猜测不满足数据约束, 估计将被修改, 直到满足数据约束。

当下面等式成立时, 目标函数 ϕ 相对 $q(\mathbf{m})$ 被最小化。

$$0 = \ln \left[\frac{q(\mathbf{m})}{p(\mathbf{m})} \right] + p(\mathbf{m}) + v + \sum_{j=1}^N \lambda_j \left(\sum_{i=1}^M g_{ji} m_i - d_j \right) \quad (2.19)$$

其中 $\lambda_j = 2\gamma \left(\sum_{i=1}^M g_{ji} m_i - d_j \right)$ 是单个测量数据点上的拉格朗日乘数。

在这里需要注意的是利用拉格朗日乘子 λ_j , 将 $\|\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}\|^2 \leq \xi^2 \varepsilon^2$ 的数据约束改写为 $\|\boldsymbol{\lambda}\|^2 = 4\gamma^2 \xi^2 \varepsilon^2$, 表明 $\gamma = \|\boldsymbol{\lambda}\| / (2\xi\varepsilon)$ 。根据上述 γ 的定义和 λ_j 的定义, 当 $\boldsymbol{\lambda}$ 满足非线性方程组时, 以下数据约束成立

$$\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}(\boldsymbol{\lambda}) + \frac{\xi\varepsilon}{\|\boldsymbol{\lambda}\|} \boldsymbol{\lambda} = 0 \quad (2.20)$$

这些拉格朗日乘数约束模型解向量的单个元素, 使被测数据和预测数据之间的残差范数满足(等式)数据约束。

接下来继续解方程 Eq.2.19, 得到 $q(\mathbf{m})$ 表达式:

$$q(\mathbf{m}) = cp(\mathbf{m}) \exp \left[- \sum_{j=1}^N \left(\lambda_j \sum_{i=1}^M g_{ji} m_i \right) \right] \quad (2.21)$$

其中 $c = \exp(-p(\mathbf{m}) - v)$, N 为数据点个数, M 为模型参数个数, m_i 为模型参数, g_{ji} 为核函数值, $p(\mathbf{m})$ 为先验分布。

这里将 Eq.2.13 ($p(\mathbf{m})$ 的公式 假设 $\beta_i \neq 0$) 带入 Eq.2.20 并设 $a_i = \beta_i + \sum_{j=1}^N g_{ji} \lambda_j$, 得到:

$$q(\mathbf{m}) = c \prod_{i=1}^M \frac{\beta_i \exp(-m_i a_i)}{1 - \exp(-\beta_i U_i)} \quad (2.22)$$

由概率密度的归一化要求, Eq.2.21 积分后的值应该等于 1, 即

$$c \int_{\mathbf{m}} \prod_{i=1}^M \frac{\beta_i \exp(-m_i a_i)}{1 - \exp(-\beta_i U_i)} d\mathbf{m} = 1 \quad (2.23)$$

积分后得到:

$$c \prod_{i=1}^M \frac{\beta_i [1 - \exp(-a_i U_i)]}{a_i [1 - \exp(-\beta_i U_i)]} = 1 \quad (2.24)$$

解出 c , 并将 c 的值带入 Eq.2.22, 得到后验分布函数 $q(\mathbf{m})$:

$$q(m_i) = \frac{a_i \exp(-a_i m_i)}{1 - \exp(-a_i U_i)} \text{ for } a_i \neq 0,$$

$$q(m_i) = \frac{1}{U_i} \text{ for } a_i = 0$$

$$q(\mathbf{m}) = \prod_{i=1}^M q(m_i) \quad (2.25)$$

最后该反问题的解 $\hat{\mathbf{m}}$ 通过计算后验分布的均值得出，结果为：

$$\hat{m}_i = \frac{1 - (a_i U_i + 1) \exp(-a_i U_i)}{a_i [1 - \exp(-a_i U_i)]} \text{ for } a_i \neq 0,$$

$$\hat{m}_i = \frac{U_i}{2} \text{ for } a_i = 0 \quad (2.26)$$

MRE 解的不确定性可表示为 $q(\mathbf{m})$ 的概率水平。例如，90%概率区间的边界是第 5 和第 95 个百分位概率水平，即边界值是由分别满足 $\int_0^{m_i'} q(m_i') dm_i' = 0.05$ 和 $\int_0^{m_i'} q(m_i') dm_i' = 0.95$ 的 m_i 值给出的。

三. 实现 MRE 的数值问题

3.1 误差模型

数据约束 $\|\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}\|^2 \leq \xi^2 \varepsilon^2$ 和用于获得拉格朗日乘子 λ_i (Eq.19) 值的方程组包含一个依赖于误差模型的参数 ξ 。这里我们考虑两种可能的误差模型——一个加法误差模型 $d_j = d_j^0 + \varepsilon_a \delta_j$ 和乘法误差模型 $d_j = d_j^0 + d_j^0 \varepsilon_m \delta_j$ ，其中 ε_a 和 ε_m 加法和乘法误差的标准差， δ_j 为标准正态随机数， d_j^0 为数据的真值， d_j 为实测值。

若采用加法误差模型，则 $\xi^2 = N$ ；对于乘法误差模型，我们使用 $\xi^2 = \|\mathbf{d}\|^2$ 。MRE 实现允许误差模型中同时存在加法和乘法误差，方法是将 Eq.2.20 替换为

$$\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}(\lambda) + \frac{\lambda}{\|\lambda\|} (\sqrt{N} \varepsilon_a + \|\mathbf{d}\| \varepsilon_m) = 0 \quad (3.1)$$

3.2 先验分布

先验分布是由 Eq. 2.13 计算出来的，它是用拉格朗日乘子 β_i 表示的。每个 β_i 的值由 Eq. 2.16 中使用二分法分别确定。值得注意的是：当 $\beta_i = 0$ ，Eq.2.16 是不定的 (indeterminate)。在取极限的情况下满足 $s_i \rightarrow U_i/2$, $\beta_i \rightarrow 0$ 。

因此有以下几种情况：

- 若 $s_i = U_i/2$ ，在 MRE 中认为 $\beta_i = 0$ 。
- 若 $s_i \approx U_i/2$ ，而 β_i 很小但不为 0 时，Eq.2.16 易受误差影响。为了避免这个误差，我们求解 β_i 时使用 asymptotic approximation (Taylor 展开式) 来解 Eq.2.16 (设定 $|\beta_i| < 10^{-4}$)

$$s_i \approx \frac{12U_i - 8\beta_i U_i^2 + 3\beta_i^2 U_i^3}{24 - 12\beta_i U_i + 4\beta_i^2 U_i^2 - \beta_i^3 U_i^3} \quad (3.2)$$

- 若 $s_i \approx U_i$ ，则 $\beta_i \rightarrow -\infty$ ，且 Eq.2.16 易受误差影响，为了避免误差，在 MRE 算法中，我们用 $\beta_i = -1/(U_i - s_i)$ 对 $s_i \approx U_i$ 的渐近逼近 (asymptotic approximation)
- 若 $s_i \approx 0$ ，则 $\beta_i \rightarrow \infty$ 。这种情况下，MRE 算法中将 β_i 设置为二分法起始区间的上限，无需进一步逼近

先验分布 $p(\mathbf{m})$ 用拉格朗日乘子 β_i 表示在 Eq.2.13 中。如果 $\beta_i \ll -1$ (MRE 中 $\beta_i < -10^2$)，则无法对 Eq.2.13 中的表达式进行数值计算，先验分布近似为：

$$p(m_i) = \begin{cases} -2\beta_i[1 + \beta_i(U_i - m_i)] & U_i + 1/\beta_i \leq m_i \leq U_i \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (3.3)$$

3.3 后验分布

3.3.1 拉格朗日乘子

后验分布由 Eq. 2. 25 计算得出，其中 $a_i = \beta_i + \sum_{j=1}^N g_{ji} \lambda_j$ ， λ_j 为拉格朗日乘子。拉格朗日乘子 $\boldsymbol{\lambda}$ ($\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N]^T$ ， T 代表转置) 通过 Newton-Raphson 的方法进行线性搜索求解 Eq.19 得到，设 $\mathbf{F}(\boldsymbol{\lambda})_j = 0$ ，其中：

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\lambda})_j = d_j - \sum_{i=1}^M g_{ji} \hat{m}_i(\boldsymbol{\lambda}) + \xi \varepsilon \frac{\lambda_j}{\|\boldsymbol{\lambda}\|} \quad (3.4)$$

其中 d_j 为第 j 个测量数据点， \hat{m}_i 为 m_i 的期望值，并且有 $\xi \varepsilon = \sqrt{N} \varepsilon_a + \|\mathbf{d}\| \varepsilon_m$ 。我们从 $\lambda_j = 1$ 开始。当满足 $\|\mathbf{d} - \mathbf{G}\hat{\mathbf{m}}\|^2 \leq \xi^2 \varepsilon^2$ 的数据约束时，利用 Eq. 2.17 中的 $\lambda_j = 1$ 求逆问题的解。然后我们通过牛顿法迭代公式

$$\boldsymbol{\lambda}^k = \boldsymbol{\lambda}^{k-1} - \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \bigg|_{\boldsymbol{\lambda}^{k-1}} \right) \mathbf{F}^{k-1} \quad (3.5)$$

其中上标表示迭代次数。其中雅可比矩阵 (Jacobian matrix) $\partial \mathbf{F} / \partial \boldsymbol{\lambda}$ ，为：

$$\frac{\partial F_j}{\partial \lambda_l} = - \sum_{i=1}^M g_{ji} \left[\frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i} g_{li} \right] + \frac{\xi \varepsilon}{\|\boldsymbol{\lambda}\|} \left[\delta_{jl} - \frac{\lambda_j \lambda_l}{\|\boldsymbol{\lambda}\|^2} \right] \quad (3.6)$$

其中 $l = 1, 2, \dots, N$ ， δ_{jl} 为 克罗内克函数 (Kronecker delta)，其自变量 (输入值) 一般是两个整数，如果两者相等，则其输出值为 1，否则为 0。雅可比矩阵中：

$$\frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i} = \frac{a_i^2 U_i^2 \exp(-a_i U_i) - [1 - \exp(-a_i U_i)]^2}{a_i^2 \{1 - \exp(-a_i U_i)\}^2} \quad (3.7)$$

值得注意的是 $\mathbf{F}(\boldsymbol{\lambda})_j = d_j - \sum_{i=1}^M g_{ji} \hat{m}_i(\boldsymbol{\lambda}) + \xi \varepsilon \frac{\lambda_j}{\|\boldsymbol{\lambda}\|}$ 是充分非线性的，因此 $\boldsymbol{\lambda}^k = \boldsymbol{\lambda}^{k-1} - \left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \bigg|_{\boldsymbol{\lambda}^{k-1}} \right) \mathbf{F}^{k-1}$ 中计算的步长不一定是最优的。因此，我们使用 Newton-Raphson 方法来计算最优搜索方向；然后，我们在那个方向上使用单变量黄金分割搜索(Gill 等人, 1981)来计算最佳步长。T 重复此过程，直到 $\|\mathbf{F}\|/(1 + \|\mathbf{d}\|)$ 小于用户指定的误差。

此外，我们发现当 $\varepsilon = 0$ 时，雅可比矩阵的条件数可以很大。为了减少条件数，我们对雅可比矩阵 $\partial \mathbf{F} / \partial \boldsymbol{\lambda}$ 进行行伸缩。通过在与真实数据值相比可以忽略的水平上包含少量的噪声，还可以大大减少条件数。

3.3.2 渐进逼近

Eq.2.25 后验概率密度函数 $q(\mathbf{m})$ ，以及求 $\frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i}$ 和 Eq.2.26 中求 \hat{m}_i 的公式都用 $a_i = \beta_i + \sum_{j=1}^N g_{ji} \lambda_j$ 表示。在 β_i 和 a_i 的值一定的情况下，这些表达式存在数值误差。这里采用渐进逼近的方法。

针对 $\beta_i \ll -1$ (MRE 中 $\beta_i < -10^2$)的情况，无法对 Eq.2.25 中的表达式进行数值计算，后验分布近似为：

$$q(m_i) = \begin{cases} \frac{6\beta_i^2}{(b_i - 3\beta_i)} [1 + \beta_i(U_i - m_i)] e^{b_i(U_i - m_i)} & U_i + 1/\beta_i \leq m_i \leq U_i \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (3.8)$$

其中 $b_i = \sum_{j=1}^N \lambda_j g_{ji}$

同时，当 $\beta_i \ll -1$ 和 $|a_i|$ 非常小或者非常大时，使用 $\hat{m}_i = \frac{1 - (a_i U_i + 1) \exp(-a_i U_i)}{a_i [1 - \exp(-a_i U_i)]}$ 求 \hat{m}_i 存在数值误差。因此使用渐近近似是很有必要的，求 \hat{m}_i 的一般表达式为：

$$\begin{cases} \hat{m}_i \approx U_i - 1/a_i, & a_i \ll -1 (a_i < -10^2) \\ \hat{m}_i \approx 1/a_i, & a_i \gg 1 (a_i > 10^2) \\ \hat{m}_i \approx \frac{12U_i - 8a_i U_i^2 + 3a_i^2 U_i^3}{24 - 12a_i U_i + 4a_i^2 U_i^2 - a_i^3 U_i^3}, & |a_i| \ll 1 (a_i < 10^{-4}) \\ \hat{m}_i \approx U_i + (b_i - \beta_i)/[\beta_i(b_i - 3\beta_i)], & \beta_i \ll -1 \\ \hat{m}_i = U_i/2, & a_i = 0 \\ \hat{m}_i = \frac{1 - (a_i U_i + 1) \exp(-a_i U_i)}{a_i [1 - \exp(-a_i U_i)]} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.9)$$

此外，当 $\beta_i \ll -1$ 以及 $|a_i|$ 非常小或者非常大时，使用 $\frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i} = \frac{a_i^2 U_i^2 \exp(-a_i U_i) - [1 - \exp(-a_i U_i)]^2}{a_i^2 [1 - \exp(-a_i U_i)]^2}$ 求 $\frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i}$ 也存在数值误差。因此，当 $\beta_i \ll -1$ 时，用偏导 $\partial \hat{m}_i / \partial b_i$ 代替偏导 $\partial \hat{m}_i / \partial a_i$ 。 $\partial \hat{m}_i / \partial a_i$ 的一般表达式为：

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i} \approx -U_i^2 \frac{15 - 15a_i U_i + 8a_i^2 U_i^2}{180 - 180a_i U_i + 105a_i^2 U_i^2}, & |a_i| \ll -1 \\ \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i} \approx -1/a_i^2, & |a_i| \gg 1 \\ \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial b_i} \approx -2/(b_i - 3\beta_i)^2, & \beta_i \ll -1 \\ \frac{\partial \hat{m}_i}{\partial a_i} = \frac{a_i^2 U_i^2 \exp(-a_i U_i) - [1 - \exp(-a_i U_i)]^2}{a_i^2 [1 - \exp(-a_i U_i)]^2} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.10)$$

四. 例子

我们采用 MRE 的方法解决源头回溯问题 (the source history reconstruction problem)，即

$$C(x, T) = \int_0^T C_{in}(t) f(x, T - t) dt \quad (4.1)$$

其中 C 是 concentration 浓度， C 满足地下水中污染物运移的控制方程为平流扩散方程，即：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4.2)$$

其中 $C = C(x, t)$ 为在时间 t 、位置 x 处的浓度， D 为土壤弥散系数（在这里取 $D = 1m^2/d$ ）， v 是地下水速度（在这里取 $v = 1m/d$ ）。方程的初始条件和边界条件为： $C(0, t) = C_{in}(t)$ 、 $C(x, t) \rightarrow 0$ 当 $x \rightarrow \infty$ 、 $C(x, 0) = 0$ 。Eq.4.1 剩下的变量 x 是空间位置， T 是样本时间， $C_{in}(t)$ 是在源处 ($x = 0$) 输入的浓度， t 是源释放时间， $f(x, T - t)$ 为平流扩散方程在 $x = 0, t = 0$ 时的解。其中 $f(x, T - t)$ 的解出来的表达式如下：

$$f(x_j, T - t_i) = \frac{x_j}{2\sqrt{\pi D(T - t_i)^3}} \exp\left(-\frac{[x_j - v(T - t_i)]^2}{4D(T - t_i)}\right) \quad (4.3)$$

在这里将积分 Eq.4.1 方程离散为

$$\mathbf{G}\mathbf{m} = \mathbf{d} \quad (4.4)$$

其中 \mathbf{d} 对应表示 N 长度向量的样本浓度 ($d_j = C(x_j, T), j = 1, 2, \dots, N$)， \mathbf{m} 为 M 长度的模型参数向量 ($m_i = C_{in}(t), i = 1, 2, \dots, M$)， \mathbf{G} 为 $N \times M$ 矩阵 ($g_{ji} = \Delta t f(x_j, T - t_i)$ ，此例子中 $\Delta t = 3$)， x_j 为样本位置， t_i 为输入时间，且 $\Delta t = t_{k+1} - t_k$ 。

在本文的例子中，真实的源函数为：

$$C_{in}(t) = \exp\left[-\frac{(t - 130)^2}{2(5)^2}\right] + 0.3 \exp\left[-\frac{(t - 150)^2}{2(10)^2}\right] + 0.5 \exp\left[-\frac{(t - 190)^2}{2(7)^2}\right] \quad (4.5)$$

用 Eq.4.1 和 Eq.4.5 计算出 $T = 300$ 天的情况，并做出图：

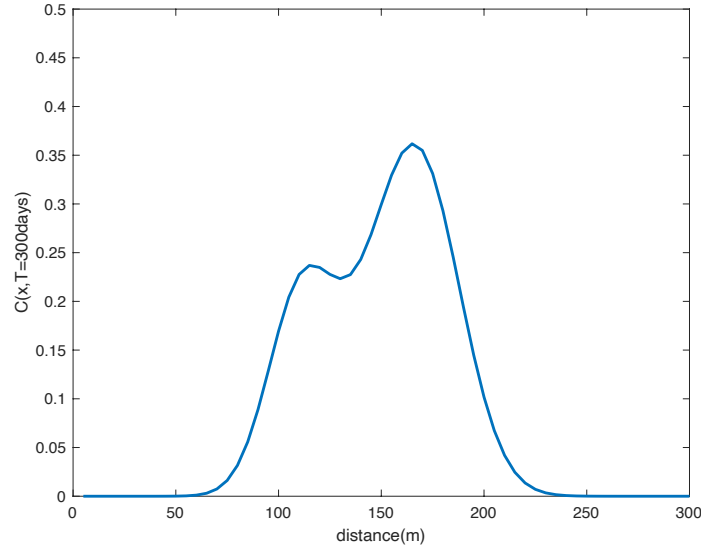


Fig. 1. 在 300days 的真实污染浓度

合成观测

我们从距离源头的5~300米每间隔5米，共计在60个点上采样；并假设每个采样点加入一个加法误差项 $\varepsilon_\alpha = 0.005$ ，样本数据结果显示在 Fig.2 中，这些数据组成了向量 \mathbf{d} 。

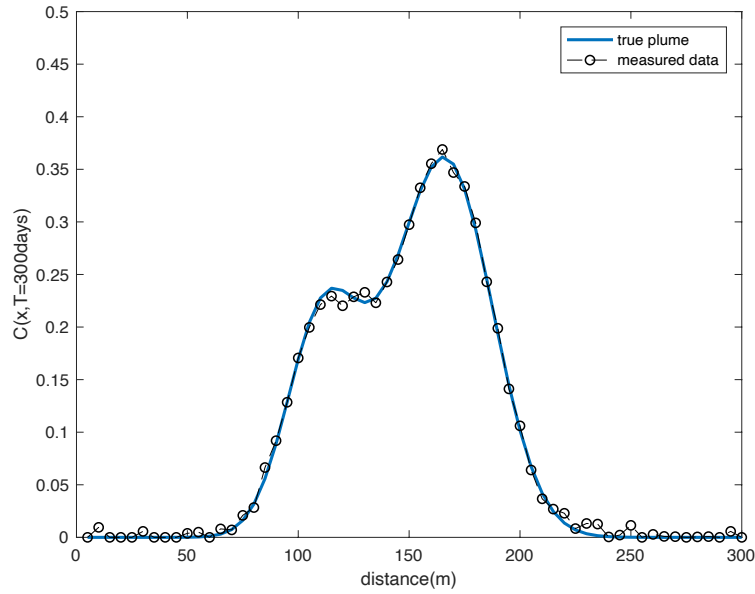


Fig.2 T=300 天时浓度随距离的变换（实线）和采样点的数据（圆圈）

然后我们在假设上界为 $U_i = 1.1$, 先验的期待值为 $s_i = \exp\{-(t_i - 150)^2/800\}$ 。最终，我们通过 MRE 算法得到解，并显示在 Fig.3 中：

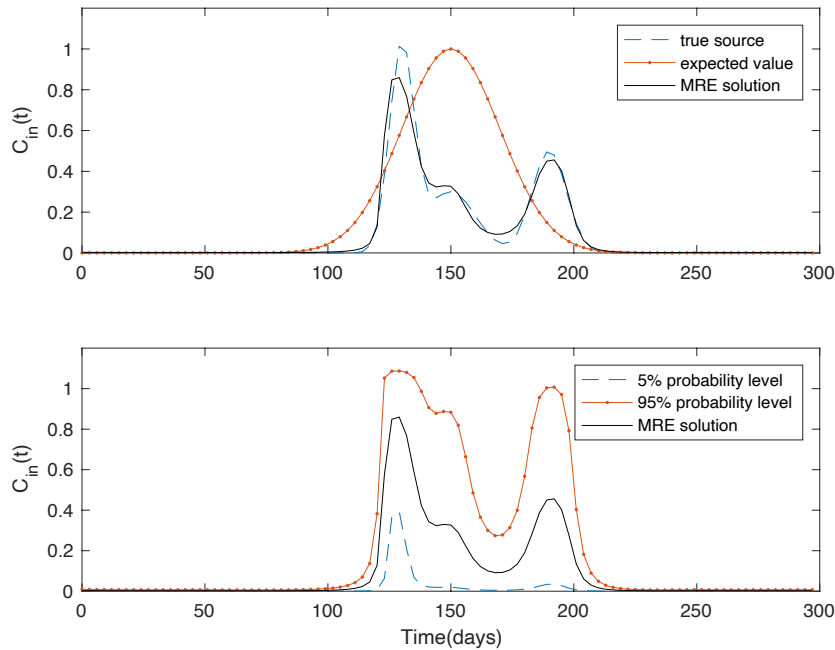


Fig.3 反问题解结果 (A) MRE 解(实线), 源函数(虚线), 先验期望值函数(点虚线)。

(B) MRE 解(实线)5%概率水平(虚线), 95%概率水平(点虚线)。

从 Fig.3 中能看出，假设源函数呈现正态分布，并结合上下界和误差设定，在经过 MRE 方法计算后，真实值和最终得到的期待值较吻合。并且使用 MRE 的方法得到的结果在 90% 的概率区间内。

4.2 对比基于 Tikhonov 正则化的奇异值分解方法的结果

4.2.1 Tikhonov 正则化

吉洪诺夫正则化以安德烈·尼古拉耶维奇·吉洪诺夫命名，为非适定性问题的正则化中最常见的方法。在统计学中，本方法被称为脊回归或岭回归（ridge regression）；在机器学习领域则称为权重衰减或权值衰减（weight decay）。因为有不同的数学家独立发现此方法，此方法又称做吉洪诺夫—米勒法（Tikhonov–Miller method）、菲利浦斯—图米法（Phillips–Twomey method）、受限线性反演（constrained linear inversion method），或线性正规化（linear regularization）。此方法亦和用在非线性最小二乘法的莱文贝格—马夸特方法相关。

考虑超定线性方程 $Ax = b$ ，其中 $b \in \mathcal{R}^m$ ， $a \in \mathcal{R}^n$ ， $m > n$ 。我们通过最小化二次目标函数（quadratic objective function）来求解 x ：

$$J(x) = \|Ax - b\|_P^2 + \beta \|x - \bar{x}\|_Q^2 \quad (4.6)$$

二次向量范数（quadratic vector norm）定义为 $\|x\|_P^2 = x^T P x$ 。其中权矩阵 P 是正定的，Tikhonov 正则化因子 β 是非负的。如果向量 b 是通过不精确测量得到的， b_i 的每个元素的测量值在统计上是独立的，那么 P 通常是一个对角矩阵，其中每个对角元素 P_{ii} 是 b_i 测量误差方差的倒数， $P_{ii} = 1/\sigma_{b_i}^2$ 。如果 b_i 中的误差不是统计上独立的，那么 P 应该是向量 b 的协方差矩阵 V_b 的逆， $P = V_b^{-1}$ 。正定矩阵 Q 和参考参数向量 \bar{x} 反映了我们想要约束参数的方式。例如，我们可能只希望解 x 接近某个参考点， \bar{x} ，在这种情况下 $Q = I_n$ 。或者，我们可能希望最小化参数 $L_Q a$ 的某个线性函数，在这种情况下， $A = L_Q^T L_Q$ 和 $\bar{x} = 0$ 。展开二次目标函数：

$$J(x) = x^T A^T P A x - 2x^T A^T P b + b^T P b + \beta x^T Q x - 2\beta x^T Q \bar{x} + \beta \bar{x}^T Q \bar{x} \quad (4.7)$$

使 $J(x)$ 对 x 的一阶偏导为 0，从而最小化目标函数：

$$\frac{\partial J(x)^T}{\partial x} = 2A^T P A x - 2A^T P b + 2\beta A x - 2\beta Q \bar{x} = 0_{n \times 1} \quad (4.8)$$

然后求解参数估计 \hat{x} ：

$$\hat{x}_{(\beta)} = [A^T P A + \beta Q]^{-1} (A^T P b + \beta Q \bar{x}) \quad (4.9)$$

$\hat{x}_{(\beta)}$ 表示解 x 取决于正则化因子 β 的值。对于 A 或 $A^T P A$ 病态的问题，较小的值（即小于 $A^T P A$ 对角元素的平均值）可以显著改善问题的条件。

如果 b_i 的测量误差不是单独已知的，则通常设 $P = I_n$ 。同样，如果 n 个参数差异 $x - \bar{x}$ 都同样重要，则习惯设置 $Q = I_n$ 。最后，如果我们没有一组引用参数 \bar{x} ，那么可以设置 $\bar{x} = 0$ 。简化后的解为 $\hat{x}_{(\beta)} = [A^T A + \beta I_n]^{-1} A^T b$ ，也可写成 $\hat{x}_{(\beta)} = A_{(\beta)}^\dagger b$ ，其中 $A_{(\beta)}^\dagger$ 称为正则伪逆（regularized pseudo-inverse）。在更一般的情况下，其中 $P \neq I_n$ 和 $Q \neq I_n$ ，但 $\bar{x} = 0_{n \times 1}$ ，

$$A_{(\beta)}^\dagger = [A^T P A + \beta Q]^{-1} A^T P \quad (4.10)$$

4.3.2 Tikhonov 正则化的 SVD

为了消除一个或多个最小的奇异值，可以简单地在所有的奇异值上加一个小常数。这可以在不消除完全奇异值分解中包含的任何信息的情况下，大大提高系统的条件数。这种方法相当于吉洪诺夫正则化。

为了将 Tikhonov 正则化的公式与奇异值分解联系起来，Tikhonov 目标函数 Eq.4.6 可以通过简单地缩放和移动 (scaling and shifting) A , x 和 b 写作：

$$J(\tilde{x}) = \|\tilde{A}\tilde{x} - \tilde{b}\|_I^2 + \beta \|\tilde{x}\|_I^2 + C \quad (4.11)$$

在上述表达式中， C 独立于 x ，且不影响参数估计。定义 L_P 和 L_Q 为 P, Q 的 Cholesky 因子，然后定义 $\hat{A} = L_P A L_Q^{-1}$ ， $\hat{b} = L_P (b - A\bar{a})$ 和 $\hat{x} = L_Q (x - \bar{x})$ ，则 Eq.4.6 和 Eq.4.11 等价，其中：

$$C = \bar{x}^T A^T L_P^T L_P A \bar{x} - 2\bar{x}^T A^T L_P^T L_P b \quad (4.12)$$

将 $[\partial J(\tilde{x}) / \partial \tilde{x}]^T$ 设置为 0 会得到最小二乘参数估计：

$$\hat{\tilde{x}} = [\tilde{A}^T \tilde{A} + \beta I]^{-1} \tilde{A}^T \tilde{b} \quad (4.13)$$

请注意 $\hat{x}_{(\beta)}$ 和 $\hat{\tilde{x}}_{(\beta)}$ 的解是通过缩放(scaling)相关的,

$$\hat{x}_{(\beta)} = L_Q^{-1} \hat{\tilde{x}}_{(\beta)} + \bar{x} \quad (4.14)$$

\tilde{A} 的奇异值分解可以代入 $\hat{\tilde{x}}_{(\beta)}$ 的最小二乘解:

$$\begin{aligned} \hat{\tilde{x}}_{(\beta)} &= \left[\tilde{V} \tilde{\Sigma}^T \tilde{U}^T \tilde{U} \tilde{\Sigma} \tilde{V}^T + \beta I \right]^{-1} \tilde{V} \tilde{\Sigma} \tilde{U}^T \tilde{b} \\ &= \left[\tilde{V} \tilde{\Sigma}^2 \tilde{V}^T + \beta \tilde{V} I \tilde{V}^T \right]^{-1} \tilde{V} \tilde{\Sigma} \tilde{U}^T \tilde{b} \\ &= \left[\tilde{V} \left(\tilde{\Sigma}^2 + \beta I \right) \tilde{V}^T \right]^{-1} \tilde{V} \tilde{\Sigma} \tilde{U}^T \tilde{b} \\ &= \tilde{V} \left(\tilde{\Sigma}^2 + \beta I \right)^{-1} \tilde{V}^T \tilde{V} \tilde{\Sigma} \tilde{U}^T \tilde{b} \\ &= \tilde{V} \left(\tilde{\Sigma}^2 + \beta I \right)^{-1} \tilde{\Sigma} \tilde{U}^T \tilde{b} \end{aligned} \quad (4.14)$$

参数误差的协方差在 $\tilde{\sigma}_i/(\tilde{\sigma}_i^2 + \beta)$ 的最大值对应的方向上最大。如果 \tilde{A} 是奇异的, 则当 β 接近于零时, 随机错误沿近似于 \tilde{A} 的零空间的方向传播。值得注意的是 $\tilde{b} = \tilde{A}\tilde{x}$ 的奇异值分解解是 $\tilde{x} = \tilde{V} \tilde{\Sigma}^{-1} \tilde{U}^T \tilde{b}$ 。因此, 吉洪诺夫正则化等价于一个奇异值分解解, 其中每个奇异值的倒数 $1/\tilde{\sigma}_i$ 被替换为 $\tilde{\sigma}_i/(\tilde{\sigma}_i^2 + \beta)$, 或者每个奇异值 $\tilde{\sigma}_i$ 被替换为 $\tilde{\sigma}_i + \beta/\tilde{\sigma}_i$ 。

4.3.3 Tikhonov 正则化后使用奇异值分解的结果及和 MRE 方法结果的对比

在这里我们使用 MATLAB 的 regu 工具包中的 Tikhonov 函数来算反问题的解。首先寻找正则化项, 这里我们利用 L-curve 曲线确定正则化参数的选取, 从而保证不会发生过拟合和欠拟合的情况。它是正则化解的范数的所有有效正则化参数与相应的残差范数的曲线。通过这种方式, L 曲线清楚地显示了最小化这两个量之间的折中, 这是任何正则化方法的核心。

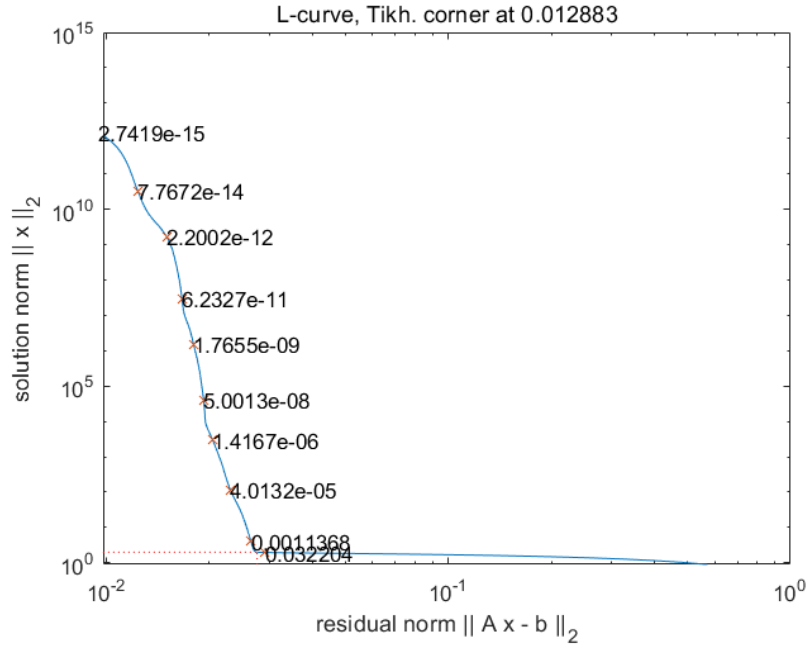


Fig.4 L-curve

我们选择 Fig.4 中拐角的值作为正则化参数, 这样既满足了解的范数小, 同时该解与真实解的误差小。然后我们通过 Tikhonov 函数进一步得到最终的解, 并做出该方法得到的结果与真实值对比的图片。

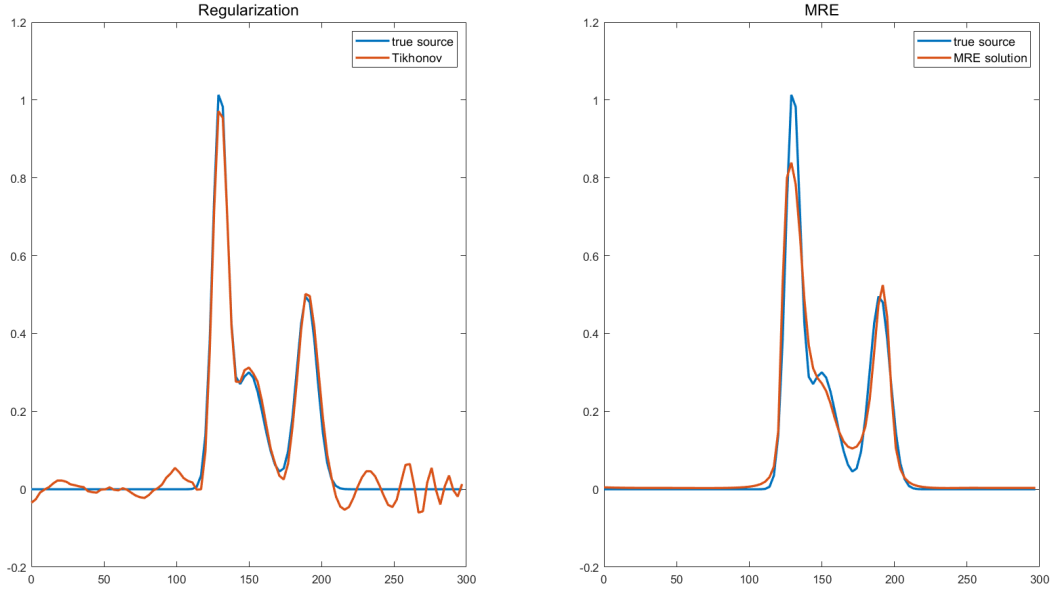


Fig.5

从 Fig.5 中，我们能看出在浓度趋于 0 时，MRE 的结果优于 Tikhonov 正则化的奇异值分解求解的结果。此外，我们计算得出 MRE 方法最大误差 0.199376787546211，Tikhonov 正则化后奇异值分解方法的最大误差为 0.064605217142539。因此，我们认为 MRE 方法更好。

附录：

附录 A：对流弥散方程（advection-dispersion）原函数离散化解的导出

考虑如下一维平流扩散方程：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (A.1)$$

首先对方程进行转换，消去对流项 C_x 。

假设存在坐标平面变换

$$\begin{cases} x = x(s, \tau) \\ t = t(s, \tau) \end{cases} \quad (A.2)$$

希望在 (s, τ) 平面上偏导满足如下形式，从未消去对流项

$$\begin{cases} \frac{\partial B}{\partial s} = \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial B}{\partial \tau} = \frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} \end{cases} \quad (A.3)$$

其中具体的变化为：

$$\begin{cases} \frac{\partial B}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} C[x(s, \tau), t(s, \tau)] = \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial s} \\ \frac{\partial B}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \tau} C[x(s, \tau), t(s, \tau)] = \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau} + \frac{\partial C}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \tau} \end{cases} \quad (A.4)$$

将(A. 4)式带回(A. 3)式可以得到:

$$\begin{aligned}\frac{\partial x}{\partial s} &= 1, & \frac{\partial t}{\partial s} &= 0 \\ \frac{\partial x}{\partial \tau} &= v, & \frac{\partial t}{\partial \tau} &= 1\end{aligned}\quad (\text{A. 5})$$

从而可以得到 (x, t) 与 (s, τ) 之间的线性变换:

$$\begin{cases} x = s + v\tau \\ t = \tau \end{cases} \quad (\text{A. 6})$$

转换后的扩散方程如下:

$$\frac{\partial B}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 B}{\partial s^2} \quad (\text{A. 7})$$

对 s 进行傅立叶变换, 记为 $\mathcal{F}[B(s, \tau)] = \mathcal{B}(\alpha, \tau)$, 得到:

$$\mathcal{B}_\tau(\alpha, \tau) = -\alpha^2 D \mathcal{B}(\alpha, \tau) \quad (\text{A. 8})$$

解此常微分方程得到:

$$\mathcal{B}(\alpha, \tau) = \int_0^\tau e^{-D\alpha^2 \tau} d\tau \quad (\text{A. 9})$$

再通过傅立叶逆变换, 得到

$$\mathcal{B}(\alpha, \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D \tau}} \int_0^\tau e^{-\frac{s^2}{4D\tau}} d\tau \quad (\text{A. 10})$$

最后重新投影到 (x, t) 平面上得到最终解:

$$C(x, t) = \frac{x}{2\sqrt{\pi D t^3}} \exp\left[-\frac{(x - vt)^2}{4Dt}\right] \quad (\text{A. 11})$$

附录 B 黄金分割搜索

黄金分割搜索是一种在指定区间内查找函数极值（最小值或最大值）的技术。对于区间内具有极值的严格单峰函数，它会找到该极值，而对于包含多个极值（可能包括区间边界）的区间，它将收敛到其中一个。如果区间上的唯一极值在区间的边界上，它将收敛到该边界点。该方法通过连续缩小指定间隔上的值范围来操作，这使得它相对较慢，但非常稳健。该技术的名称源于该算法维护四个点的函数值，这些点的三个间隔宽度的比率为 $\phi:1:\phi$ ，其中 ϕ 是黄金比例。这些比率在每次迭代中都保持不变，并且效率最高。除边界点外，在寻找最小值时，中心点始终小于或等于外围点，确保外围点之间包含最小值。寻找最大值时反之亦然。该算法是许多函数评估的斐波那契搜索（也将在下面描述）的限制。斐波那契搜索和黄金分割搜索是由 Kiefer (1953) 发现的（另见 Avriel 和 Wilde (1966)）

多模态 multi-model 分布

样本 1, 样本 2, ……，样本 100, 弄很多曲线, $N(\mu_1, \sigma_1) + N(\mu_2, \sigma_2) + N(\mu_3, \sigma_3)$, 改变 6 个变量, 得到六个值

（如何抽取, 作出 snapshot, 事先有个矩阵, 再把 snapshot 放进去）

找 snapshot, s1, s2, ……，s100, 整个 MRE 对应的 m, 再 Gm_i , 多少样本做多少遍

空间上找出插值点，从而找到有限点

画示意图，多少时刻观测到的污染源，源利用观测的东西繁衍回去，
利用 deim，找多少个点

真实和估计

$$\|P^T Gm - P^T d\| \leq \varepsilon$$

指标，原来 100，现在？