arXiv:2301.11156v1 [math.NA] 3 Jan 2023

关于统一逆问题随机化方法

预印本

Jonathan Wittmer
Oden研究所
德克萨斯大学奥斯汀分校
奥斯汀，德克萨斯州
78712

C G Krishnanunni航空航天工程与工程力学系 德克萨斯大学奥斯汀分校 奥斯汀，德克萨斯州 78712

Hai V.Nguyen航空航天工程与工程力学系 德克萨斯大学奥斯汀分校 奥斯汀，德克萨斯州 78712

Tan Bui-Thanh Oden研究所 航空航天工程与工程力学系 德克萨斯大学奥斯汀分校 奥斯汀，德克萨斯州 78712

2023年1月27日

摘要

本文通过将问题置于随机优化框架下，统一分析了用于求解线性和非线性逆问题的各种随机化方法。借此，我们表明许多随机化方法都是样本均值近似的变体。更重要的是，我们能够证明一个统一的理论结果，为各种随机化方法的渐近收敛提供保证。此外，将随机化方法视为样本均值近似，使我们首次能够证明一个适用于所考虑随机化方法的统一非渐近误差结果。统一框架的另一个重要结果是，它使我们能够发现新的随机化方法。我们针对线性、非线性、代数以及偏微分方程约束逆问题给出了各种数值结果，这些结果验证了理论收敛结果，并讨论了表面上不同的收敛速率以及各种随机化方法的行为。

关键词 随机化、贝叶斯反演、集合卡尔曼滤波器、随机化最大后 验

1 引言

求解由偏微分方程（PDE）支配的大规模不适定逆问题，尽管极具挑战性，却在科学和工程领域具有极大的实际意义。经典的确定性逆问题方法只能给出解的点估计，无法以系统严谨的方式处理逆问题解中的不确定性。贝叶斯表述将逆问题视为统计推断问题，从而系统地量化不确定性。逆问题的贝叶斯框架如下：给定观测数据 $\mathbf{d} \in \mathrm{R}^{k}$ 及其不确定性、支配正问题及其不确定性，以及描述参数 $\boldsymbol{u} \in \mathrm{R}^{n}$中不确定性的先验概率密度函数，逆问题的解就是参数的后验概率分布 $\pi(\boldsymbol{u}|\mathbf{d})$。贝叶斯定理明确地

给出了后验密度:

$$\pi\left(\boldsymbol{u}|\mathbf{d}\right) \propto \pi_{\text{like}}\left(\mathbf{d}|\boldsymbol{u}\right) \times \pi_{\text{prior}}\left(\boldsymbol{u}\right)$$

利用似然 $\pi_{\text{like}}(\mathbf{d}|\boldsymbol{u})$更新先验知识 $\pi_{\text{prior}}(\boldsymbol{u})$。先验编码了我们希望在观测到任何数据之前施加于参数空间的任何知识或假设，而似然则明确表示给定的一组参数 $\boldsymbol{u}$ 可能产生观测数据 $\mathbf{d}$ 的概率。

即使先验和噪声概率分布均为高斯分布，后验分布也未必是高斯分布，因为似然中可能包含非线性。对于大规模反问题，在高维空间中探索非高斯后验分布以计算统计量是一项重大挑战，因为要计算参数空间中每个点的后验分布，都需要求解参数到观测量映射，其中包括可能代价高昂的正向模型求解。例如，在高维空间中通常无法通过数值求积计算均值和协方差矩阵。计算统计量通常首选马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法，该方法以审慎的方式从后验分布中抽取样本，从而利用样本统计量近似精确统计量。

Metropolis-Hastings（MH）算法最初由 Metropolis等人 [1] 提出，随后由 Hastings [2],推广，或许是最流行的马尔可夫链蒙特卡罗方法。它广受欢迎且颇具吸引力，原因在于易于实现，且对目标密度和提议密度的要求极低 [3, 4]。然而，问题在于，标准的马尔可夫链蒙特卡罗方法通常需要数百万个样本才能收敛；由于每个样本都需要计算一次参数到观测量映射，这可能意味着要进行数百万次代价高昂的正向偏微分方程模拟——这令人难以承受。一方面，随着并行计算的快速发展，人们开始研究并行MCMC方法 [5, 6, 7, 8, 9]来加速计算。虽然并行化使MCMC算法能够利用多个处理器在更短时间内生成更多样本，但这类加速通常无法改善MCMC算法的混合和收敛性。另一方面，更复杂的MCMC方法利用对数后验（以及参数到观测量映射）的梯度和高阶导数 [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19] ，可以改善MCMC的混合、接受率和收敛性。另一类基于样本的方法也能进行不确定性量化，并且非常适合在大型集群上并行化，即Stein变分梯度下降的各种形式 [20, 21, 22, 23]。此外，粒子滤波方法也值得关注，例如[24, 25, 26, 27]中的方法，它们会随时间在动力系统中演化粒子，同时更新状态估计和不确定性。

解决高维统计逆问题中计算挑战的一种方法是采用随机化，要么降低用于估计最大后验点 [28]，的优化问题的维度，要么帮助从后验分布 [29] 中抽样。已有若干方法利用随机化来加速逆问题 [28, 29, 30, 31, 32, 33] 的求解。作为本文的主要贡献，我们推导出一组统一的随机化反问题方法结果，适用于广泛的线性和非线性反问题，不仅适用于渐近情形，也适用于非渐近情形。各种现有方法的渐近收敛性和非渐近误差界都可以立即作为一般结果的特例得出。

2 从样本均值近似的视角统一分析随机化反问题

在本文余下部分中，我们将用小写字母表示标量（α），用粗体小写字母表示向量（$\boldsymbol{u}$），用粗体大写字母表示矩阵（$\boldsymbol{A}$）。此外，我们将用上标小写字母表示样本索引，用下标大写字母表示样本总数；也就是说，$\boldsymbol{\lambda}^i$ 是第 i^{th} 个样本，而 $\boldsymbol{u}_N$ 是一个取决于 N 个样本的量。最后，描述性文字或方法名称将用大写上标表示，例如 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$，它表示在最大后验点处的 $\boldsymbol{u}$。具体含义可根据上下文判断。
因此，令 $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}_0 \in \mathrm{R}^n$。此时的后验测度 ν 相对于勒贝格测度具有密度 $\pi(\boldsymbol{u}|\mathbf{d})$:

$$\pi\left(\boldsymbol{u}|\mathbf{d}\right) \propto \pi_{\text{like}}\left(\mathbf{d}|\boldsymbol{u}\right) \times \pi_{\text{prior}}\left(\boldsymbol{u}\right) \tag{1}$$

其中，似然由 $\pi_{\text{like}}(\mathbf{d}|\boldsymbol{u}) \propto \exp\left(-\Phi\left(\boldsymbol{u}, \mathbf{d}\right)\right) = \exp\left(-\frac{1}{2}\left\|\mathbf{d} - \mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right\|^2_{\mathbf{Ł}^{-1}}\right)$ 给出，先验则由$\pi_{\text{prior}} \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_0\right\|^2_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}\right)$给出。这里，$\mathcal{F}(\boldsymbol{u})$称为参数到观测量（PtO）映射，对其求值通常需要求解支配底层物理的正向模型（例如偏微分方程）。最大后验 （MAP）问题可表示为

$$\boldsymbol{u}^{\text{MAP}} := \arg\min_{\boldsymbol{u}} \mathcal{J}\left(\boldsymbol{u}; \boldsymbol{u}_0, \mathbf{d}\right) := \frac{1}{2}\left\|\mathbf{d} - \mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)\right\|^2_{\mathbf{Ł}^{-1}} + \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_0\right\|^2_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}, \tag{2}$$

其中 $\mathbf{\Gamma} \in \mathrm{R}^{n\times n}$ 是先验协方差矩阵，而$\mathbf{Ł} \in \mathrm{R}^{k\times k}$ 是噪声协方差矩阵 x.
在本文余下部分，我们用 E 表示期望，下标表示计算期望所针对的随机变量。若上下文已明确随机变量，为简洁起见，我们将省略下标。设 $\boldsymbol{\sigma}$、ε、$\boldsymbol{\delta}$、和 $\boldsymbol{\lambda}$ 是有限维独立随机变量，且其二阶矩有界，并满足:

$$\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\sigma}\right]=0,\quad \mathbb{E}\left[\varepsilon\varepsilon^{T}\right]=\mathbf{Ł}^{-1},\quad \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\delta}\right]=0,\quad \mathbb{E}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^{T}\right]=\mathbf{\Gamma}^{-1}. \tag{3}$$

令 $\boldsymbol{\xi}=\left[\boldsymbol{\sigma},\varepsilon,\boldsymbol{\delta},\boldsymbol{\lambda}\right]^{T}\in\mathbf{\Xi}$ 服从联合概率分布 $\pi=\pi_{\boldsymbol{\sigma}}\times\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}\times\pi_{\boldsymbol{\delta}}\times\pi_{\boldsymbol{\lambda}}$。考虑以下随机代价函数:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\xi}\right):=&\frac{1}{2}\left\|\varepsilon^{T}\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)\right)\right\|_2^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{\lambda}^{T}\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\boldsymbol{\delta}\right)\right\|_2^2\\ =&\frac{1}{2}\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)\right)^{T}\varepsilon\varepsilon^{T}\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\\ &+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\boldsymbol{\delta}\right)^{T}\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^{T}\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\boldsymbol{\delta}\right).\end{aligned} \tag{4}$$

定义

$$\mathscr{J}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d}\right):=\mathbb{E}_{\pi}\left[\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\xi}\right)\right],$$

并将 $\mathscr{J}$ 的样本均值近似（SAA）定义为

$$\mathscr{J}_N:=\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\xi}^{j}\right) \tag{5}$$

whe是来自 π的独立同分布样本。假设 $\mathcal{J}$和 $\mathscr{J}_N$ 均存在最小值，并定义 e

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}:=\arg\min_{\boldsymbol{u}}\mathcal{J},\ \text{and}\ \hat{\boldsymbol{u}}_N^{\mathrm{MAP}}:=\arg\min_{\boldsymbol{u}}\mathscr{J}_N. \tag{6}$$

下面我们研究$\hat{}\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{MAP}}$ 向 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$的渐近收敛和非渐近收敛。

2.1 逆问题的渐近收敛分析

˜定理 1 (随机非线性逆问题的渐近收敛**)**。假设 $\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)$ 满足：对于几乎处处的 $\boldsymbol{\xi}$，$\mathcal{J}$是关于 $\boldsymbol{u}$ 的凸二次连续可微函数，且[1]可测。则以下结论成立:

i) 最小化 $\mathscr{J}$等价于最小化 $\mathcal{J}$，具体而言：极小值点$_{\boldsymbol{u}}\,\mathcal{J}=$极小值点$_{\boldsymbol{u}}\,\mathscr{J}$。

ii) $\hat{\boldsymbol{u}}_N^{\mathrm{MAP}}\xrightarrow[N\to\infty]{a.s.}\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$.

证明。对于第一个 断言，只考虑 $\mathscr{J}$的第一项，因为第二项可用类似的方法处理。我们有

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\mathbb{E}_{\pi}\left[\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)^{T}\varepsilon\varepsilon^{T}\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right]\\ &\quad=\frac{1}{2}\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}\times\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)^{T}\varepsilon\varepsilon^{T}\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right]\\ &\quad=\frac{1}{2}\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}}\left[\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)^{T}\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\varepsilon\varepsilon^{T}\right]\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right]\\ &\quad=\frac{1}{2}\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}}\left[\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)^{T}\mathbf{Ł}^{-1}\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right]\\ &\quad=\frac{1}{2}\left(\mathbf{d}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)^{T}\mathbf{Ł}^{-1}\left(\mathbf{d}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)+\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}}\left[\boldsymbol{\sigma}^{T}\mathbf{Ł}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\right].\end{aligned} \tag{7}$$

式 (7) 中的最后一项相对于 $\boldsymbol{u}$ 是常数，可以忽略，因此只剩下 $\mathcal{J}$ 的第一项。对 $\mathscr{J}$ 的第二项应用相同的步骤可知，最小化 $\mathscr{J}$ 等价于最小化 $\mathcal{J}$。
我们利用 [34，定理 5.4] 来证明第二个断言。只需验证以下条件 s:

[1]这里，可测是相对于由确定性 $(\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d})$ 和随机变量 $\boldsymbol{\xi}$ 的乘积 σ-代数所生成的 σ-代数而言的。

˜(i) $\mathcal{J}(\boldsymbol{u};\ \boldsymbol{u}_0,\mathbf{d}\ \boldsymbol{\xi})$ 是随机下半连续的,

˜(ii) 对几乎所有的 $\boldsymbol{\xi}\in\Xi$, $\mathcal{J}(\boldsymbol{u};\ \boldsymbol{u}_0,\ \mathbf{d}\ \boldsymbol{\xi})$, 在 $\boldsymbol{u}$ 上是凸的,

(iii) $\mathscr{J}(\boldsymbol{u};\ \boldsymbol{u}_0,\mathbf{d})$ 是 在 $\boldsymbol{u}$ 上下半连续，并且存在一点 $\bar{\boldsymbol{u}}\in\mathrm{R}^n$，使得 $\mathscr{J}(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\ \mathbf{d})<\infty$ 对 al l $\boldsymbol{u}$在一个邻域中ood 的 $\bar{\boldsymbol{u}}$;

(iv) 真问题的最优解集合非空且有界；并且

(v) 大数定律（LLN） [35, 36] 对 $\mathscr{J}_N$逐点成立。

˜ ˜显然, 对于每个 $\boldsymbol{\xi}$, $\mathcal{J}$ 都是连续函数，因此也是随机下半连续的。根据假设，对于几乎所有 $\boldsymbol{\xi}$, $\mathcal{J}$ 也是凸的。由于有界性假设 (3)，且 $\mathcal{J}$ 是连续凸函数， $\mathscr{J}$ 也是连续凸函数。此外，例如在 (17) 中取 $\bar{\boldsymbol{u}}=\boldsymbol{u}_1$，很容易看出，对于任何以 $\bar{\boldsymbol{u}}$为中心且半径有限的球， $\mathscr{J}(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d})<\infty$。最后两个条件显然成立。 □

当我们考虑参数到观测量映射为线性的反问题时，会出现该定理的一个重要特例。当正向映射 $\mathcal{F}(\boldsymbol{u})$ 为线性时，凸性和连续可微性假设均得到满足。虽然一般而言，要求凸性是一个很强的假设，但对于正则化反问题，这并非无法克服的问题。注意， $\mathcal{J}$的海森矩阵为

$$\nabla_{\boldsymbol{u}}^2\mathcal{J}=\nabla_{\boldsymbol{u}}^2\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)\text{Ł}^{-1}\left(\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)-\mathbf{d}\right)+\nabla_{\boldsymbol{u}}\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)^T\text{Ł}^{-1}\nabla_{\boldsymbol{u}}\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)+\boldsymbol{\Gamma}^{-1}.$$

因此，可以选择先验协方差矩阵，使得 $\nabla_{\boldsymbol{u}}^2\mathcal{J}$ 为半正定。事实上，这正是先验协方差在正则化不适定逆问题中发挥的主要作用。

最后需要注意的是，我们不必将所有随机变量 $\boldsymbol{\sigma}$, ε, $\boldsymbol{\lambda}$, 和 $\boldsymbol{\delta}$ 视为一个整体并像式（5）那样一起抽样，而可以选择分别近似每个随机变量，应用 [34, 定理 5.4] 四次来完成渐近证明。

$$\tilde{\boldsymbol{u}}_N^{\mathrm{MAP}}:=\arg\min_{\boldsymbol{u}}\frac{1}{N_1N_2N_3N_4}\sum_{i=1}^{N_1}\sum_{j=1}^{N_2}\sum_{k=1}^{N_3}\sum_{l=1}^{N_4}\tilde{\mathcal{J}}_N\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\left[\boldsymbol{\sigma}^i;\varepsilon^j;\boldsymbol{\lambda}^k;\boldsymbol{\delta}^l\right]\right)\tag{8}$$

在决定 如何抽取样本的灵活性，将有助于非渐近收敛分析，也将 l 提供极大的自由度 以便在第 5 节中设计各种求解逆问题的随机化方法。

为减轻一些符号负担，我们定义几个新量。

$$\boldsymbol{S}_N:=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\varepsilon^i(\varepsilon^i)^T,\qquad\boldsymbol{L}_N:=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\lambda}^i(\boldsymbol{\lambda}^i)^T,\tag{9a}$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N:=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\sigma}^i,\qquad\bar{\boldsymbol{\delta}}_N:=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\delta}^i.\tag{9b}$$

用范数表示，等式 (8) 可写为

$$\tilde{\boldsymbol{u}}_N^{\mathrm{MAP}}=\arg\min_{\boldsymbol{u}}\frac{1}{2}\left\|\mathbf{d}+\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N-\mathcal{F}\left(\boldsymbol{u}\right)\right\|_{\boldsymbol{S}_N}^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\bar{\boldsymbol{\delta}}_N\right\|_{\boldsymbol{L}_N}^2.\tag{10}$$

注意，当 ε 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 中至多一个是随机化的，且 $\boldsymbol{\lambda}$ 和 $\boldsymbol{\delta}$ 中至多一个是随机化的时，(10) 与 (5) 等价。这是因为两个代价函数唯一的区别在于 ε 的样本与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的样本如何相互作用，同样， $\boldsymbol{\lambda}$ 的样本与 $\boldsymbol{\delta}$ 的样本如何相互作用。

2.2 非线性反问题的非渐近误差分析

除了证明随机化反问题的一般渐近收敛性外，在稍强的假设下，即随机变量为次高斯[37]，还可以推导出一般的非渐近误差界。这一非渐近界的一般形式很有用，因为其中构成误差界的关键要素很容易辨认；若某些量未经过随机化，便可轻松简化，从而深入了解各种方法的性能。推导出的误差界给出了有限样本下的概率最坏情形

量 N，适用于上述所有随机化同时实施的情况。固定其中一些量后，给定的误差界便可直接简化，从而得到更具启发性的误差界。

此外，我们遵循标准的向量范数记号约定：$\|\boldsymbol{u}\|_\infty := \max(|\boldsymbol{u}_1|, ..., |\boldsymbol{u}_n|)$，以及 $\|\boldsymbol{u}\|_1 := \sum_{i=1}^n |\boldsymbol{u}_i|$，其中向量 $\boldsymbol{u} \in \mathrm{R}^n$。矩阵范数均指诱导范数 [38]。由于有限维空间中范数的等价性，所有结果对其他范数也成立，不过常数会有所不同，并且可能依赖于维数。我们用 w.p. 作为以概率的缩写。

命题 2（零均值次高斯随机向量的收敛性）。设 $\boldsymbol{\delta}^i$（$i = 1, ..., N$）是 $\mathbb{R}^n$ 中相互独立的次高斯随机向量，满足 $\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\delta}^i\right] = \mathbf{0}$、$\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\delta}^i(\boldsymbol{\delta}^i)^T\right] = \Gamma$，以及 $\mathbb{E}\left[(\boldsymbol{\delta}^i)^T\boldsymbol{\delta}^i\right] < \infty$。记经验均值为 $\bar{\boldsymbol{\delta}} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \boldsymbol{\delta}^i$。此外，设 $\zeta(N, \beta) := \exp\left(-c\beta^2 N\right)$，其中某个 $\beta > 0$，且 c 是一个可能依赖于维数 n、但不依赖于 N 的常数。那么

$$\left\|\bar{\boldsymbol{\delta}}\right\|_\infty \le \beta \left\|\Gamma^{\frac{1}{2}}\right\|_\infty \quad \textit{w.p. at least } 1 - \zeta(N, \beta). \tag{11}$$

证明。定义 $\boldsymbol{\delta}^i = \Gamma^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{\tau}^i$，其中 $\boldsymbol{\tau}^i \sim \mathcal{N}(\mathbf{0},\ \mathcal{I})$。因此，$\boldsymbol{\tau} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \boldsymbol{\tau}^i \sim \mathcal{N}\left(0,\ \frac{\mathcal{I}}{N}\right)$。首先，根据[2] [39, 定理 1]，我们有

$$\mathbb{P}\left[\|\boldsymbol{\tau}\|_\infty > \beta_1\right] \ \le\ \mathbb{P}\left[\|\boldsymbol{\tau}\|_1 > \beta_1\right] \ \le\ \exp\left(-\frac{\beta_1^2}{4cn}\right),$$

其中 c是一个绝对正常数。因此，为合并常数项而略去符号上的区别，我们有

$$\mathbb{P}\left[\|\overline{\boldsymbol{\tau}}\|_\infty \ >\ \frac{\beta_1}{\sqrt{N}}\right] \ \le\ \exp\left(-c\beta_1^2\right)$$

因为 $\sqrt{N}\cdot\overline{\boldsymbol{\tau}}$ 具有单位协方差。接下来，令 $\beta = \frac{\beta_1}{\sqrt{N}}$，并注意到

$$\mathbb{P}\left[\left\|\bar{\boldsymbol{\delta}}\right\|_\infty \ \le\ \beta\left\|\Gamma^{\frac{1}{2}}\right\|_\infty\right] \ \ge\ \mathbb{P}\left[\|\overline{\boldsymbol{\tau}}\|_\infty \ \le\ \beta\right] \ \ge\ 1 - \exp\left(-c\beta^2 N\right),$$

由此证明得证。 □

命题 3（次高斯随机向量外积的收敛性）。设 $\boldsymbol{\omega}^i$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个次高斯随机向量，满足 $\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\omega}^i(\boldsymbol{\omega}^i)^T\right] = \Gamma$，其中 $i = 1, ..., N$。定义 Ω_N 为将 ω^i 按列堆叠并乘以 $1/\sqrt{N}$ 后得到的随机矩阵。由此可得

$$\left\|\Omega_N\Omega_N^T - \Gamma\right\|_\infty \le \beta\|\Gamma\|_\infty \ \textit{w.p. at least } 1 - 2\zeta(N, \beta), \tag{12}$$

其中 c 是一个依赖于 n 但不依赖于 N 的常数。

证明。该结果可由对 [37, 定理 4.6.1] 进行直接的代数运算得到。 □

证明一个非渐近界所需的另一项事实是，三个次高斯随机变量的乘积是 α-次指数型的，其 $\alpha = 2/3$。以下关于 α–次指数型随机变量的讨论基于 [40]。如需更全面地了解这一主题，可参阅 [40]。

已有结果表明，两个次高斯随机变量的乘积是次指数型的 [37, 引理 2.7.7]。若一个中心化随机变量 X 满足下式，则称其为 α-次指数型（或次威布尔 [41, 42]）：

$$\mathbb{P}[|X| \ge \beta] \le 2\exp\left(-c\beta^\alpha\right),$$

对任意 $\beta > 0$、$\alpha \in (0, 2]$，以及某个正常数 c均成立。要证明一个随机变量满足该条件，只需证明下列奥利奇（准）范数 [40, 37] 有限：

$$\|X\|_{\psi_\alpha} := \inf\left[\beta > 0 : \mathbb{E}\exp\left(\left(|X|/\beta\right)^\alpha\right) \le 2\right] < \infty. \tag{13}$$

当 $\alpha < 1$时，这是一个拟范数，因为它不满足三角不等式。

命题 4 (α-由三个次高斯随机变量的乘积得到的次指数分布)。设 X_1、X_2、X_3 为次高斯随机变量。则 $Y = X_1X_2X_3$ 是一个 α-次指数随机变量，且 $\alpha = 2/3$。

[2]虽然 [39, 定理 1] 是针对高斯随机矩阵推导出来的，但它也适用于次高斯随机矩阵，因为次高斯随机变量的矩生成函数期望值具有相同的上界（详见 [37, 命题 2.5.2]）。

证明。只需证明 $\mathbb{E}\exp\left(\left(|Y|\right)^{2/3}\right) \leq 2$。不失一般性，设 $\|X_i\|_{\psi_2} = 1$。于是 $\mathbb{E}\exp\left(X_i^2\right) \leq 2$，并且我们有

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\exp\left(\left(|Y|\right)^{2/3}\right) &= \mathbb{E}\exp\left(\left(|X_1|^{2/3}|X_2|^{2/3}|X_3|^{2/3}\right)\right) \\
&\leq \mathbb{E}\exp\left(\frac{{X_1}^2}{3}+\frac{{X_2}^2}{3}+\frac{{X_3}^2}{3}\right) \quad \text{(Young's inequality for 3 variables [43])} \\
&= \mathbb{E}\exp\left(\frac{{X_1}^2}{3}\right)\exp\left(\frac{{X_2}^2}{3}\right)\exp\left(\frac{{X_3}^2}{3}\right) \\
&\leq \mathbb{E}\frac{1}{3}\left[\exp\left({X_1}^2\right)+\exp\left({X_2}^2\right)+\exp\left({X_3}^2\right)\right] \quad \text{(Young's inequality again)} \\
&\leq 2.
\end{aligned}$$

□

推论 5. 设 $\boldsymbol{\delta} \in \mathbb{R}^n$ 是一个零均值随机向量，满足 $\mathbb{E}[\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\delta}^T] = \boldsymbol{\Gamma}$，且各分量为 α-次指数型。定义$\zeta_\alpha(N,\beta) := \exp\left(-c\beta^\alpha N^{\alpha/2}\right)$。则

$$\mathbb{P}\left[\left\|\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{\delta}^i\right\|_\infty \leq \beta\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{\frac{1}{2}}\right\|_\infty\right] \geq 1-2n\zeta_\alpha(N,\beta). \tag{14}$$

请注意，尽管不等式 (14) 中指数项前有维数 n，但该维数是固定的，因此发生误差超过某个容差的概率仍会随样本数 N 增加而呈指数下降。虽然与次高斯误差率 $\propto \exp(-N)$ 相比，其衰减速度较慢，为 $\propto \exp\left(-N^{\alpha/2}\right)$，但这并不令人意外，因为当 $\alpha = 2$ [40] 时，次高斯分布是 α-次指数分布的特例。结合这些结果，可以推导出非线性反问题的概率型非渐近误差界。

引理 6（随机化非线性逆问题的非渐近误差分析）。令 $\mathrm{vec}\left(\boldsymbol{Ł}^{-1}\right)$ 表示矩阵 $\boldsymbol{Ł}^{-1}$的向量化形式。定义

为由以下四个向量连接而成的向量：$\boldsymbol{P} := \left[\mathrm{vec}\left(\boldsymbol{Ł}^{-1}\right); \mathrm{vec}\left(\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right); \boldsymbol{e}; \boldsymbol{z}\right]$ $\mathrm{vec}\left(\boldsymbol{Ł}^{-1}\right)$、$\mathrm{vec}\left(\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)$、$\boldsymbol{e}$ 和 $\boldsymbol{z}$，其中 $\boldsymbol{Ł} \in \mathbb{R}^{k\times k}$、$\boldsymbol{\Gamma} \in \mathbb{R}^{n\times n}$、$\boldsymbol{e} \in \mathbb{R}^k$，以及$\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$。定义函数

$$g(\boldsymbol{P};\boldsymbol{u}) := \nabla_{\boldsymbol{u}}\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\left[\boldsymbol{Ł}^{-1}\left(\mathcal{F}(\boldsymbol{u})-\mathbf{d}\right)-\boldsymbol{e}\right]+\boldsymbol{\Gamma}^{-1}(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0)-\boldsymbol{z}.$$

假设问题 $g(\boldsymbol{P};\ \boldsymbol{u}) = 0$ 关于 $\boldsymbol{P}$（参数）和 $\boldsymbol{u}$（解）是利普希茨适定的 *[44]*，且 *Lipschitz* 常数为 $\mathcal{L}$，并将解定义为 $\mathcal{G}(\boldsymbol{P})$ $\boldsymbol{u}$。令

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{P}^{\mathrm{MAP}} &:= \left[\mathrm{vec}\left(\boldsymbol{Ł}^{-1}\right);\ \mathrm{vec}\left(\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right);\ 0;\ 0\right], \\
\tilde{\boldsymbol{P}}_N &:= \left[\mathrm{vec}\left(\boldsymbol{S}_N\right);\ \mathrm{vec}\left(\boldsymbol{L}_N\right);\ \boldsymbol{S}_N\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N;\ \boldsymbol{L}_N\bar{\boldsymbol{\delta}}_N\right], \\
\hat{\boldsymbol{P}}_N &:= \left[\mathrm{vec}\left(\boldsymbol{S}_N\right);\ \mathrm{vec}\left(\boldsymbol{L}_N\right);\ \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\varepsilon}^i\left(\boldsymbol{\varepsilon}^i\right)^T\boldsymbol{\sigma}^i;\ \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\lambda}^i\left(\boldsymbol{\lambda}^i\right)^T\boldsymbol{\delta}^i\right],
\end{aligned}$$

其中 $\mathbb{E}[\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^T] = \boldsymbol{Ł}$ 且 $\mathbb{E}[\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\delta}^T] = \boldsymbol{\Gamma}$。于是

$$\begin{aligned}
\left\|\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}-\tilde{\boldsymbol{u}}_N^{\mathrm{MAP}}\right\|_\infty &\leq \beta\mathcal{L}\left(\left\|\boldsymbol{Ł}^{-1}\right\|_\infty+\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right\|_\infty+(1+\beta)\left\|\boldsymbol{Ł}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty+(1+\beta)\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty\right) \\
&\quad \textit{w.p. at least } 1-10\zeta(N,\beta),
\end{aligned} \tag{15}$$

and

$$\begin{aligned}
\left\|\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}-\hat{\boldsymbol{u}}_N^{\mathrm{MAP}}\right\|_\infty &\leq \beta\mathcal{L}\left(\left\|\boldsymbol{Ł}^{-1}\right\|_\infty+\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right\|_\infty+\left\|\boldsymbol{Ł}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty+\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty\right) \\
&\quad \textit{w.p. at least } 1-4\zeta(N,\beta)-2k\zeta_{2/3}(N,\beta)-2n\zeta_{2/3}(N,\beta).
\end{aligned} \tag{16}$$

证明。注意到 hat $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}} = \mathcal{G}\left(\boldsymbol{P}_{\text{最大后验}}\right)$ 和 $\tilde{\boldsymbol{u}} = \mathcal{G}\left(\tilde{\boldsymbol{P}}_N\right)$，根据利普希茨适定性假设 n,

$$\begin{aligned}
\left\|\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}-\tilde{\boldsymbol{u}}_N^{\mathrm{MAP}}\right\|_\infty &= \left\|\mathcal{G}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{MAP}}\right)-\mathcal{G}\left(\tilde{\boldsymbol{P}}_N\right)\right\|_\infty \leq \mathcal{L}\left\|\boldsymbol{P}-\tilde{\boldsymbol{P}}_N\right\|_\infty \\
&\leq \mathcal{L}\left(\left\|Ł^{-1}-\boldsymbol{S}_N\right\|_\infty+\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{-1}-\boldsymbol{L}_N\right\|_\infty+\left\|\boldsymbol{S}_N\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N\right\|_\infty+\left\|\boldsymbol{L}_N\bar{\boldsymbol{\delta}}_N\right\|_\infty\right).
\end{aligned}$$

¯我们可以如下界定 $\boldsymbol{S}_N\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N$（ $\boldsymbol{L}_N\boldsymbol{\delta}_N$同理）

$$\begin{aligned}\left\|\boldsymbol{S}_N\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N\right\|_\infty &= \left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\left(\text{Ł}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{S}_N\text{Ł}^{\frac{1}{2}}-\mathcal{I}+\mathcal{I}\right)\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N\right\|_\infty \\ &\le \left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\left(\text{Ł}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{S}_N\text{Ł}^{\frac{1}{2}}-\mathcal{I}\right)\right\|_\infty\left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N\right\|_\infty+\left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty\left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N\right\|_\infty.\end{aligned}$$

注意，$\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N$ 是一个均值为零、具有单位协方差的次高斯随机变量的样本均值，并且 $\mathrm{E}[\text{Ł}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{S}_N\text{Ł}^{\frac{1}{2}}]=\mathcal{I}$。因此，将命题 3 应用于 $\left\|\text{Ł}^{\frac{1}{2}}\boldsymbol{S}_N\text{Ł}^{\frac{1}{2}}-\mathcal{I}\right\|_\infty$，将命题 2 应用于 $\left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N\right\|_\infty$，再结合并集界，可得

$$\left\|\boldsymbol{S}_N\bar{\boldsymbol{\sigma}}_N\right\|_\infty\le\left(\beta^2+\beta\right)\left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty \quad \text{w.p. at least } 1-3\zeta\left(N,\beta\right).$$

以至少 $1-3\zeta(N,\ \beta)$ 的概率得到界 $\left\|\boldsymbol{L}_N\bar{\boldsymbol{\delta}}_N\right\|_\infty\le\left(\beta^2+\beta\right)\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty$ 的证明与此类似。将命题 3 应用于项 $\left\|\boldsymbol{S}_N-\text{Ł}^{-1}\right\|_\infty$ 和 $\left\|\boldsymbol{L}_N-\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right\|_\infty$，再结合并集界，即可得到不等式 (15)。

为了证明 $\left\|\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}-\hat{}\boldsymbol{u}_N^{\text{MAP}}\right\|_\infty$ 满足式 (16) 中的界，只需根据 $\hat{}\boldsymbol{P}_N$ 的定义对 $\|\boldsymbol{e}\|_\infty$ 和 $\|\boldsymbol{z}\|_\infty$ 进行界定，因为 $\left\|\boldsymbol{S}_N-\text{Ł}^{-1}\right\|_\infty$ 和 $\left\|\boldsymbol{L}_N-\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right\|_\infty$ 的界已得到证明。根据命题 4，$\boldsymbol{\varepsilon}^i\left(\boldsymbol{\varepsilon}^i\right)^T\boldsymbol{\sigma}^i$ 是一个均值为零、 $2/3$-次指数的随机变量，其协方差为 Ł^{-1}。因此，根据推论 5，

$$\mathbb{P}\left[\|\boldsymbol{e}\|_\infty\le\beta\left\|\text{Ł}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty\right]\ge1-2k\zeta_{2/3}\left(N,\beta\right).$$

类似地，将推论 5 应用于 $\|\boldsymbol{z}\|_\infty$ 可得

$$\mathbb{P}\left[\|\boldsymbol{z}\|_\infty\le\beta\left\|\boldsymbol{\Gamma}^{-\frac{1}{2}}\right\|_\infty\right]\ge1-2n\zeta_{2/3}\left(N,\beta\right).$$

使用并集界将关于 $\|\boldsymbol{e}\|_\infty$ 和 $\|\boldsymbol{z}\|_\infty$ 的界与先前针对 $\left\|\boldsymbol{S}_N-\text{Ł}^{-1}\right\|_\infty$ 和$\left\|\boldsymbol{L}_N-\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right\|_\infty$ 得到的界结合起来，即可得到不等式（16）。 □

引理 6 为分析各种随机化方法的收敛性提供了一般策略。当某个变量未进行随机化时，只需删去方程（15）和（16）中的相应项，并相应调整概率。此外，正如后文将要讨论的，Lipschitz 常数可能会受到随机化策略选择的影响。通过仅对部分变量进行随机化，逆问题解可能具有更低的最坏情况敏感度（Lipschitz 常数）。注意，由于我们主要关注较小的偏差，因此只需考虑适定的反问题：其解在 $\mathbf{d}$ 处处连续，并且在 $\left[\text{vec}\left(\text{Ł}^{-1}\right);\text{vec}\left(\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right);0;\ 0\right]$ 的邻域内以局部 Lipschitz 方式依赖于 $\boldsymbol{P}$。注意，由于 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 起到正则化作用，解不太可能处处连续地依赖于 $\boldsymbol{P}$。否则，原问题就不会是不适定的。特别是，$\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 所发挥的正则化作用可能使逆问题的解对 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 的扰动尤其敏感，从而使（局部）Lipschitz 常数相较于 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 未进行随机化的情形大幅增大。在线性情形下，这一点十分明显，此时问题的条件数取代了 Lipschitz 常数。众所周知，$\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 的选择会显著影响 [45, 46] 的条件数。最后注意，在线性情形下，可以使用线性系统的标准扰动理论，得到关于 $\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathcal{A}+\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 的条件数的相对误差显式界。

3 随机逆问题方法的再发现

本节将推导出几种已知的随机化方案，作为式 (4) 中提出的更一般随机化方案的特例。在本节余下部分，我们将明确写出随机代价函数所依赖的各个随机变量（$\boldsymbol{\xi}=[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\varepsilon},\boldsymbol{\delta},\boldsymbol{\lambda}]^T$ 的子集）。为使符号简洁，对于所有随机化方案，我们都用 $\tilde{\mathcal{J}}$ 表示随机代价函数，其具体形式可从上下文中看出。如果 $\boldsymbol{\sigma}$ 没有作为 $\tilde{\mathcal{J}}$ 的自变量出现，则在式 (4) 中将其替换为 0。同样，当相应的随机变量没有作为 $\tilde{\mathcal{J}}$ 的自变量出现时，我们在式 (4) 中分别将 $\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T$ 替换为 Ł^{-1}，将 $\boldsymbol{\delta}$ 替换为 0，并将 $\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T$ 替换为 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$。此外，我们将在一般非线性情形下介绍每种方法；但由于线性情形下存在闭式解，我们也会明确写出其样本平均解，从而获得更多见解。为此，我们写出线性逆问题最大后验估计的两种等价表述。

命题 7。当 *PtO*映射是线性的，即 $\mathcal{F}(\boldsymbol{u}) = \mathcal{A}\boldsymbol{u}$，最大后验问题（2）的解可由以下任一方式给出

$$\boldsymbol{u}_1 = \left(\mathcal{A}^T \text{Ł}^{-1}\mathcal{A} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1}\left(\mathcal{A}^T \text{Ł}^{-1}\mathbf{d} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{u}_0\right) \tag{17a}$$

or

$$\boldsymbol{u}_2 = \boldsymbol{u}_0 + \boldsymbol{\Gamma}\mathcal{A}^T\left(\text{Ł} + \mathcal{A}\boldsymbol{\Gamma}\mathcal{A}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{d} - \mathcal{A}\boldsymbol{u}_0\right). \tag{17b}$$

证明。第一个恒等式直接由式 (2) 的最优性条件推导得出。具体而言，

$$\nabla\mathcal{J} = \left(\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathcal{A} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)\boldsymbol{u} - \mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathbf{d} - \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{u}_0 = 0. \tag{18}$$

第二种表述可利用 Sherman-Morrison-Woodbury 公式 [47] 从 $\boldsymbol{u}_1$ 推导得出，条件是 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 和 Ł^{-1} 可逆。 □

注 8。关于 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 可逆性的这一最后假设，乍看之下似乎显而易见，因为 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 被写成了一个矩阵的逆；然而，在接下来关于随机化的讨论中，这一假设将十分重要。

此外，我们定义新的随机变量：

$$\mathbf{d}^i := \mathbf{d} + \boldsymbol{\sigma}^i \quad \text{and} \quad \boldsymbol{u}_0^i := \boldsymbol{u}_0 + \boldsymbol{\delta}^i, \tag{19}$$

其中，$\boldsymbol{\sigma}^i$ 和 $\boldsymbol{\delta}^i$ 是定理 1 中定义的 $\boldsymbol{\xi}^i$ 的第一和第三个分量。这些量将在以下讨论中发挥作用。根据大数定律，我们有

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{d}^i \xrightarrow[N\to\infty]{a.s.} \mathbf{d} \quad \text{and} \quad \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{u}_0^i \xrightarrow[N\to\infty]{a.s.} \boldsymbol{u}_0.$$

3.1 随机化 MAP 方法

假设最小化与期望的顺序可以互换[3]，我们可以写成

$$\arg\min_{\boldsymbol{u}} \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}\times\pi_{\boldsymbol{\delta}}}\left[\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\delta}\right)\right] = \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}\times\pi_{\boldsymbol{\delta}}}\left[\arg\min_{\boldsymbol{u}}\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\delta}\right)\right]. \tag{20}$$

于是，右端项的样本均值近似可以写成

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RMAP}} := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\arg\min_{\boldsymbol{u}}\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\sigma}^i,\boldsymbol{\delta}^i\right). \tag{21}$$

当 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}}\left[\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^T\right] = \text{Ł}$ 和 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\delta}}}\left[\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\delta}^T\right] = \boldsymbol{\Gamma}$ 时，这种随机化方法与随机化 MAP 方法一致 [29]（也称为随机化最大似然 [49, 50, 51]）。在线性情形下，我们可以写成

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RMAP}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\boldsymbol{u}^{\text{RMAP}}\right)^i,$$

其中，根据命题 7，

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{u}^{\text{RMAP}}\right)^i &= \left(\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathcal{A} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1}\left[\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}^i\right) + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\left(\boldsymbol{u}_0+\boldsymbol{\delta}^i\right)\right]\\ &= \left(\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathcal{A} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1}\left[\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathbf{d}^i + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{u}_0^i\right].\end{aligned}$$

由于式 (20) 右端项的样本均值近似 (21) 收敛于其期望，第 2 节中的分析适用。我们得到以下关于非线性 PtO 映射的结果。

推论 9 (RMAP 的渐近收敛)。 假设非线性 *PtO* 映射 $\mathcal{F}$ 满足定理 *1* 的假设。设 $\boldsymbol{\sigma}^i \sim \pi_{\boldsymbol{\sigma}}$ 和 $\boldsymbol{\delta}^i \sim \pi_{\boldsymbol{\delta}}$ 具有有界协方差，其中 $\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}}[\boldsymbol{\sigma}] = 0$ 且 $\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\delta}}}[\boldsymbol{\delta}] = 0$。那么

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RMAP}} \overset{a.s.}{\to} \boldsymbol{u}^{\text{MAP}} \quad as\ N\to\infty.$$

[3]关于何种条件下交换操作有效，可参见 [48, 定理 14.60]。

请注意，如果只需要最大后验点 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$，那么随机化 MAP 方法就没有用处：事实上，这种方法成本非常高，却只能为 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$提供近似解。不过，这种方法在贝叶斯设定中可能颇具吸引力。确实，通过选择 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}}\left[\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}^T\right] = Ł$ 和 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\delta}}}\left[\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\delta}^T\right] = \boldsymbol{\Gamma}$，每个解 $\left(\boldsymbol{u}^{\text{RMAP}}\right)^i$ 在线性情形下都是后验分布的真实样本。在非线性情形下，$\left(\boldsymbol{u}^{\text{RMAP}}\right)^i$ 是后验分布的有偏样本[29], ，但可以通过梅特罗波利斯化进行校正 [52, 53]。请注意，对于线性逆问题，RMAP 方法与 [51]中的先随机化后优化方法相同（参见 [29]中的说明）。这种随机化 MAP 方法天然适合并行处理，也非常适合在分布式计算系统上实现。虽然我们可以在不交换期望与优化的情况下对数据和先验均值进行随机化，并且仍能保持收敛，但这种方法用处不大，因为我们付出相同成本，得到的却是对 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$ 的不准确近似。

3.2 随机化失配方法（左草图方法）

本节将说明，随机化失配方法（RMA） [28] 是式（4）中我们所用随机化方法的一个特例。事实上，若令 $\boldsymbol{\varepsilon} \sim \pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}$，其中 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}[\boldsymbol{\varepsilon}] = 0$ 且 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\right] = Ł^{-1}$，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}^{\text{RMA}} :&= \arg\min_{\boldsymbol{u}} \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\varepsilon}\right)\right]\\ &= \arg\min_{\boldsymbol{u}} \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{\varepsilon}^T\left(\mathbf{d}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right\|_2^2 + \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0\right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2\right].\end{aligned}$$

$\boldsymbol{u}^{\text{RMA}}$ 的样本平均近似（SAA）可写为

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RMA}} := \arg\min_{\boldsymbol{u}} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\varepsilon}^i\right) \tag{24a}$$

$$= \arg\min_{\boldsymbol{u}} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}\left\|\tilde{\mathbf{d}}^i - \tilde{\mathcal{F}}^i(\boldsymbol{u})\right\|_2^2 + \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0\right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2, \tag{24b}$$

其中

$$\tilde{\mathcal{F}}^i := {\varepsilon^i}^T\mathcal{F} \quad \text{and} \quad \tilde{\mathbf{d}}^i := {\varepsilon^i}^T\mathbf{d}.$$

也就是说，随机样本可以组合成一个随机矩阵，从左侧对 PtO 映射和数据进行草图处理。随机草图已被广泛用于降低求解逆问题的成本 [30, 54, 55]。以下结论可直接由定理 1 得出。

推论10 （RMA的渐近收敛）。 设 $\boldsymbol{u}_N^{\text{RMA}}$如上所定义，则

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RMA}} \overset{a.s.}{\to} \boldsymbol{u}^{MAP} \quad as\ N\to\infty.$$

在线性情形下计算最优性条件可得

$$\boldsymbol{u}^{\text{RMA}} = \left(\mathcal{A}^T\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\right]\mathcal{A} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1}\left(\mathcal{A}^T\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^T\right]\mathbf{d} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{u}_0\right). \tag{25}$$

令

$$\tilde{\mathcal{A}} := \varepsilon^T\mathcal{A} \quad \text{and} \quad \tilde{\mathbf{d}} := \varepsilon^T\mathbf{d},$$

即可将（25）改写为

$$\boldsymbol{u}^{\text{RMA}} = \left(\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\tilde{\mathcal{A}}^T\tilde{\mathcal{A}}\right] + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1}\left(\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}}\left[\tilde{\mathcal{A}}^T\tilde{\mathbf{d}}\right] + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{u}_0\right)$$

如果我们将 RMA 和随机化 MAP 方法结合为一个随机优化问题，就会发现一种新方法，我们将其记为 RMA+RMAP。具体而言，考虑由（4）的随机化直接得到的问题，并将采用 RMA+RMAP 方法求得的解定义为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}^{\text{RMA+RMAP}} :&= \arg\min_{\boldsymbol{u}} \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}\times\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}\times\pi_{\boldsymbol{\delta}}}\left[\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\varepsilon},\boldsymbol{\delta}\right)\right]\\ &= \arg\min_{\boldsymbol{u}} \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\sigma}}\times\pi_{\boldsymbol{\varepsilon}}\times\pi_{\boldsymbol{\delta}}}\left[\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{\varepsilon}^T\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right\|_2^2 + \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\boldsymbol{\delta}\right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2\right],\end{aligned}$$

以及相应的样本平均近似（SAA）解

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}_N^{\text{RMA+RMAP}} &:= \arg\min_{\boldsymbol{u}} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\sigma}^i,\boldsymbol{\varepsilon}^i,\boldsymbol{\delta}^i\right)\\ &= \arg\min_{\boldsymbol{u}} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{2}\left\|{\boldsymbol{\varepsilon}^i}^T\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}^i-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right\|_2^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\boldsymbol{\delta}^i\right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2\right].\end{aligned}$$

以下结果可由定理 1 直接得出。

推论 11（RMA+RMAP 的渐近收敛）。设 $\boldsymbol{u}_N^{\text{RMA+RMAP}}$如上所定义。该 *n*

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RMA+RMAP}} \overset{a.s.}{\to} \boldsymbol{u}^{\text{MAP}} \quad as\ N\to\infty.$$

与 RMAP 方法一样，允许交换优化与期望的次序，并对每个随机变量采用独立样本平均近似，则以下变体序列也收敛。

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RMA+RMAP}_1} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\arg\min_{\boldsymbol{u}}\left[\frac{1}{2}\left\|{\boldsymbol{\varepsilon}^i}^T\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}^i-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right\|_2^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\boldsymbol{\delta}^i\right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2\right]. \tag{28}$$

$$\boldsymbol{u}_{N,M}^{\text{RMA+RMAP}_2} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\arg\min_{\boldsymbol{u}}\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{1}{2}\left\|{\boldsymbol{\varepsilon}^j}^T\left(\mathbf{d}+\boldsymbol{\sigma}^i-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right)\right\|_2^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0-\boldsymbol{\delta}^i\right\|_{\boldsymbol{\Gamma}^{-1}}^2\right]. \tag{29}$$

我们想指出，(29) 或许是结合 RMA 和 RMAP 最直观的方式。噪声协方差矩阵的随机化起到随机投影（左侧草图）的作用，而随机化的先验均值和数据有助于从后验分布中采样。请注意，(29) 是通过仅交换 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{\delta}$ 的优化与期望，从方程 (10) 中定义的损失函数得到的一个变体。另一方面，(28) 很可能会产生不准确的结果，因为它是这样一组解的总和：PtO 映射和数据被投影到一维子空间上；因此，先验分布在每个解中都占主导地位。在线性情形下，$\boldsymbol{u}_{N\,M}^{\text{RMA+RMAP}_2}$，可写为

$$\boldsymbol{u}_{N,M}^{\text{RMA+RMAP}_2} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\tilde{\mathcal{A}}^j\right)^T\tilde{\mathcal{A}}^j+\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1}\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\tilde{\mathcal{A}}^j\right)^T\left(\boldsymbol{\varepsilon}^j\right)^T\mathbf{d}^i+\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{u}_0^i\right).$$

显然，对于其他组合，我们也能证明其收敛到最大后验点，例如仅随机化数据或先验均值中的一个。为避免推论数量组合爆炸，这里省略所有可能性。

3.3 随机化先验

这里我们提出一种随机化方案，通过随机化 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}\sim\pi_{\boldsymbol{\lambda}}$，其中 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}[\boldsymbol{\lambda}]=0$ 和 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]=\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$。令

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}^{\text{RS_U1}} &:= \arg\min_{\boldsymbol{u}}\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\lambda}\right)\right]\\ &= \arg\min_{\boldsymbol{u}}\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\frac{1}{2}\left\|\mathbf{d}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right\|_{\text{Ł}^{-1}}^2+\frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{\lambda}^T\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0\right)\right\|_2^2\right].\end{aligned} \tag{30}$$

将此方法命名为“RS U1”，是因为它与右侧草图方法有关（见第4.1节）。随后，样本平均近似写作

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}_N^{\text{RS_U1}} &:= \arg\min_{\boldsymbol{u}}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\tilde{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u}_0,\mathbf{d},\boldsymbol{\varepsilon}^i\right)\\ &= \arg\min_{\boldsymbol{u}}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}\left\|\mathbf{d}-\mathcal{F}(\boldsymbol{u})\right\|_{\text{Ł}^{-1}}^2+\frac{1}{2}\left\|\left(\boldsymbol{\lambda}^i\right)^T\left(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_0\right)\right\|_2^2.\end{aligned} \tag{31}$$

Co推论 12 (随机先验的渐近收敛)。 设 $\boldsymbol{u}^{\text{RS}}{}_{\text{U}_N}{}^{1}$ 如上所定义。则 *en*

$$\boldsymbol{u}_N^{\text{RS_U1}} \overset{a.s.}{\to} \boldsymbol{u}^{\text{MAP}} \quad as\ N\to\infty.$$

在线性情形下，最优性条件给出以下解

$$\boldsymbol{u}^{\text{RS_U1}} = \left(\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathcal{A}+\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]\right)^{-1}\left(\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathbf{d}+\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]\boldsymbol{u}_0\right).$$

这种方法可以视为从左侧对先验进行草图化。

4 优化、变换，然后随机化

关于迄今讨论的方法，一个重要观察是，线性情形使用 (17a) 中给出的 $\boldsymbol{u}_1$ 求解。也就是说，要证明随机化代价函数的解与文献中相应方法的解等价，只需考察最优解 (17a)。此外，代价函数的样本均值近似，恰好等同于将形式 $\boldsymbol{u}_1$ 中的期望替换为各自的样本均值近似。接下来的方法需要使用 (17b) 中的形式 $\boldsymbol{u}_2$，以考察随机化解与文献中相应方法之间的等价性——其中，在进行样本均值近似之前，先将 Sherman-Morrison-Woodbury 公式应用于最优性条件。由于$\boldsymbol{u}_2$ 仅与 $\boldsymbol{u}_1$ 在线性情形下等价，我们将把接下来的讨论限定在线性逆问题。

4.1 右侧草图与集成卡尔曼滤波器

由于我们现在考虑的是通过对 $\boldsymbol{u}_2$ 进行随机化而得到的方案，因此引入一个新的随机变量 $\boldsymbol{\omega}$，并将其定义为满足 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\omega}}}[\boldsymbol{\omega}] = 0$ 和 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\omega}}}\left[\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\right] = \boldsymbol{\Gamma}$。利用 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\omega}}}\left[\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\right]$的样本平均近似的渐近收敛性，我们得到

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\omega}^i\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^i\right)^T \xrightarrow[N\to\infty]{a.s.} \mathbb{E}_{\boldsymbol{\omega}}\left[\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\mathcal{A}^T\right] = \boldsymbol{\Gamma}\mathcal{A}^T, \tag{32a}$$

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^i\right)\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^i\right)^T \xrightarrow[N\to\infty]{a.s.} \mathbb{E}_{\boldsymbol{\omega}}\left[\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\mathcal{A}^T\right] = \mathcal{A}\boldsymbol{\Gamma}\mathcal{A}^T. \tag{32b}$$

结合（17b）和（32）可得

$$\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{RS}} := \boldsymbol{u}_0 + \left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\omega}^i\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^i\right)^T\right)\left(Ł + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^i\right)\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^i\right)^T\right)^{-1}\left(\mathbf{d} - \mathcal{A}\boldsymbol{u}_0\right), \tag{33}$$

这与 s 相同　　从右侧对 PtO映射 $\mathcal{A}$ 进行草图方法，或从左侧对 PtO映射的转置进行草图方法　　.

引理 13（右侧草图的渐近收敛）。设 $\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{RS}}$由（33）定义，并假设$\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]$（其中 $\boldsymbol{\lambda}$ 在第 *2* 节中定义）可逆。则

$$\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{RS}} \overset{a.s.}{\to} \boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}} \quad as\ N\to\infty.$$

证明。从方程（2）出发，仅对 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 至 $\boldsymbol{\lambda}$进行随机化，最优性条件为

$$\boldsymbol{u}^* = \left(\mathcal{A}Ł^{-1}\mathcal{A} + \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]\right)^{-1}\left(\mathcal{A}^TŁ^{-1}\mathbf{d} + \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]\boldsymbol{u}_0\right).$$

由于假设 $\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]$ 可逆，因此利用 Sherman-Morrison-Woodbury 公式可将其改写为 $\boldsymbol{u}_2$ 的形式

$$\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}_0 + \left(\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]\right)^{-1}\mathcal{A}^T\left(Ł + \mathcal{A}\left(\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]\right)^{-1}\mathcal{A}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{d} - \mathcal{A}\boldsymbol{u}_0\right).$$

在进行样本均值近似之前，注意到

$$\left(\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right]\right)^{-1} = \left(\boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1} = \boldsymbol{\Gamma} = \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\omega}}}\left[\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\right].$$

然后，

$$\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u}^{\mathrm{RS}} = \boldsymbol{u}_0 + \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\omega}}}\left[\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\right]\mathcal{A}^T\left(Ł + \mathcal{A}\mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\omega}}}\left[\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\right]\mathcal{A}^T\right)^{-1}\left(\mathbf{d} - \mathcal{A}\boldsymbol{u}_0\right).$$

由于矩阵乘法和矩阵求逆都是连续函数，

$$\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{RS}} \overset{a.s.}{\to} \boldsymbol{u}^{\mathrm{RS}} = \boldsymbol{u}^*.$$

根据连续映射定理 [56, 定理 2.3]。 □

关键在于认识到，渐近地，从 $\pi_{\boldsymbol{\lambda}}$ 中抽样并使用形式 $\boldsymbol{u}_1$ (17a) 求解，与从 $\pi_{\boldsymbol{\omega}}$ 中抽样并使用形式 $\boldsymbol{u}_2$ (17b) 求解，得到的结果相同。然而，引理 13 并不意味着，对于有限的 N， $\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{RS}}$ 等价于从 $\pi_{\boldsymbol{\lambda}}$ 中抽样并使用形式 $\boldsymbol{u}_1$ 求解。事实上，当 $N < \dim(\boldsymbol{u})$ 时， $\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{RS}}$ 无法改写为形式 $\boldsymbol{u}_1$ ，因为

$$\operatorname{rank}\left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{\omega}^j\left(\boldsymbol{\omega}^j\right)^T\right) \leq N < \dim(\boldsymbol{u}).$$

这意味着，$\mathrm{E}_{\pi_{\boldsymbol{\omega}}}\left[\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{\omega}^T\right]$ 的样本均值不可逆，从而违背了引理 13 的一项假设，并表明 $\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{RS}}$不满足式 (2) 的最优性条件。这里， $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 可逆这一点至关重要；否则，$\boldsymbol{u}_1 \neq \boldsymbol{u}_2$ 以及本文讨论的随机化方案都不可能收敛到 $\boldsymbol{u}^*$。

如果除了采用右侧草图外，我们还用 (19) 对 (33) 中的$\mathbf{d}$ 和 $\boldsymbol{u}_0$ 进行随机化，并定义

$$\left(\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{ENKF}}\right)^i := \boldsymbol{u}_0^i + \left(\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{\omega}^j\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^j\right)^T\right)\left(Ł + \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^j\right)\left(\mathcal{A}\boldsymbol{\omega}^j\right)^T\right)^{-1}\left(\mathbf{d}^i - \mathcal{A}\boldsymbol{u}_0^i\right), \tag{34}$$

我们便重新得到了著名的集合卡尔曼滤波器（EnKF）单个集合成员的更新公式[57]。请注意，对于每个随机样本$\mathbf{d}^i$ 和 $\boldsymbol{u}_0^i$，从右侧对 $\mathcal{A}$ 进行的草图处理都是固定的。用集合卡尔曼滤波器的术语来说，所有集合成员的样本先验协方差矩阵都是固定的。

推论 14 （集合卡尔曼滤波器的渐近收敛）。 设

$$\boldsymbol{u}_{M,N}^{\mathrm{ENKF}} := \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M}\left(\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{ENKF}}\right)^i. \tag{35}$$

Then

$$\boldsymbol{u}_{M,N}^{\mathrm{ENKF}} \overset{a.s.}{\to} \boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}} \quad as \quad M, N \to \infty.$$

证明。 该结论可由定理 1、引理 13，以及推论 9 中使用的期望与积分交换立即得出。

□

与右侧草图一样，该结论仅在渐近意义下成立，并且对 N 特别敏感，因为要使 $\left(\boldsymbol{u}_N^{\mathrm{ENKF}}\right)^i$ 成为问题 (2) 的最优解，必须保证 N 足够大，从而确保所有涉及的矩阵均可逆。值得注意的是，集合卡尔曼滤波器通常作为迭代方法的一部分用于求解反问题，而不是直接使用 [33]。探究右侧草图（因而也包括集合卡尔曼滤波器）对先验协方差矩阵的作用，并从正则化的角度审视这一作用，便可理解其中的原因。

4.1.1 将左侧草图视为随机化正则化

再次考虑式 (17a) 中给出的形式 $\boldsymbol{u}_1$：

$$\boldsymbol{u}_1 = \left(\mathcal{A}^T Ł^{-1}\mathcal{A} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1}\left(\mathcal{A}^T Ł^{-1}\mathbf{d} + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\boldsymbol{u}_0\right).$$

尽管随机化先验 (31)、右侧草图 (33) 和集合卡尔曼滤波器 (34) 方法仍属于第 2.1 节针对线性逆问题所给出的渐近分析范畴，但由于 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 所发挥的正则化作用，会出现一个实践和理论上的问题。从确定性逆问题的角度来看，先验协方差的逆 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 可以视为正则化算子，而且确实等价于一种 Tikhonov 正则化策略 [58]。在确定性情形下，正则化通常用于“抑制”由 $\mathcal{A}$ 的快速衰减谱所引起的高度振荡模态——这些模态会受到噪声的严重污染。尽管渐近分析（见定理 1）证明了上述方法的收敛性，却无法解释为何这些方法在有限样本量 N 下可能失效。这正是非渐近分析大显身手之处。事实上，引理 6 表明，要获得较高的成功（误差较小）概率，需要相当多的样本。根据 [37], 的注 4.7.2，准确估计协方差矩阵所需的样本数与 n/β^2 成正比，其中 n 是矩阵的维数， β 是容差。从正则化的角度来看，这并不令人意外，因为样本协方差必须紧密逼近真实协方差，才能充分发挥其正则化项的作用。

作为一个具体例子，考虑 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1} = \alpha\mathcal{I}$with $\alpha > 0$ 的简单情形。令 $Ł^{-\frac{1}{2}}\mathcal{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^T$ 为白化的 PtO 映射的奇异值分解，则 $\boldsymbol{u}_1$ 的第一项可写为

$$\left(\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}^2\boldsymbol{V}^T + \boldsymbol{\Gamma}^{-1}\right)^{-1} = \left(\boldsymbol{V}\left(\boldsymbol{S}^2 + \alpha\mathcal{I}\right)\boldsymbol{V}^T\right)^{-1} = \boldsymbol{V}\mathbf{D}\boldsymbol{V}^T,$$

其中 $\mathbf{D}$ 是对角矩阵，其第 i 个对角元素为 $\mathbf{D}_{ii} = \frac{1}{\boldsymbol{s}_{ii}^2+\alpha^\circ}$ 与不进行正则化的情形相比，可以看出，先验协方差的逆将 $\mathcal{A}^T\text{Ł}^{-1}\mathcal{A}$ 的谱向上平移了常数 $\alpha_\circ$ 此外，在进行反演时，$\alpha > 0$ 确保 $\frac{1}{\boldsymbol{s}_{ii}^2+\alpha}$ 的分母不会过于接近 0，从而避免逆问题解在 $\boldsymbol{S}_{ii}^2 \to 0$ 时趋于无穷大。现在，考虑式 (31) 中提出的 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 的 RS U1 随机化——从 $\boldsymbol{u}_1$ 形式（从左侧对先验进行草图化）的角度来看，它与右侧草图所用的随机化相同：

$$\boldsymbol{\Gamma}^{-1} = \mathbb{E}_{\pi_{\boldsymbol{\lambda}}}\left[\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\lambda}^T\right] \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(\boldsymbol{\lambda}^i\right)\left(\boldsymbol{\lambda}^i\right)^T.$$

正如我们之前所见，这种随机化以 $N \to \infty$ 收敛，但样本平均近似（SAA）的收敛速率 $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ 众所周知地很慢。那么，这种缓慢收敛会如何影响正则化策略呢？显然，当 $N < \dim(\boldsymbol{u})$ 时，正则化不是满秩的；假设随机矩阵的列线性无关，则可能有 $\dim(\boldsymbol{u})$ 个 $-N\text{Ł}^{-1}\mathcal{A}$ 模态未经过正则化。即使在 $N \geq \dim(\boldsymbol{u})$ 的情况下，样本平均近似的缓慢收敛仍会导致某些模态正则化不足，从而产生振荡解；一维反卷积问题中的图 11d 和图 11e 展示了这一现象。在图 1a 中也可以清楚地看到这一点：图中针对不同的 N，绘出了样本平均逆协方差的谱与真实先验逆协方差的谱。

在图 1a 中，我们考虑 $\boldsymbol{\Gamma} = \mathcal{I}$ and $\dim(\boldsymbol{u}) = 1000$ 的情形。由于对先验的逆进行随机化

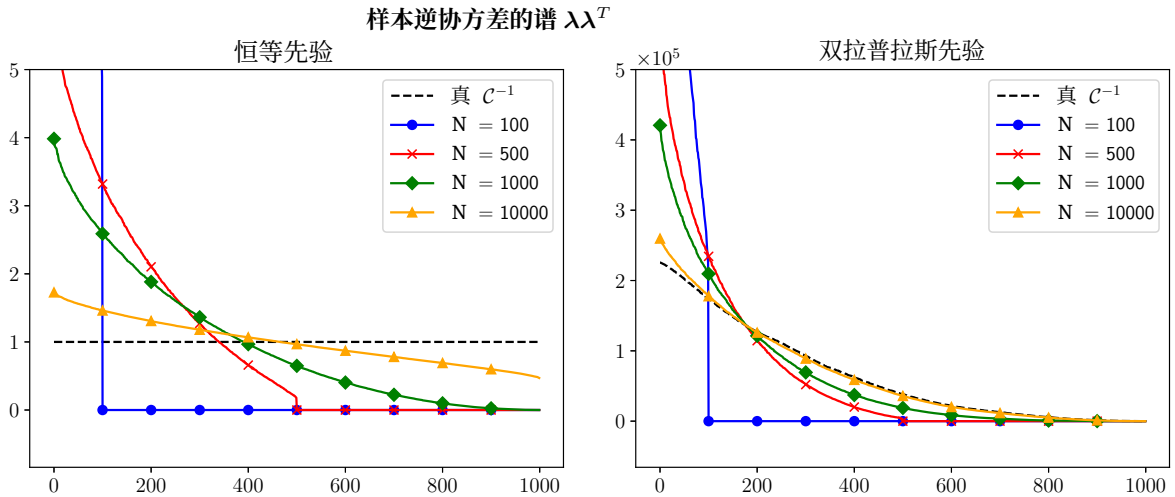


图 1：当 $\boldsymbol{\Gamma} = \mathcal{I} \in \mathrm{R}^{1000\times1000}$ (a) 且 $\boldsymbol{\Gamma}$ 为双拉普拉斯算子 (b) 时，先验逆协方差的样本均值近似的谱收敛情况。当 $N = 100$ 时，样本数量少于参数的维数，因此某些模态完全未经过正则化。即使样本数量多于参数的维数，也不能保证 SAA 收敛到可接受的程度。这表明，先验逆协方差的样本均值收敛到真实先验逆协方差的速度较慢。然而，当先验逆协方差的谱衰减时，只需较少的样本，样本均值近似就能更接近真实先验逆协方差。

协方差会导致正则化项表现不佳；对于恒等先验，至少在选择合理大小的 N 时，使用右侧草图或仅执行一步集合卡尔曼滤波得到的解会表现出高度振荡。在期望先验谱衰减的问题中，先验的随机化对逆问题解质量的影响较小。例如，第 5.3 节详述的对流扩散偏微分方程约束反问题采用双拉普拉斯先验时，右侧草图取得了良好结果。图 1b 展示了双拉普拉斯先验下样本均值谱与真实先验逆协方差谱的相似性。此外，对于PtO映射的谱缓慢衰减的问题（如X射线断层成像问题，第 5.2 节），对 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$的不准确近似可能也不那么敏感。

5 数值结果

本节展示多种反问题的数值结果，以说明各种方法的渐近收敛性。由于逐一列举所有可能的随机化变体会带来不必要的负担，我们将重点介绍几种关键方法：随机化失配方法（24）、随机化 MAP（21）、RMA 与 RMAP 的组合（29）、右侧草图（33）、集合卡尔曼滤波器（35），以及将所有内容都随机化的方法（10）（记为全部）。需要注意的是，我们并不主张采用或反对任何特定方法——本节旨在通过数值结果验证各种方法的渐近收敛性。此外，我们还讨论了不同方法在不同问题中的收敛行为差异。特别是，我们通过经验发现，随机化 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 的方法（如右侧草图、EnKF 和全部）总体表现很差；对于若干问题，要获得合适的结果，所需样本数远超问题维数。第 4.1.1 节已对此原因作了详细讨论。不过，正如理论结果所预测的那样，这些方法确实渐近收敛到最大后验解。

为了探究各种方法的性能和收敛性，我们考虑了若干具有不同特征的原型问题。采用缩放单位先验协方差的一维反卷积问题是一个相对简单的反问题，可直观地展示各种方法的收敛情况。X射线断层成像是一个轻度病态的二维成像问题，其观测数量少于参数数量。该问题仅为轻度病态这一特点，揭示了随机化背景下的一些有趣现象。我们还展示了在一个带孔区域上，采用基于偏微分方程的先验协方差的线性时变偏微分方程约束逆问题中，各种方法的收敛情况。最后，我们通过一个非线性椭圆型偏微分方程约束逆问题的示例，展示其收敛性。

对于集合卡尔曼滤波和 RMA+RMAP 等涉及多次随机化的问题，每个期望都可以用单独的样本均值近似。然而，探究为每个随机变量选择不同样本数量所产生的影响，超出了本文的讨论范围，而且只会掩盖本节旨在展示的渐近收敛性质。因此，所有方法均假设所有随机变量的随机样本数量相同。具体而言，我们在 (35) 中设定 $\boldsymbol{u}_{M\,,\,N}^{\mathrm{ENKF}} = \boldsymbol{u}_{N\,N\,,}^{\mathrm{ENKF}}$。此外，所给出的相对误差是相对于 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$ 而非真实解而言的，这强调了随机化导致的误差，而非其他因素造成的误差。这是因为本文所述理论展示的是向 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$ 收敛。

5.1 一维反卷积问题

反卷积是与卷积过程相关的反问题，在信号与图像处理领域有着广泛的应用 [59, 60, 61]。为作演示，我们考虑以下由一个 1-周期函数给出的一维反卷积问题：

$$f(x) = \sin(2\pi x) + \cos(2\pi x) \quad x \in [0, 1].$$

区域被划分为 $n = 1000$个子区间。核构造如下 [62]:

$$\Psi(x) = C_a \left(x + a\right)^2 \left(x - a\right)^2,$$

其中 $a = 0.235$，常数 C_a 的选取旨在满足归一化条件 [62]。合成观测中加入了 5% 的加性高斯噪声。我们选择使用 Achlioptas 分布进行随机化 [28, 63],，它是一个 $l-$百分比稀疏的随机变量示例，其 $l = 2/3$，且各项以相同概率取自 $\{-1, 0, 1\}$。不同随机化方法得到的重建函数如图 11 所示，相对误差列于表 1。由表 1 可见，右侧草图和集合卡尔曼滤波方法的结果最不准确。这是因为对先验协方差的逆进行随机化后，作为正则化项的效果较差，从数值上验证了第 4.1.1 节中的讨论。其他方法的表现都较为合理。尽管并非所有方法的表现都同样出色，但随着样本数量增加，所有方法都会收敛，这与我们的渐近收敛结果一致。

5.2 X射线断层成像

在 X 射线断层成像中，会从多个角度采集物体的 X 射线投影，而反问题是根据投影数据 [62] 重建物体的内部结构。我们考虑大小为 64×64 像素的标准 幻影图像，并在 $[0, \pi]$ 范围内均匀选取 45 个测量角度。在此测量角度数量下，PtO 映射的形状为 $64 \times 45 \times 64^2$，因此观测数量少于参数（像素）数量。

方法	相对误差（%）				
	N = 10	N = 100	N = 1000	N = 10000	N = 100000
RMAP	7.74	2.39	0.80	0.25	0.07
RMA	35.5	4.2	1.8	0.42	0.18
RMA+RMAP	41.7	9.0	1.7	0.80	0.15
RS	917	295	106	31.4	9.8
ENKF	896	352	100	31.9	9.7
ALL	158	33875	844	33.3	9.3

表 1：相对 误差：各种随机化方法与 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$ 一维反卷积解的比较 .

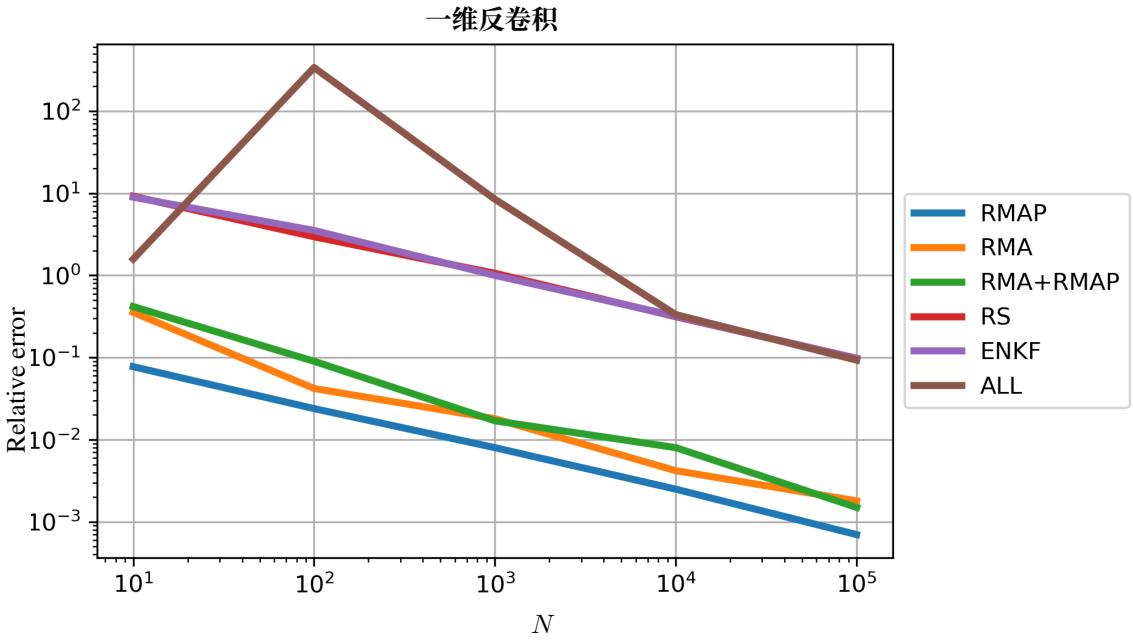


图 2：使用 Achlioptas 随机变量的一维反卷积问题相对误差图 .

再次考虑缩放单位先验协方差。测量值受到 1% 加性高斯噪声的污染。

方法	相对误差（%）				
	N = 10	N = 100	N = 1000	N = 10000	N = 50000
RMAP	6.44	6.44	6.44	6.44	0.04
RMA	94.17	74.95	39.42	31.07	4.02
RMA+RMAP	96.64	77.94	40.35	30.89	4.02
RS	191.87	373.07	176.02	51.87	22.43
ENKF	324.27	352.58	178.58	52.25	21.97
ALL	95.12	71.30	80.50	60.36	23.60

表2：X射线断层成像问题中，各种随机化方法相对于 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$ 解的相对误差。

结果如图12所示，表2展示了不同方法的相对误差。这里有两点值得注意。首先，结果表明所有方法都渐近收敛，不过与先前的问题相比，RMA和RMA+RMAP的收敛速度明显更慢。这是因为X射线断层成像只是一个轻度病态逆问题，PtO映射的谱在初始快速衰减后衰减缓慢（图4）。这意味着在所展示的情形下，PtO映射的有效秩接近数据维数。虽然轻度病态问题通常更容易处理，但这可能会给随机化方法带来挑战，尤其是像RMA这样对失配项进行随机化的方法。回想一下，对于任意两个矩阵 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Y}$，$\text{rank}(\boldsymbol{XY}) \leq \text{rank}(\boldsymbol{X})$。通过

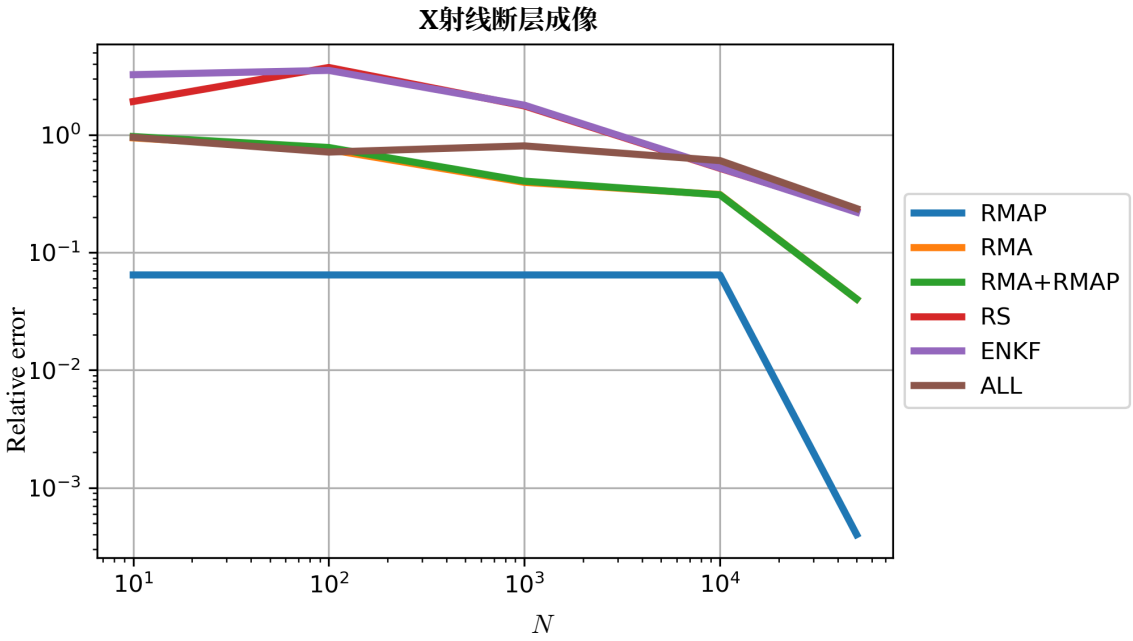


图3：X射线断层成像问题的相对误差图。

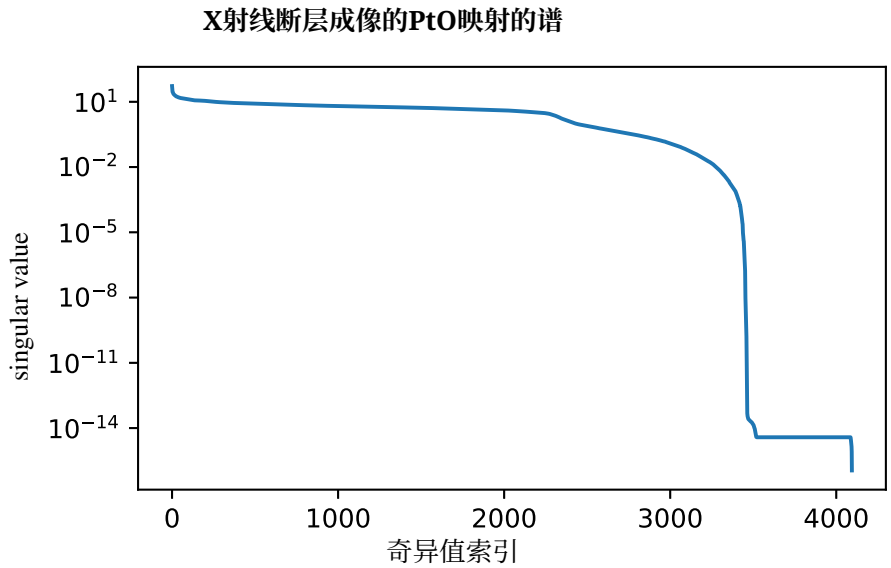


图 4：X射线断层成像问题中参数到观测量映射的奇异值起初快速衰减，随后缓慢衰减，直至最后几个奇异向量。这表明 PtO映射的有效秩接近最小维数。

将失配项投影到较低维的子空间上，在 $\mathcal{A}$ 的有效秩接近数据维数的情况下，重要信息会丢失。这表明这类方法更适用于严重不适定的问题。

第二个观察结果是，随着样本数量增加，随机先验方法的误差先增大后减小。在之前的问题中，我们使用直接线性求解器来求解随机优化问题。在这个问题中，我们使用迭代共轭梯度（CG）求解器，以展示求解器的选择如何与随机化方法相互作用。这里可以看到，直接求解器与 CG 这类迭代求解器的主要区别在于：直接求解器会对病态矩阵中可能很小的特征值求逆，而迭代求解器通常会根据设定的收敛参数提前停止，从而起到一种

迭代正则化器 [64, 65, 66] 的作用。这种效应在 RS 和集合卡尔曼滤波等随机先验方法中尤为明显，因为低秩随机先验会使迭代求解器在样本较少时就提前停止。这导致 RS 和集合卡尔曼滤波的误差起初增大，直到正则化达到足够的秩，随后这些方法渐近收敛到 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$。对于 X 射线断层成像，由于问题的病态程度较轻，并不需要全秩正则化。

5.3 对流扩散方程中的初始条件反演

现在，我们考虑一个由抛物型偏微分方程支配的线性逆问题，该问题基于 [67] 中使用的方法。参数到观测的映射（对流扩散方程）将初始条件 $\boldsymbol{u} \in L^2(\Omega)$ 映射为浓度场 $\mathbf{y}(x,\ t)$ 的时空点观测。对流扩散方程如下：

$$\begin{aligned} \mathbf{y}_t - \kappa\Delta\mathbf{y} + \vec{v}\cdot\nabla\mathbf{y} = 0 \quad &\text{in } \Omega\times(0,T), \\ \mathbf{y}(.,0) = \boldsymbol{u} \quad &\text{in } \Omega, \\ \kappa\nabla\mathbf{y}\cdot\mathbf{n} = 0 \quad &\text{on } \partial\Omega\times(0,T), \end{aligned} \tag{36}$$

其中，$\Omega \subset \mathrm{R}^2$ 是一个有界区域，$\kappa > 0$ 是扩散系数，$T > 0$ 是终止时间。速度场 $\vec{v}$ 通过求解以下稳态纳维-斯托克斯方程计算，其中侧壁驱动流动：

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta\vec{v} + \nabla q + \vec{v}\cdot\nabla\vec{v} = 0 \quad &\text{in } \Omega, \\ \nabla\cdot\vec{v} = 0 \quad &\text{in } \Omega, \\ \vec{v} = \vec{g} \quad &\text{on } \partial\Omega. \end{aligned} \tag{37}$$

其中，q 是压力，Re 是雷诺数。狄利克雷边界条件 $\vec{g} \in \mathrm{R}^2$ 规定为 $\vec{g} = [0,1]$（位于区域左侧），其他位置则为 $\vec{g} = [0,0]$。边界右侧未规定速度边界条件。在终止时间 T，提取正问题解 $\mathbf{y}$ 在一组位置 $\{x_1, x_2, ..., x_m\}$ 处的值，并将其用作求解初始条件反演的观测向量 $\mathbf{d} \in \mathrm{R}^k$。通过向该观测向量添加 1% 的加性高斯噪声，生成合成观测。研究中使用的观测数据和速度剖面如图 5 所示。离散化后，算子 $\mathcal{A}$ 将初始条件 $\boldsymbol{u} \in \mathrm{R}^n$ 映射为观测 $\mathbf{d} \in \mathrm{R}^k$。

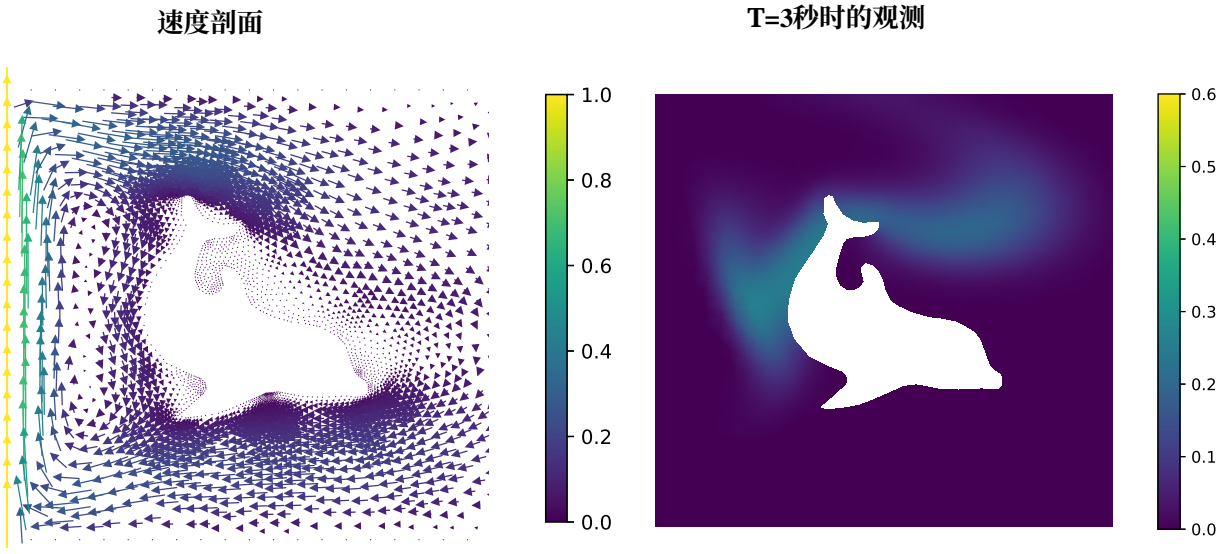


图 5：用于反演的速度剖面和观测数据

In a此外，我们将先验协方差矩阵定义为基于偏微分方程的双拉普拉斯先验，其定义为 s:

$$\boldsymbol{\Gamma} = (\delta I + \gamma\nabla\cdot(\theta\nabla))^{-2}, \tag{38}$$

其中， δ 控制样本的方差，而比值 $\frac{\gamma}{\delta}$ 控制相关长度。 θ 是一个对称正定张量，用于在相关长度中引入各向异性。

接下来，采用一种混合形式，使用 $P2$ 拉格朗日单元近似速度场，并使用 $P1$单元近似压力，以求解 (37) 并获得速度场。随后使用计算得到的速度场求解对流扩散方程 (36)。对流扩散方程的变分形式采用 $P1$ 拉格朗日单元。

观测向量 $\mathbf{d}$ 在时间 $t = 3s$ 通过 $m = 200$ 个观测点计算得到。对于该问题，共有$n = 2868$ 个自由度。扩散系数为 $\kappa = 0.001$ ，双拉普拉斯先验 (38) 的参数为 $\delta = 8$、 $\gamma = 1$ 和 $\Theta = \mathcal{I}$。

方法	相对误差 (%)			
	N = 10	N = 100	N = 1000	N = 10000
RMAP	5.02	1.96	0.49	0.15
RMA	53.38	15.16	5.30	1.15
RMA+RMAP	80.14	14.48	7.05	1.30
RS	59.58	26.78	7.33	5.06
ENKF	74.09	18.76	7.10	5.43
ALL	91.58	197.66	193.25	9.66

表 3：二维线性对流-扩散初始条件反问题中，各种随机化方法相对于 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$ 解的相对误差。

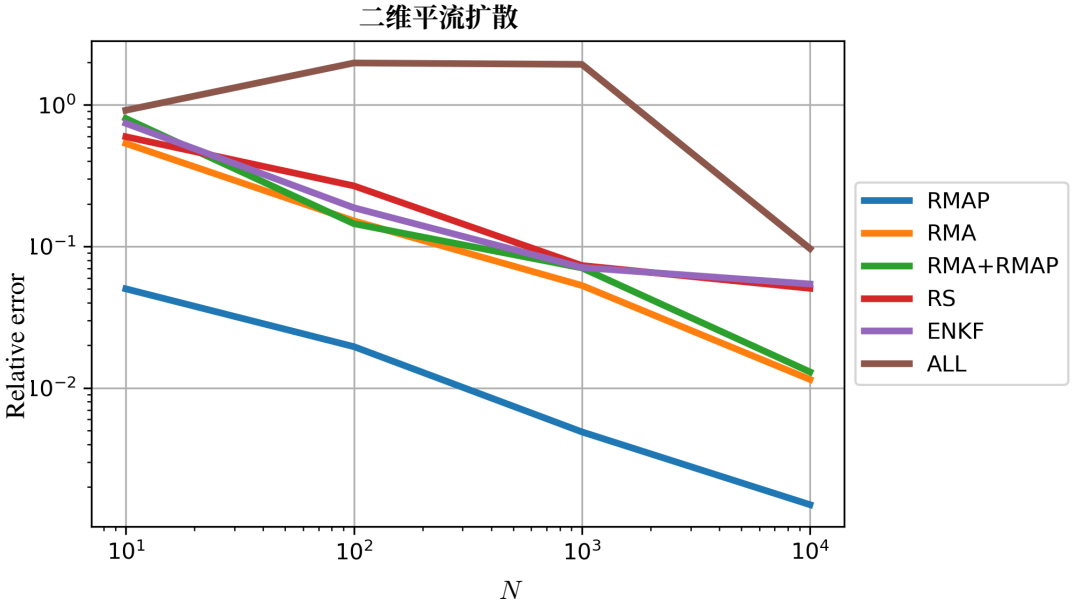


图 6：二维线性平流扩散初始条件反演的相对误差图。

最大后验解 $\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$ 如图 7 所示。 $\boldsymbol{\Gamma}^{-1}$ 的条件数约为 10^6。不同随机化方案的结果见附录中的图 13。表 3 给出了相对于$\boldsymbol{u}^{\text{MAP}}$的相对误差。正如预期，随机化 MAP 的结果最准确，其次是左侧草图和随机化失配方法。与之前考虑的示例不同，右侧草图和集合卡尔曼滤波方法也取得了相当不错的结果，这一点从表 3 和附录中的图 13 可以看出。

这是因为对于双拉普拉斯先验，随机化先验协方差比真实先验协方差收敛得更快。这也说明，为特定问题选择随机化方法时应谨慎。对于适合采用具有衰减谱的先验的反问题，集合卡尔曼滤波或右草图方法可能表现良好。

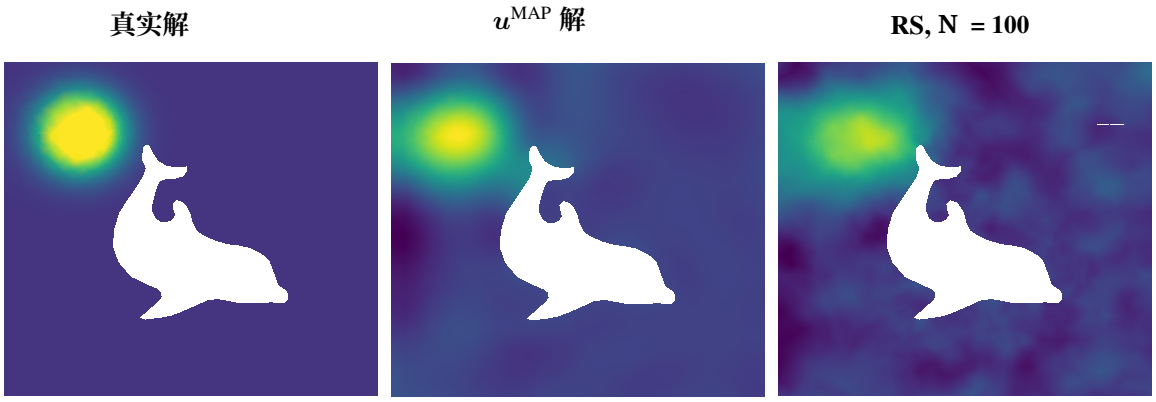


图 7：从左到右依次为线性对流-扩散初始条件反问题的真实解、u^{MAP} 解和右侧草图解。仅使用 100 个随机样本，右侧草图方法便能获得相当不错的初始条件重建结果（相对误差为 26%）。这一现象表明，随机采样先验逆协方差能够快速收敛到真实先验逆协方差。

5.4 稳态热方程中的非线性参数反演

为展示各种方法在非线性反问题中的收敛性，我们考虑一个非线性偏微分方程约束参数反演问题。在上一节中，我们考虑了一个初始条件问题，其中数据与参数呈线性关系，尽管问题本身的表述相当复杂。现在，我们考虑一个表述简单但极度病态的非线性反问题。给定稳态温度分布 $\boldsymbol{T}(x,\ y)$ 和边界条件，反演区域内各处的热导率。控制方程如下：

$$\begin{aligned}\nabla\cdot(e^{\kappa}\nabla\boldsymbol{T}) &= f \quad \text{in } \Omega,\\ \boldsymbol{T}(x,0) &= 2(1-x),\\ \boldsymbol{T}(x,1) &= 2x,\\ \nabla\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{n} &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega\setminus\{y=0, y=1\}.\end{aligned}$$

虽然该方程关于温度分布 $\boldsymbol{T}$是线性的，但我们要反演的（对数）热导率 κ则以非线性形式出现。也就是说，参数到观测量映射是非线性的。热方程非常适合作为反问题求解器的测试问题，因为稳态温度分布对热导率的依赖相当弱。

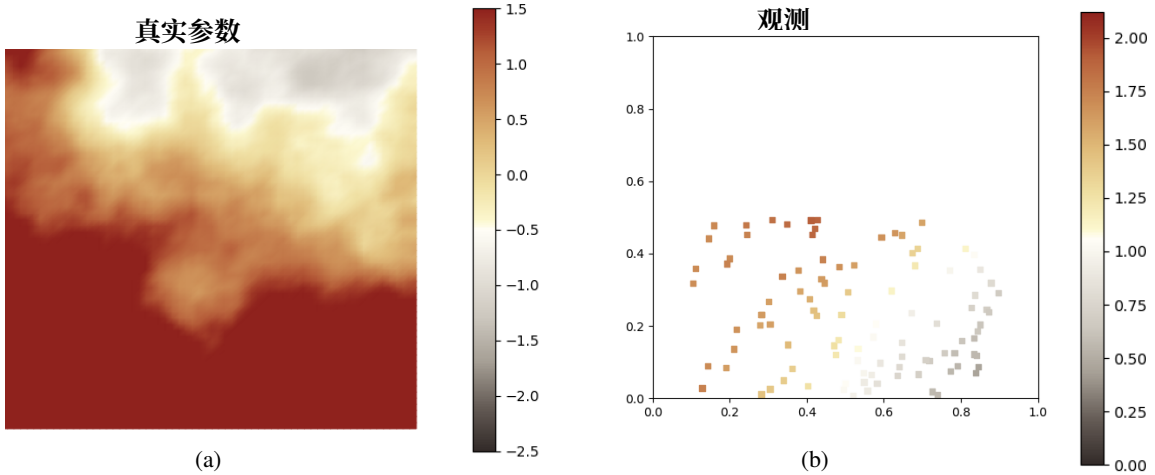


图8：真实对数电导率（κ）和100个稀疏观测。仅观测区域下半部分的温度分布，会使整个区域的对数电导率反演变得更加困难。

我们再次采用混合形式，其中温度分布用 $P2$ 拉格朗日单元表示，参数用 $P1$ 拉格朗日单元表示。网格尺寸为 64×64 个单元时，得到离散变量 $\boldsymbol{y} \in \mathrm{R}^{16,641}$ 和 $\kappa \in \mathrm{R}^{4,225}$。这里也采用式（38）中定义的双拉普拉斯先验，其中 $\delta = 0.5$、$\gamma = 0.1$，以及各向异性扩散张量

$$\theta = \begin{bmatrix} \theta_1 \sin^2 \alpha & (\theta_1 - \theta_2) \sin \alpha \cos \alpha \\ (\theta_1 - \theta_2) \sin \alpha \cos \alpha & \theta_2 \cos^2 \alpha \end{bmatrix},$$

其中 $\theta_1 = 2.0$、$\theta_2 = 0.5$ 和 $\alpha = \pi/4$。最后，我们考虑一个非齐次情形，其中

$$f = 50 \sin^2 (\pi x) \cos^2 (\pi y) .$$

方法	相对误差（%）			
	N = 10	N = 100	N = 1000	N = 5000
RMAP	19.50	14.66	16.39	16.17
RMA	24.97	8.12	4.19	3.08
RMA+RMAP	17.51	17.82	16.27	16.49
RS	47.06	110.88	107.46	14.44
ENKF	20.82	18.26	17.54	19.55
ALL	26.13	15.63	19.45	19.62

表4：相　对于不同随机化方案，最大后验解相对于 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$ 解的相对误差　　n.

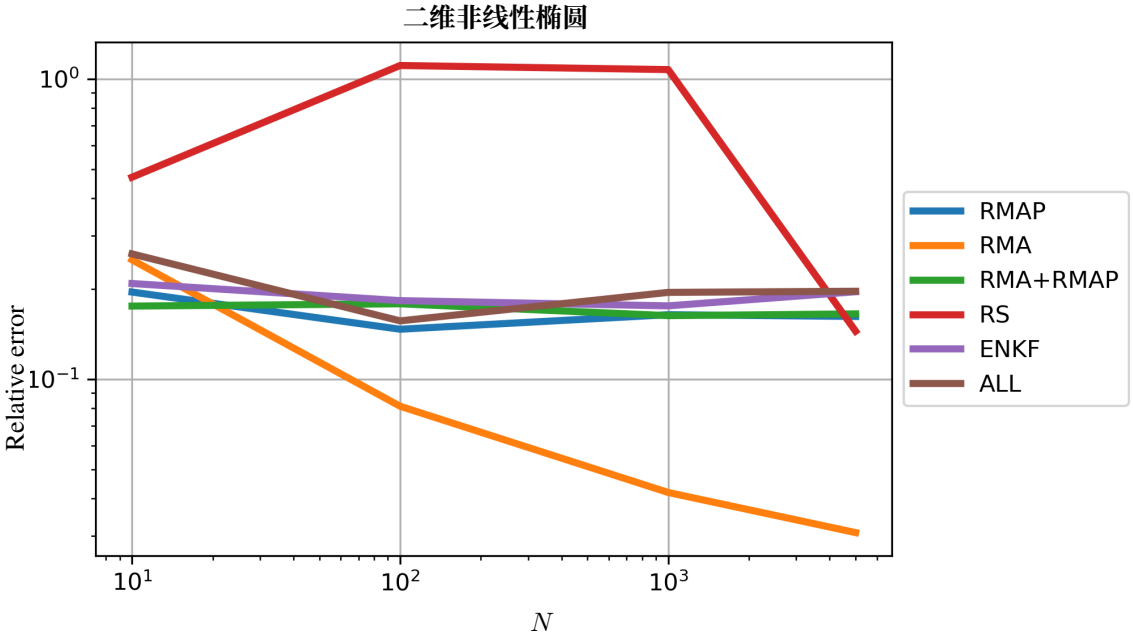


图9：非线性椭圆参数反问题的相对误差图。

为了理解表4中不太令人满意的结果，有几点需要说明。首先，请记住，这里展示的结果针对的是一个极其困难的问题。扩散方程的反问题众所周知是不适定的，因为它相当于对一个紧算子求逆。也就是说，数据中的微小扰动可能导致截然不同的反演结果。事实上，我们展示了一个更加困难的问题：仅凭100个测量值推断4,225个参数，而这些测量值仅在区域的一半范围内采集，如图8所示。测量值如此之少，在数据中加入噪声（如 RMAP、RMA+RMAP、ENKF 和 ALL 所做的那样），可能无法得到理想的结果。

其次，尽管这些方法仍存在 ∼20% 的误差，但如图10所示，这些方法得到的最大后验估计在视觉上仍相当不错。较高的相对误差部分是由于 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$ 解的范数较小。仅将参数整体加上一个常数，就会改变相对误差公式中分母的范数

$$\text{relative error} := \left\| \boldsymbol{u}_N^{\langle method \rangle} - \boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}} \right\| / \left\| \boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}} \right\| .$$

除了数值相对误差之外，还应考虑“目测范数”。图10显示，估计解仍与 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$ 解相当接近，尤其考虑到问题极端的不适定性。尽管数据随机化方法存在这一不足，但请记住，对数据和先验均值进行加性随机化的主要优势在于有助于从后验分布中采样 。换言之，我们最关注的是加速不确定性量化，而不是将样本均值近似最大后验估计的误差降至机器精度。这些随机化方案在此类应用中仍可能派上用场。

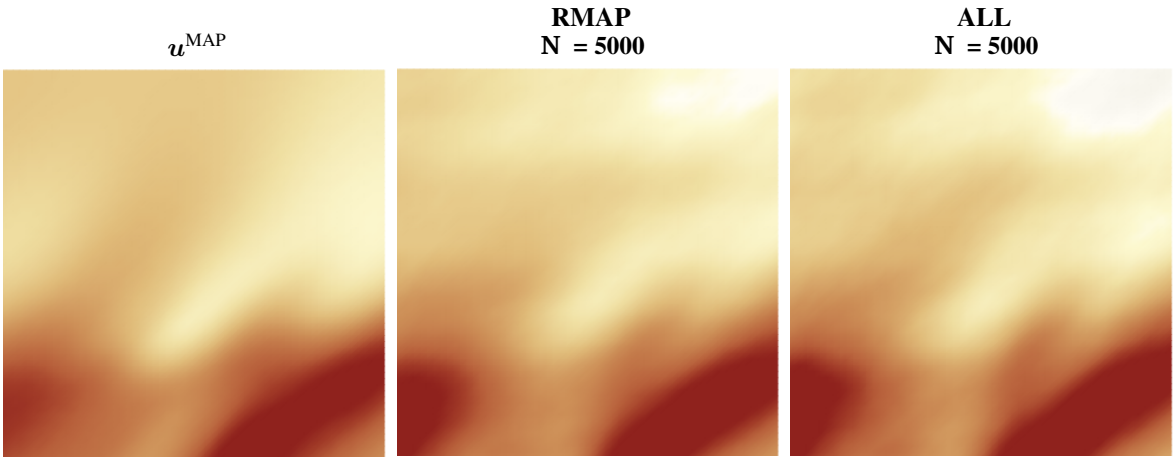


图10：两种不同方法求解非线性扩散逆问题的结果。视觉上，这些方法得出的结果与 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{MAP}}$ 解几乎相同，尽管从数值上看，它们的相对误差为 ∼20%。

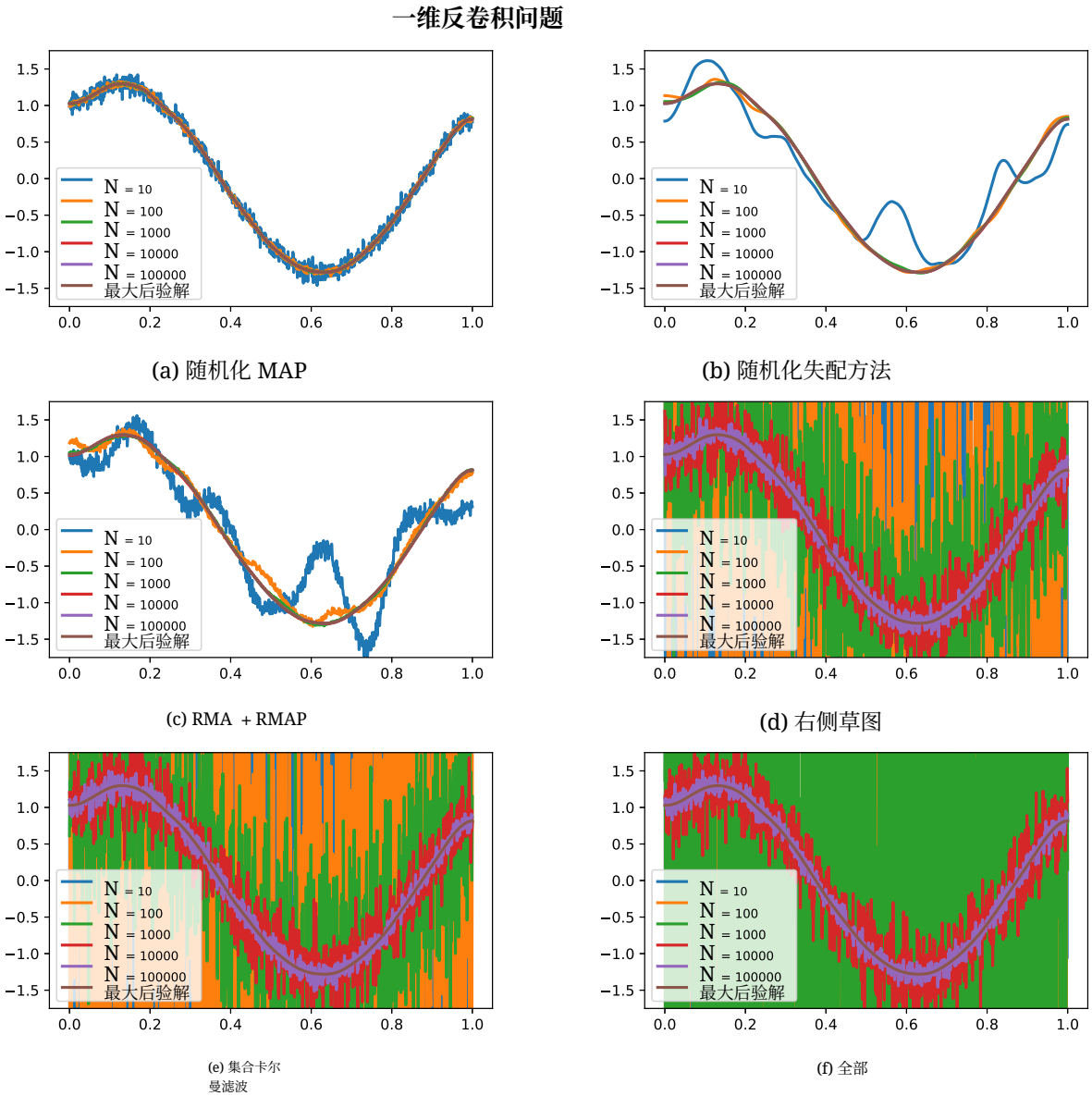
6 结论

通过从随机规划和样本均值近似的视角审视逆问题的随机化求解，我们建立了一个统一框架，以分析线性逆问题的随机化解渐近收敛到其确定性对应问题所得解的过程。借助该框架，我们证明了一般随机代价函数的极小化解渐近且非渐近地收敛到该随机代价函数期望值的极小化解。若干用于在线性和非线性逆问题中引入随机性的知名方法，都可作为这一一般框架的特例得到。通过样本均值近似的视角审视随机化逆问题的求解，也使我们得以证明一种新的非渐近误差分析方法，该方法适用于本文讨论的所有随机化方法。我们还表明，尽管本文介绍的所有方法都渐近收敛，但若抽取的样本数量不足，结果可能相当不理想。通过我们的非渐近误差分析，很容易理解这一现象；但从渐近的角度则无法得出这一结论。具体而言，我们证明，由于先验在逆问题求解中发挥正则化作用，对某些先验而言，随机化先验协方差矩阵可能并非明智之举。这是因为随机矩阵收敛到其期望值的速度可能较慢，具体取决于期望值矩阵的谱。我们通过数值实验展示了所有方案的收敛性，涵盖多种线性和非线性逆问题，包括由代数约束和偏微分方程约束所支配的一维和二维问题。

7 致谢

我们谨此感谢德克萨斯大学奥斯汀分校的德克萨斯高级计算中心（TACC）提供高性能计算资源，为本文所展示的研究结果做出了贡献。网址：http://www.tacc.utexas.edu

A 图



(a) 随机化 MAP

(b) 随机化失配方法

(c) RMA + RMAP

(d) 右侧草图

(e) 集合卡尔曼滤波

(f) 全部

图 11：使用网格尺寸为 $n = 1000$ 的缩放单位先验和各种随机化方案求解一维反卷积问题。对于不对先验协方差进行随机化的随机化方案（RMAP、RMA、RMA+RMAP），该先验表现良好；但对于会对先验协方差进行随机化的 RS、集合卡尔曼滤波和全部方案，其表现较差。随机抽样通过 Achlioptas（2/3–稀疏）随机变量完成

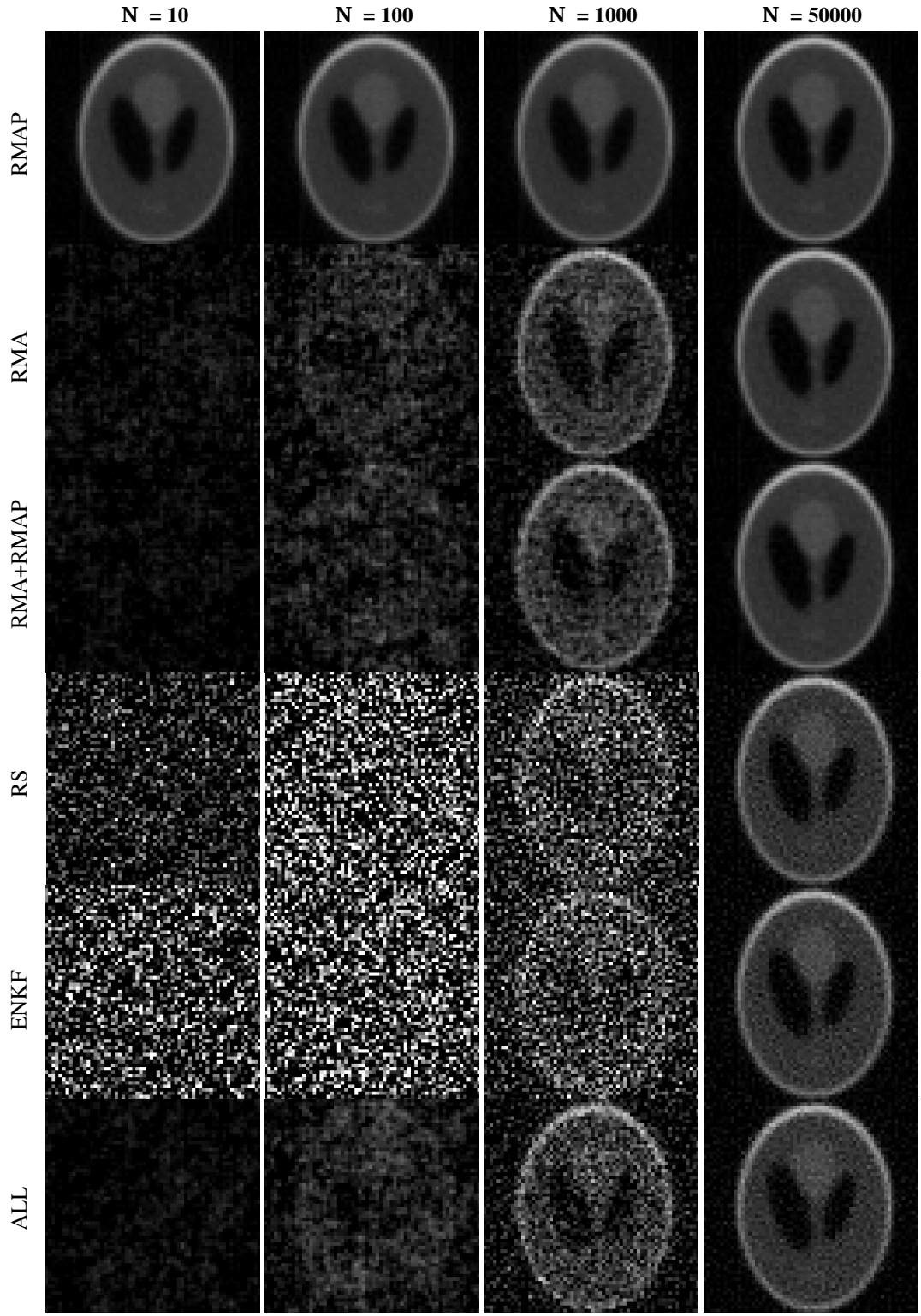


图12：对于采用高斯随机变量的X射线断层成像问题，各种随机化方法得到的解。

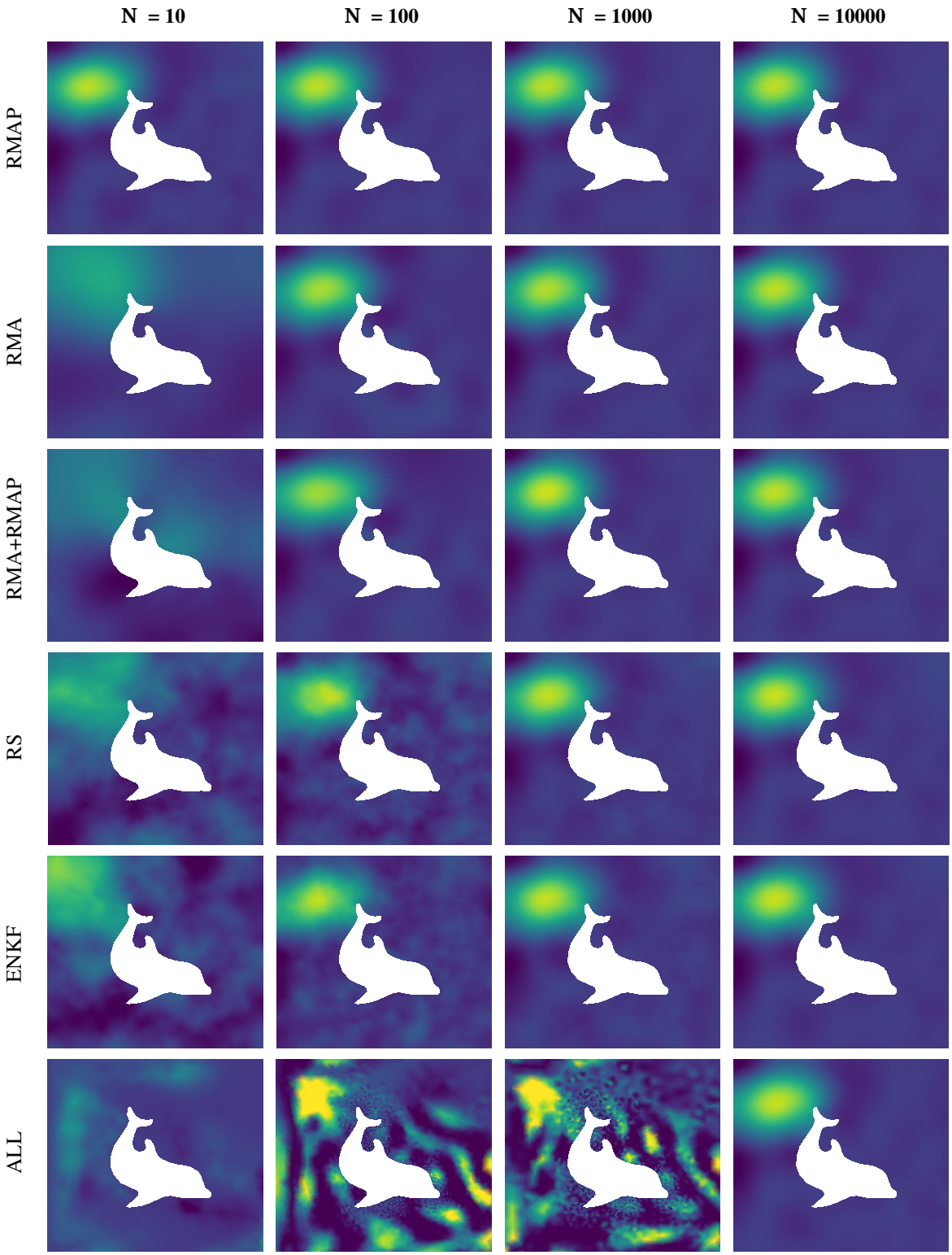


图 13：采用高斯随机变量时，线性对流-扩散初始条件反问题在各种随机化方法下的解。

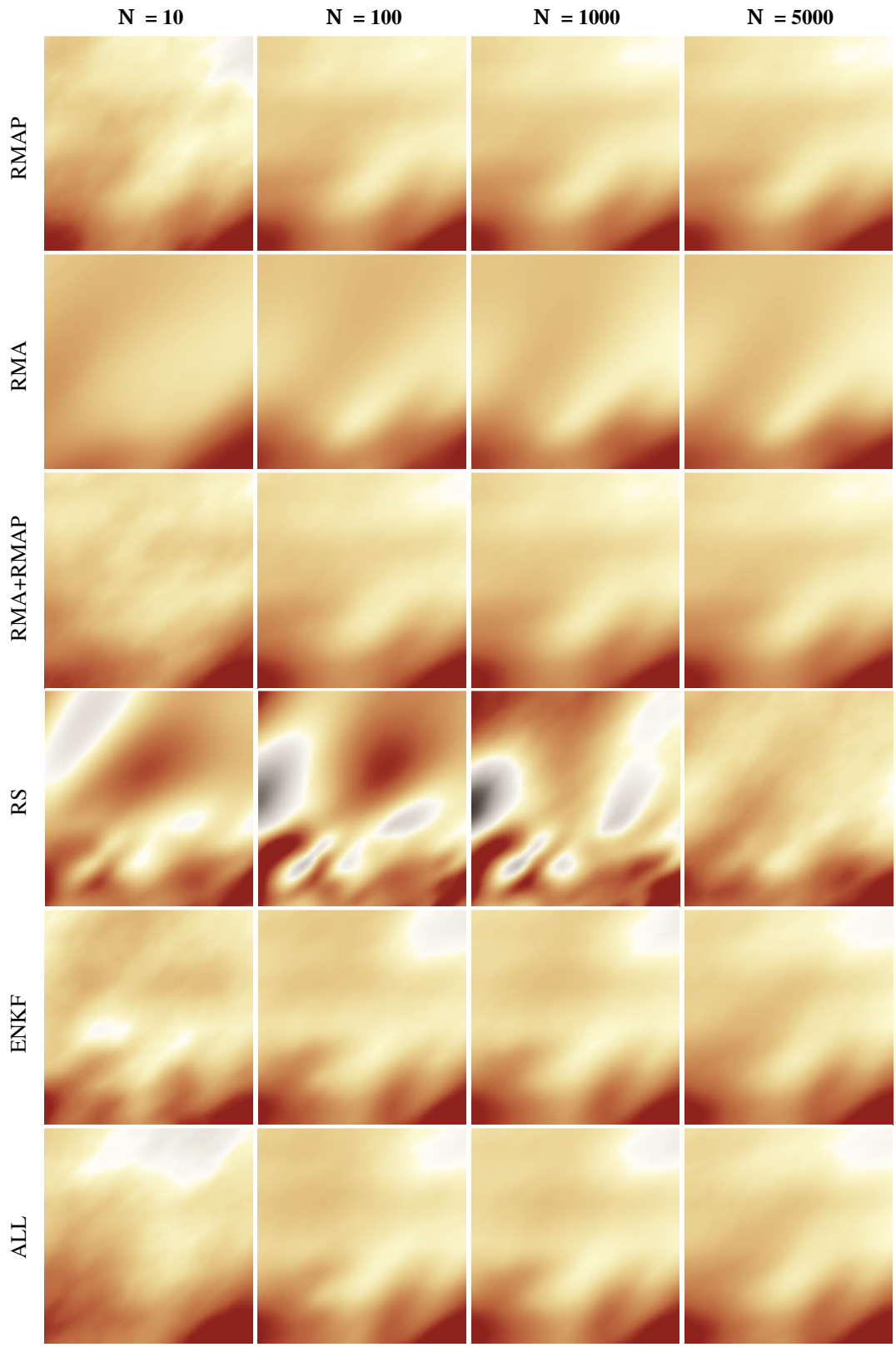


图 14：采用高斯随机变量的非线性扩散参数反演问题的各种随机化方法的解。

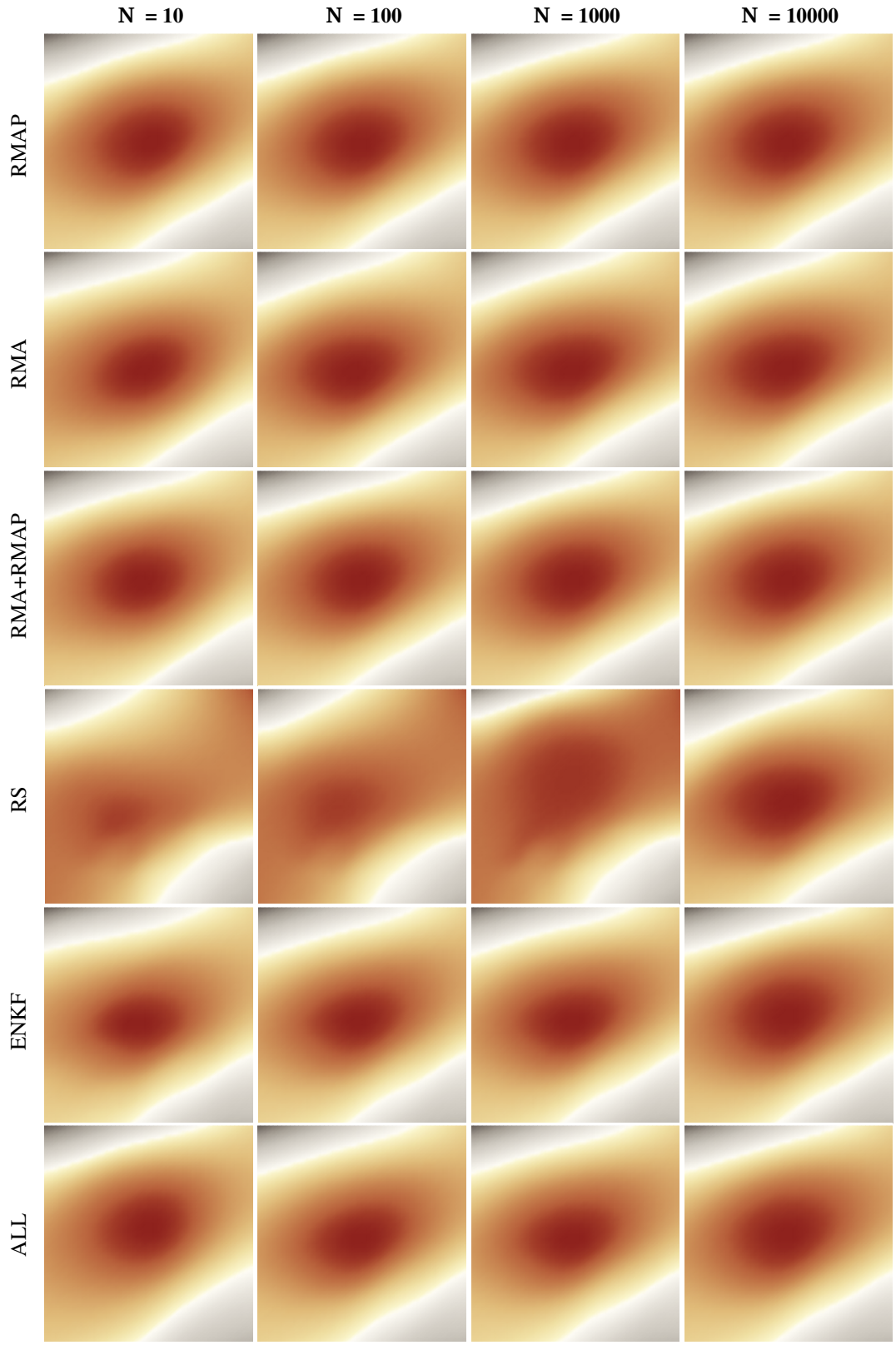


图15：非线性扩散问题中采用不同随机化方法得到的重建状态。即使对于右侧草图方法（在样本数达到 $N = 10000$ 之前，该方法的参数重建效果并不理想），区域下半部分（即采集100个测量值的区域）中的状态看起来也与其他所有方法相似。

参考文献

[1] Metropolis N, Rosenbluth AW, Rosenbluth MN, Teller AH, Teller E. 快速计算机的状态方程计算。《化学物理学杂志》。1953；21(6)：1087–1092。可查阅：http://dx. doi.org/10.1063/1.1699114。[2] Hastings WK. 使用马尔可夫链的蒙特卡罗抽样方法及其应用。《生物计量学》。1970；57(1)：97–109。[3] Haario H, Laine M, Miravete A, Saksman E. 延迟拒绝自适应Metropolis算法：高效的自适应马尔可夫链蒙特卡罗。《统计与计算》。2006；16：339–354。[4] Robert CP, Casella G.《蒙特卡罗统计方法》（施普林格统计学丛书）。美国新泽西州锡考克斯：施普林格纽约出版社；2005。[5] Wang K. 面向大规模统计逆问题的并行马尔可夫链蒙特卡罗方法 [博士论文]。德克萨斯农工大学；2014。[6] Byrd J. 并行马尔可夫链蒙特卡罗 [博士论文]。华威大学；2010。[7] Wilkinson DJ. 并行贝叶斯计算。载于：Kontoghiorghes EJ，编。并行计算与统计学手册。Marcel Dekker/CRC出版社；2005。第481–512页。[8] Brockwell A. 通过预取实现并行马尔可夫链蒙特卡罗模拟。《计算与图形统计学杂志》。2006；15(1)：246–261。[9] Strid I. 使用预取方法高效并行化Metropolis–Hastings算法。《计算统计学与数据分析》。2010；54(11)：2814–2835。[10] Duane S, Kennedy AD, Pendleton B, Roweth D. 混合蒙特卡罗。《物理快报B辑》。1987；195：216–222。[11] Neal RM. 使用哈密顿动力学的马尔可夫链蒙特卡罗。载于：Brooks S, Gelman A, Jones G, Meng XL，编。《马尔可夫链蒙特卡罗手册》。Chapman & Hall / CRC出版社；2010。.[12] Girolami M, Calderhead B. 黎曼流形朗之万方法与哈密顿蒙特卡罗方法。《英国皇家统计学会杂志：B辑（统计方法学）》。2011；73(2)：123–214。可查阅：http: // dx.doi.org/10.1111/j.1467-9868.2010.00765.x。[13] Beskos A, Pinski FJ, Sanz-Serna JM, Stuart AM. 希尔伯特空间上的混合蒙特卡罗。《随机过程及其应用》。2011；121：2201–2230。[14] Bui-Thanh T, Girolami MA. 使用黎曼流形哈密顿蒙特卡罗求解大规模偏微分方程约束贝叶斯逆问题。《逆问题》。2014；特刊：114014。[15] Cui T, Martin J, Marzouk YM, Solonen A, Spantini A. 非线性反问题的似然信息引导降维。arXiv预印本 arXiv:14034680。2014；.[16] Cui T, Law KJ, Marzouk YM. 维数无关的似然信息引导马尔可夫链蒙特卡罗。《计算物理学杂志》。2016；304：109–137。[17] Martin J, Wilcox LC, Burstedde C, Ghattas O. 用于大规模统计逆问题的随机牛顿马尔可夫链蒙特卡罗方法及其在地震反演中的应用。《工业与应用数学学会科学计算杂志》。2012；34(3)：A1460–A1487。[18] Bui-Thanh T, Ghattas O. 用于马尔可夫链蒙特卡罗模拟的缩放随机牛顿算法。已投稿至《工业与应用数学学会不确定性量化杂志》。2012；.[19] Petra N, Martin J, Stadler G, Ghattas O. 无限维贝叶斯逆问题的计算框架：第二部分。随机牛顿马尔可夫链蒙特卡罗及其在冰盖逆问题中的应用。《工业与应用数学学会科学计算杂志》（即将出版）。2014；[20] Liu Q, Wang D. Stein变分梯度下降：一种通用的贝叶斯推断算法。《神经信息处理系统进展》。2016；29。[21] Han J, Liu Q. 无梯度Stein变分梯度下降。载于：国际机器学习会议。机器学习研究论文集；2018。第1900–1908页。[22] Chen P, Ghattas O. 投影Stein变分梯度下降。《神经信息处理系统进展》。2020；33：1947–1958。[23] Zhuo J, Liu C, Shi J, Zhu J, Chen N, Zhang B. 消息传递Stein变分梯度下降。载于：国际机器学习会议。机器学习研究论文集；2018。第6018–6027页。

[24] Carpenter J, Clifford P, Fearnhead P. 用于非线性问题的改进粒子滤波器。IEE《雷达、声纳与导航学报》。1999；146(1)：2–7。[25] Van Der Merwe R, Doucet A, De Freitas N, Wan E. 无迹粒子滤波器。《神经信息处理系统进展》。2000；13。[26]Yang T, Mehta PG, Meyn SP. 反馈粒子滤波器。IEEE《自动控制汇刊》。2013；58(10)：2465–2480。[27] Soto A. 自适应粒子滤波器。载于：IJCAI。Citeseer；2005。第1398–1406页。[28] Le EB, Myers A, Bui-Thanh T, Nguyen QP. 用于求解大规模偏微分方程约束逆问题的数据可扩展随机化失配方法。《逆问题》。2017；33(6)：065003。Https://arxiv.org/pdf/1603.01562.pdf。[29] Wang K, Bui-Thanh T, Ghattas O. 一种用于高维非线性贝叶斯逆问题后验采样的随机最大后验方法。《工业与应用数学学会科学计算杂志》，已接收。2018；Https://arxiv.org/pdf/1602.03658.pdf。[30] Chen K, Li Q, Newton K, Wright SJ. 面向偏微分方程逆问题的结构化随机草图方法。《工业与应用数学学会矩阵分析与应用杂志》。2020；41。[31] Avron H, Sindhwani V, Woodruff D. 通过草图化结构化矩阵加速非线性回归。《神经信息处理系统进展》。2013；26。[32] Wang J, Lee J, Mahdavi M, Kolar M, Srebro N. 草图方法与对偶空间中的随机投影相结合：一种具有可证明保证、适用于大规模高维数据的恢复算法。载于：人工智能与统计学。机器学习研究论文集；2017。第1150–1158页。[33] Iglesias MA, Law KJ, Stuart AM. 用于反问题的集合卡尔曼方法。《逆问题》。2013；29(4)：045001。[34] Shapiro A, Dentcheva D, Ruszczynski A.《随机规划讲义：建模与理论》。工业与应用数学学会；2009。[35] Feller W.《概率论及其应用导论》。第2卷。第2版。John Wiley & Sons；1971。[36] Durrett R.《概率论：理论与例题》。剑桥统计与概率数学丛书。剑桥大学出版社；2019。[37] Vershynin R.《高维概率：数据科学中的导论与应用》。剑桥统计与概率数学丛书。剑桥大学出版社；2018。[38] Trefethen LN, Bau III D. 数值线性代数。第50卷。工业与应用数学学会；1997。[39] Gao X, Zhang M, Luo J. 高斯随机矩阵范数的尾界及其应用。《数学杂志》。2022；2022。[40]Sambale H. 关于次指数随机变量 α集中性的一些注记。arXiv预印本 arXiv:200210761。2020；.[41] Vladimirova M, Girard S, Nguyen H, Arbel J. 次 Weibull 分布：将次高斯和次指数性质推广到重尾分布。《统计学》。2020；9(1)：e318。[42] Zhang H, Wei H. 更精确的次威布尔集中界。《数学》。2022；10(13)：2252。[43](https://math stackexchange com/users/3776/j j) JJ. 三个变量的杨不等式；网址：https://math.stackexchange.com/q/406922（版本：2013-05-30）。Mathematics Stack Exchange。可查阅：https://math.stackexchange.com/q/406922。[44] Latz J. 贝叶斯逆问题的适定性。《工业与应用数学学会/美国统计学会不确定性量化杂志》。2020；8(1)：451–482。[45] Diao HA, Wei Y, Qiao S. 结构化Tikhonov正则化问题的结构化条件数及其估计。《计算与应用数学杂志》。2016；308：276–300。[46] Chu D, Lin L, Tan RC, Wei Y. 离散不适定问题Tikhonov正则化的条件数与扰动分析。《数值线性代数及其应用》。2011；18(1)：87–103。[47] Deng CY. Sherman–Morrison–Woodbury 公式的推广。《应用数学快报》。2011；24(9)：1561–1564。[48] Rockafellar RT, Wetts RJB.《变分分析》。柏林、海德堡、纽约：施普林格出版社；1998。[49] Kitanidis PK. 用于反演的准线性地质统计理论。《水资源研究》。1995；31(10)：2411–2419。

[50] Oliver DS, Reynolds AC, Liu N. 石油储层表征与历史拟合的反演理论。剑桥大学出版社；2008。[51] Bardsley J, Solonen A, Haario H, Laine M. 先随机化后优化：一种从非线性反问题后验分布中采样的方法。已提交。2013。[52] Bui-Thanh T, Nguyen QP. 用于偏微分方程约束贝叶斯逆问题的基于有限元方法的离散化不变 MCMC 方法。《逆问题与成像》。2016；10(4)：943。[53] Chen Y, Dwivedi R, Wainwright MJ, Yu B. Metropolis 化哈密顿蒙特卡洛的快速混合：多步梯度的优势。《机器学习研究杂志》。2020；21：92–1。[54] Liu M, Kumar R, Haber E, Aravkin AY. 利用快速数据插值对非均匀几何结构进行同步炮集反演。arXiv：优化与控制。2018。[55] Clarkson KL, Woodruff DP. 输入稀疏时间下的低秩近似与回归。《美国计算机协会杂志》。2017 年 1 月；63(6)。可获取于：https://doi.org/10.1145/3019134。[56] Van der Vaart AW. 渐近统计。第 3 卷。剑桥大学出版社；2000。[57] Evensen G. 集合卡尔曼滤波器：理论表述与实际应用。《海洋动力学》。2003；53：343–367。[58] Engl HW, Kunisch K, Neubauer A. 非线性病态问题 Tikhonov 正则化的收敛率。《逆问题》。1989；5(4)：523。可获取于：http://stacks.iop.org/0266-5611/5/i=4/a=007。[59] Kundur D, Hatzinakos D. 盲图像反卷积。《IEEE 信号处理杂志》。1996；13(3)：43–64。[60] Swedlow JR. 定量荧光显微术与图像反卷积。载于：《细胞生物学方法》。第 114 卷。Elsevier；2013。第 407–426 页。[61] Ryan O, Debbah M. 信号处理应用中的自由反卷积。载于：2007 年 IEEE 国际信息论研讨会。IEEE；2007。第 1846–1850 页。[62] Mueller JL, Siltanen S. 具有实际应用的线性与非线性逆问题。工业与应用数学学会；2012。[63] Achlioptas D. 数据库友好的随机投影：使用二元随机变量的 Johnson-Lindenstrauss。《计算机与系统科学杂志》。2003；66(4)：671–687。PODS 2001 专刊。可获取于：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022000003000254。[64] Piccolomini EL, Zama F. 计算机断层扫描问题中的共轭梯度正则化方法。《应用数学与计算》。1999；102(1)：87–99。可获取于：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300398100073。[65] Landi G, Loli Piccolomini E, Tomba I. 迭代正则化方法的停止准则。《应用数值数学》。2016；106：53–68。可获取于：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927416300368。[66] Hanke M, Nagy JG. 利用对称不定共轭梯度技术复原大气模糊图像。《逆问题》。1996 年 4 月；12(2)：157–173。可获取于：https://doi.org/10.1088/0266-5611/12/2/004。[67] 德克萨斯大学奥斯汀分校、加利福尼亚大学默塞德分校。hIPPYlib：反问题 Python 库。可获取于：https://hippylib.github.io/。