用于高维贝叶斯反问题的降维 KRnet 映射

Yani Feng[a]、Kejun Tang[b]、Xiaoliang Wan[c]、Qifeng Liao[a,*]

[a]信息科学与技术学院，上海科技大学，中国上海 *201210*[b]北京大学长沙计算与数字经济研究院，中国长沙 *410205*[c]数学系与计算与技术中心，路易斯安那州立大学，美国巴吞鲁日 *70803*

arXiv:2303.00573v2 [stat.ML] 8 Mar 2023

摘要

我们提出一种用于高维贝叶斯反问题的降维 KRnet 映射方法（DR-KRnet），该方法通过显式构造一个映射，将先验测度在潜在空间中推送为后验测度。我们的方法包含两个主要组成部分：数据驱动的 VAE 先验，以及潜变量后验分布的密度近似。在实际应用中，初始化一个与现有先验数据相一致的先验分布可能并非易事；换言之，复杂的先验信息往往无法通过简单的手工构造先验来表达。我们采用变分自编码器（VAE）近似先验数据集的内在分布，该方法通过潜变量和解码器实现。利用 VAE 先验提供的解码器，我们在低维潜空间中重新表述该问题。具体而言，我们寻求一个由 KRnet 给出的可逆传输映射，以近似潜变量的后验分布。此外，我们构建了一个高效的物理约束代理模型，无需任何标注数据，从而降低似然计算中涉及的正问题和伴随问题的计算成本。数值实验表明，DR-KRnet 在高维贝叶斯反问题中具有良好的准确度和效率。关键词：降维；KRnet；贝叶斯推断；VAE先验。

1. 引言

贝叶斯反问题在科学和工程领域十分常见，应用范围涵盖地下过程和大气输运、化学动力学等。这类问题的主要任务是根据含噪且不完整的观测值，恢复空间变化的未知参数。量化

*通讯作者电子邮箱： fengyn@shanghaitech.edu.cn (Yani Feng),tangkejun@icode.pku.edu.cn (Kejun Tang), xlwan@lsu.edu (Xiaoliang Wan), liaoqf@shanghaitech.edu.cn (Qifeng Liao)

未知参数的不确定性 [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7]对于预测建模和基于仿真的决策至关重要。

贝叶斯统计方法为基于数据和先验知识进行推断提供了基础。事实上，贝叶斯框架将反问题的解表示为未知参数的后验概率分布。尽管在概念上很直观，但要刻画后验分布，例如生成样本、进行边缘化、计算矩等，往往面临计算上的挑战，尤其是在未知参数维度较高时。最常用的后验分布模拟方法是马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC） [8]。MCMC 是一种精确的推断方法，且易于实现。然而，MCMC 存在诸多局限。高效的 MCMC 算法依赖于有效提议分布的设计；当目标分布包含强相关性时，尤其是在高维情形下，这一点会变得困难。此外，MCMC 通常需要大量迭代，并且每次迭代都需要求解正向模型。如果模型的计算量很大，例如包含高维空间变化参数的偏微分方程，MCMC 的计算成本就会高得难以承受。尽管人们已投入大量精力来降低计算成本，例如 [6, 9, 10, 11, 12, 13], ，反问题中仍存在许多挑战。此外，MCMC 的迭代过程没有明确的收敛准则来判断其是否已充分捕获后验分布。

作为马尔可夫链蒙特卡罗采样的替代策略，变分推断（VI）被广泛用于贝叶斯推断中的后验分布近似。与马尔可夫链蒙特卡罗相比，变分推断通常速度更快，也更易扩展到大规模数据。变分推断的核心思想是在一族参数化密度模型中寻找对后验分布的最佳近似。在 [14, 15, 16], 中，研究了将深度生成先验与变分推断结合起来求解贝叶斯反问题。然而，对于高维分布，由于维数灾难，要获得准确的后验近似仍然极具挑战性。例如，常用的平均场方法 [17] 假设各维度之间相互独立，以获得易于处理的密度模型，但通常会导致二阶矩估计偏低。为解决这一问题，需要能力更强的密度模型，并放宽相互独立这一假设。实现这一目标的一种策略是寻找一个将先验分布映射为后验分布的映射，以便利用条件依赖结构，并将其编码到映射中，从而提高效率 [18]。更具体地说，该映射将服从先验分布的随机变量 z 转换为服从后验分布的随机变量 y。这类变换可视为概率测度之间的传输映射，而这样的映射并非唯一。要确定一个映射，需要引入某种特定结构。

典型结构包括 Knothe–Rosenblatt（K-R）重排[19], 神经常微分方程 [20], 以及基于流的深度生成模型中使用的多个简单映射的复合，例如 NICE [21], real NVP [22],KRnet [23, 24, 25], 等。

许多实际的贝叶斯反问题都需要应对两项挑战。首先，先验知识通常以历史数据或先前获得的解的形式存在，而这些知识应与贝叶斯推断中的先验分布保持一致。遗憾的是，真实先验可能比任何常用的显式密度模型都复杂得多。第二项挑战是维数灾难，这要求在高维情形下对密度近似和样本生成进行权衡。为应对这两项挑战，可以结合数据驱动先验和降维方法。例如，研究者提出了 VAE 先验 [14, 15, 16, 26, 27] 和 GAN 先验 [28] ，从数据中学习先验分布，并建立从低维潜空间到高维参数空间的映射，随后针对潜在随机变量实施马尔可夫链蒙特卡罗或变分推断。为进一步提高效率，可以使用代理模型，以避免采样或变分推断方法所需的计算开销巨大的正问题和伴随问题 [29, 30] 。代理建模的一种常见选择是深度神经网络，它能够很好地近似高维参数化偏微分方程。例如，物理信息神经网络（PINN） [31] 因将物理定律嵌入损失函数而受到广泛关注，可用于求解偏微分方程。Zhu 等人 [32, 33] 提出了一种用于具有高维随机输入的偏微分方程的全连接卷积编码器-解码器网络。

在这项工作中，我们提出了一种用于高维贝叶斯反问题的降维 KRnet 映射方法（DR-KRnet）。其核心思想是利用从历史数据中学习到的潜变量来近似后验分布，其中使用 VAE 进行降维，并使用 KRnet 进行密度近似。我们首先利用大量历史数据训练 VAE 先验，并使用学习到的解码器将推断转移到潜变量空间。随后，我们最小化潜变量的后验分布与 KRnet 所诱导的密度模型之间的 Kullback-Leibler 散度。借助解码器和潜变量的近似后验分布，我们能够高效地计算所需统计量，因为 KRnet 定义了一种传输映射，可以以极低的成本提供精确样本。为进一步提高效率，我们还开发了一种卷积编码器-解码器网络作为替代模型 [32, 33]。与基于采样的方法相比，我们的策略主要有两大优势：首先，我们利用两种强大的深度生成模型，即 VAE 和 KRnet，构建出一个显式密度模型，该模型具有足够的表达能力，能够刻画高维后验分布。

其次，KRnet 是一种归一化流模型，能够有效处理维数适中的问题，并且可能比马尔可夫链蒙特卡罗更加稳健。

本文结构安排如下。第 2 节介绍本文将要研究的贝叶斯反问题的数学表述。第 3 节介绍我们针对高维贝叶斯反问题提出的降维 KRnet 映射方法（DR-KRnet），其中给出构建 VAE 先验神经网络结构的方案，介绍如何利用 KRnet 构造先验分布与后验分布之间的映射，并建立物理约束代理模型。第 4 节通过两个数值实验，展示 DR-KRnet 能够高效推断高维参数。最后，第 5 节总结全文。

2. 贝叶斯反问题

首先，本文所考虑的正向模型的具体细节如下。设 $\mathcal{S}$ 为一个有界、连通且具有多边形边界 $\partial\mathcal{S}$ 的空间域，$s \in \mathcal{S}$ 为空间变量。所考虑问题的物理过程由空间域 $\mathcal{S}$ 上的偏微分方程控制：求 $u(s,y(s))$，使得

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\big(s, u(s,y(s)); y(s)\big) &= h(s), \quad \forall s \in \mathcal{S}, \\ \mathfrak{b}\big(s, u(s,y(s)); y(s)\big) &= g(s), \quad \forall s \in \partial\mathcal{S}, \end{aligned} \tag{1}$$

其中，$\mathcal{L}$ 是偏微分算子，$\mathfrak{b}$ 是边界算子，二者都可能取决于未知的空间变化参数$y(s)$；$h(s)$是源函数，而$g(s)$指定边界条件。

2.1. 贝叶斯框架

我们考虑从观测值 $\mathcal{D}_{obs} \in \mathbb{R}^m$ 推断参数$y \in \mathbb{R}^n$ 这一任务，并假设存在一个由式 (1) 确定的正向模型 $\mathcal{F}$，该模型将未知参数y映射为观测值 $\mathcal{D}_{obs}$：

$$\mathcal{D}_{obs} = \mathcal{F}(y) + \epsilon, \tag{2}$$

其中，$\epsilon \in \mathbb{R}^m$ 是测量噪声。设 $\pi_\epsilon(\epsilon)$为 ϵ的分布，则可以得到给定y条件下 $\mathcal{D}_{obs}$ 的分布：

$$\pi(\mathcal{D}_{obs}|y) = \pi_\epsilon(\mathcal{D}_{obs} - \mathcal{F}(y)). \tag{3}$$

由于通常$m \ll n$，反问题通常是不适定的，即给定含噪观测 $\mathcal{D}_{obs}$，可能无法唯一恢复参数 y。在贝叶斯框架下，要推断的参数被视为随机变量。给定观测值 $\mathcal{D}_{obs}$，为感兴趣的参数指定一个先验分布$\pi(y)$，其中编码了关于该参数的先验信息；随后可以通过贝叶斯公式计算后验分布 $\pi(y|\mathcal{D}_{obs})$：

$$\pi(y|\mathcal{D}_{obs}) = \frac{\pi(\mathcal{D}_{obs}|y)\pi(y)}{C} \quad \propto \quad \underbrace{\pi(\mathcal{D}_{obs}|y)\pi(y)}_{\hat{\pi}(y)}, \tag{4}$$

其中， $\pi(\mathcal{D}_{obs}|y)$ 是似然函数，而证据或边际似然$C = \int \pi(\mathcal{D}_{obs}|y)\pi(y)dy$是归一化常数。

由于映射 $\mathcal{F}$从y 到 $\mathcal{D}_{obs}$ 通常是非线性的，且证据往往难以计算，尤其是在高维问题中，因此通常无法获得后验分布的闭式表达。因此，贝叶斯推断需要刻画未归一化后验分布，这通常通过变分推断（VI）或马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）等采样方法实现。然而，VI 通常需要引入额外假设，例如，用于逼近后验分布的参数化密度模型族为对角协方差高斯分布；而对于足够大的n 和m，MCMC 等采样方法的效率会降低。为提高效率，可以引入降维，使 VI [14, 15] 或 MCMC [26, 28] 能够在低维潜空间中实现，其中降维由深度生成模型显式或隐式地完成。在本研究中，我们以归一化流取代 MCMC 或 VI，提出一种完全基于深度生成建模的降维 KRnet 映射方法（DR-KRnet）。

2.2. 基于映射的推断

我们方法的核心思想是找到一个映射，将先验分布推送到潜在空间中的后验分布。在考虑降维和代理建模之前，我们先考察归一化流如何近似y的后验分布。设$z \in \mathbb{R}^n$ 为一个具有已知分布的随机变量，例如标准高斯分布。我们寻求一个可逆映射f：$\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

$$z = f(y), \tag{5}$$

该分布取决于观测值 $\mathcal{D}_{obs}$、正向模型 $\mathcal{F}$ 以及测量噪声的分布 ϵ。假设映射 f 存在，根据变量替换可得后验分布

$$p_y(y) = p_z(f(y)) \left|\det \nabla_y f\right|. \tag{6}$$

在实践中，我们将通过最小化 $p_y(y)$ 与后验分布之间的 Kullback-Leibler 散度来学习映射 $f(\cdot)$:

$$\begin{aligned} D_{KL}\left(p_y \| \pi\left(y|\mathcal{D}_{obs}\right)\right) &= \int p_y \log \frac{p_y}{\pi(y|\mathcal{D}_{obs})} dy \\ &= \int p_y \log \frac{p_y}{\hat{\pi}(y)} dy + \log C \\ &= \int p_z \log \frac{p_y(f^{-1}(z))}{\hat{\pi}(f^{-1}(z))} dz + \log C \\ &\approx \frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I} \log p_y\left(f^{-1}\left(z^{(i)}\right)\right) - \frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I} \log \hat{\pi}\left(f^{-1}\left(z^{(i)}\right)\right) + \log C, \quad z^{(i)} \sim p_z. \end{aligned} \tag{7}$$

值得指出的是，归一化流能够提供显式的密度模型，并通过可逆映射 $y = f^{-1}(z)$ 高效生成 y 的精确样本。与经典密度模型相比，归一化流的表达能力可能强得多，例如平均场方法中采用的、受对角协方差矩阵约束的高斯模型。然而，在高维情形下，这些生成模型的构建、表示和评估都变得颇具挑战。此外，先验分布 $\pi(y)$ 通常由历史数据 $\{y^{(i)}\}^N{}_{i=1}$ 给出，这些数据可能与常用的先验分布（如高斯分布）存在显著差异，因此需要对其进行显式建模。此外，每个样本 z 都需要评估计算开销很大的前向函数 $\mathcal{F}$。为解决这些问题，我们使用降维 VAE 先验通过历史数据对 $\pi(y)$ 进行建模，然后在低维潜空间中，针对正问题的代理模型应用 KRnet，以寻找可逆映射 f。

3. 降维 KRnet 映射

本节将详细介绍一种降维 KRnet 映射方法（DR-KRnet），该方法由三个部分组成（先验分布的选择、似然计算和后验近似）。首先，引入 VAE 先验以捕捉 $\{y^{(i)}\}^N{}_{i=1}$ 的特征。接下来，采用 KRnet 映射将先验分布推送至低维潜空间中的后验分布。此外，使用物理约束代理建模来高效计算似然函数。

3.1. 用于降维的 *VAE*先验

作为一种降维方法，变分自编码器（VAE）构建了潜在空间与原始高维参数之间的关系。我们简要回顾一下 VAE。假设存在一个潜在随机变量 $x \in \mathbb{R}^d$ $(d \ll n)$，其边缘分布为 $p_{x,\theta}$，其中 θ 包括

模型参数。随机变量 $p_{x,y,\theta}$ x 和 y 的联合分布由条件分布$p_{y|x,\theta}$描述，即 $p_{x,y,\theta} = p_{y|x,\theta}p_{x,\theta}$。根据贝叶斯公式,

$$p_{y,\theta} = \frac{p_{x,y,\theta}}{p_{x|y,\theta}} = \frac{p_{y|x,\theta}p_{x,\theta}}{p_{x|y,\theta}}. \tag{8}$$

后验分布 $p_{x|y,\theta}$ 通常难以求解，因此需要一个近似模型 $q_{x|y,\phi}$，其中 ϕ 包含模型参数。最优参数 θ 和 ϕ 通过最小化 KL 散度确定

$$D_{KL}(q_{x|y,\phi}\|p_{x|y,\theta}) = D_{KL}(q_{x|y,\phi}\|p_{x,\theta}) - \mathbb{E}_{q_{x|y,\phi}}[\log p_{y|x,\theta}] + \log p_{y,\theta} \geq 0. \tag{9}$$

最小化 $D_{KL}(q_{x|y,\phi}\|p_{x|y,\theta})$ 等价于最大化 $\log p_{y,\theta}$ 的变分下界，其定义如下

$$\mathcal{L}_{\theta,\phi}(y) = \mathbb{E}_{q_{x|y,\phi}}[\log p_{y|x,\theta}] - D_{KL}(q_{x|y,\phi}\|p_{x,\theta}). \tag{10}$$

在标准VAE中，我们分别为 $p_{y|x,\theta}$、$q_{x|y,\phi}$ 和 $p_{x,\theta}$ 指定如下概率密度函数模型:

$$\begin{aligned} p_{y|x,\theta} &= \mathcal{N}\left(\mu_{de,\theta}(x), \operatorname{diag}\left(\sigma^{\odot 2}_{de,\theta}(x)\right)\right), \\ q_{x|y,\phi} &= \mathcal{N}\left(\mu_{en,\phi}(y), \operatorname{diag}\left(\sigma^{\odot 2}_{en,\phi}(y)\right)\right), \\ p_{x,\theta} &= \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I}), \end{aligned} \tag{11}$$

其中 $*^{\odot 2}$ 表示逐分量平方运算。元组 $(\mu_{en,\theta}(y),\sigma_{en,\theta}(y))$ 和 $(\mu_{de,\theta}(x)$、$\sigma_{de,\theta}(x))$通过神经网络建模，即:

$$(\mu_{en,\theta}(y), \sigma_{en,\theta}(y)) = \mathrm{NN}_{en}(y;\theta), \tag{12}$$

$$x = \mu_{en,\phi}(y) + \sigma_{en,\phi}(y) \odot \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \boldsymbol{I}), \tag{13}$$

$$(\mu_{de,\theta}(x), \sigma_{de,\theta}(x)) = \mathrm{NN}_{de}(x;\phi), \tag{14}$$

$$\hat{y} = \mu_{de,\theta}(x), \tag{15}$$

其中 NN_{de} 和 NN_{en} 分别表示编码器和解码器神经网络，用于描述数据样本$y \in \mathbb{R}^n$ 与潜在表示 $x \in \mathbb{R}^d$之间的关系，而 $\hat{}y$ 是 y 的重构。

给定先验数据集 $Y := \{y^{(i)}\}^N{}_{i=1}$，变分下界 (10) 的期望可通过蒙特卡罗估计近似得到

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{p_{y,\theta}}\left[\mathcal{L}_{\theta,\phi}(y)\right] &\approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathcal{L}_{\theta,\phi}\left(y^{(i)}\right) \\ &\approx \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\log p_{y^{(i)}|x^{(i)},\theta} - (\log q_{x^{(i)}|y^{(i)},\phi} - \log p_{x^{(i)},\theta})\right]}_{\hat{\mathcal{L}}_{\theta,\phi}(Y)}, \end{aligned} \tag{16}$$

其中，$x^{(i)}$ 可通过将$y^{(i)}$ 代入 (13) 生成。我们通过算法1预训练 VAE 先验，其输出为预训练解码器 $p_{y|x,\theta^*}$。这里，θ^* 由解码器的最优参数组成。(4) 中对y 的推断由根据观测值推断潜变量x 取代，表示为

$$\begin{aligned}\pi(x|\mathcal{D}_{obs}) \propto & \pi(\mathcal{D}_{obs}|x)\pi(x), \\ &= \left(\int \pi(\mathcal{D}_{obs}|y,x)\pi(y|x)dy\right)\pi(x) \\ &= \underbrace{\left(\int \pi(\mathcal{D}_{obs}|y,x)p_{y|x,\theta^*}dy\right)p_{x,\theta^*}}_{\hat{\pi}(x)}, \end{aligned} \tag{17}$$

其中，$\pi(\mathcal{D}_{obs}|y,x)$ 是似然函数，$p_{y|x,\theta^*}$ 是预训练解码器，而 p_{x,θ^*} 是变分自编码器的一种简单先验分布，例如标准高斯分布。

算法1VAE先验训练

输入： 先验数据集 $Y := \{y^{(i)}\}^N{}_{i=1}$，最大训练轮数 E，批量大小n_{batch}，学习率 η。

1：将 Y 划分为 N_b 个小批量 $\{Y_j\}^{N_b}_{j=1}$，其中 $N_b := N/n_{batch}$。 2：初始化 θ 和 ϕ，分别用于编码器网络和解码器网络。 3：对于 i = 1： E，执行 4：对于 j = 1： N_b，执行 5：构造噪声集 $S_j = \{\varepsilon^k \sim \mathcal{N}(0, I), k = 1, 2, \ldots, n_{batch}\}$。 6：应用 Y_j 和 S_j 计算 (12)–(14)。 ^ ^ ^ 7：计算 (16) 中的 $-\mathcal{L}_{\theta,\phi}(Y_j)$ 及其梯度 $-\nabla_\theta \mathcal{L}_{\theta,\phi}(Y_j), -\nabla_\phi \mathcal{L}_{\theta,\phi}(Y_j)$。 8：使用基于梯度的优化算法（例如，Adam 优化器 [34]，学习率为 η）更新参数 (θ, ϕ)。

9: **结束循环**

10: **结束循环**

11: 令 $\theta^* = \theta$，其中 θ 包含最后一个训练轮次的解码器网络参数。

输出： 概率解码器 $p_{y|x,\ \theta^*}$。

3.2. KRnet 映射

在式（17）中，令 $\pi(x|\mathcal{D}_{obs}) = C^{-1}\hat{\pi}(x)$，$x \in \mathbb{R}^d$，$d \ll n$。在预训练 VAE 先验的低维潜空间中，我们旨在通过构造一个将先验推前至后验分布的映射来近似后验分布 $\pi(x|\mathcal{D}_{obs})$。换言之，我们要寻找一个传输映射 $\mathcal{T}: z \mapsto x$，使得 $\mathcal{T}_{\#}\mu_z = \mu_x$,

其中，$d\mu_z = p_{z,\theta^*}dz$ 和 $d\mu_x = \pi(x|\mathcal{D}_{obs})dx$ 分别是z 和x 的概率测度，而 $\mathcal{T}_{\#}\mu_z$是 μ_z 的推前，满足对于每个博雷尔集B，$\mu_x(B) = \mu_z(\mathcal{T}^{-1}(B))$。Knothe-Rosenblatt 重排表明，传输映射 $\mathcal{T}$ 可能具有下三角结构

$$z = \mathcal{T}^{-1}(x) = \begin{bmatrix} \mathcal{T}_1(x_1) \\ \mathcal{T}_2(x_1, x_2) \\ \vdots \\ \mathcal{T}_d(x_1, \ldots, x_d) \end{bmatrix}. \tag{18}$$

当二次代价退化 [35] 时，这种映射可视为一列最优传输映射的极限。

KRnet 的基本思想是，根据 Knothe-Rosenblatt 重排来定义归一化流 $f(x)$ 的结构，从而使 KRnet 成为 real NVP 的一种推广 [22]。令 $x = \left[x^{(1)}, \ldots, x^{(K)}\right]^{\mathsf{T}}$ 为 x 的一个划分，其中 $x^{(i)} = \left[x_1^{(i)}, \ldots, x_m^{(i)}\right]^{\mathsf{T}}$，且 $1 \le K \le d$，$1 \le m \le d$，$\sum^{K}_{i=1} \dim\left(x^{(i)}\right) = d$。我们的 KRnet 总体形式为

$$z = f(x) = \begin{bmatrix} f_1\left(x^{(1)}\right) \\ f_2\left(x^{(1)}, x^{(2)}\right) \\ \vdots \\ f_K\left(x^{(1)}, \ldots, x^{(K)}\right) \end{bmatrix}. \tag{19}$$

每个 f_i（$i = 2, \ldots, K$）均由 real NVP 通过堆叠一系列简单双射构造而成。在相同模型规模下，KRnet 能提供比 real NVP 表达能力更强的密度模型。关于 KRnet 的更多详情见 [23, 24]。

令$q_{x,\alpha}$ 表示由模型参数为 α 的 KRnet 所诱导的概率密度函数模型，则将式 (19) 重写为

$$z = f_\alpha(x). \tag{20}$$

为近似式 (17) 中的 $\pi(x|\mathcal{D}_{obs})$，我们最小化$q_{x,\alpha}$ 与 $\pi(x|\mathcal{D}_{obs})$ 之间的 KL 散度

$$D_{KL}\left(q_{x,\alpha} \| \pi\left(x|\mathcal{D}_{obs}\right)\right) = \int q_{x,\alpha} \log \frac{q_{x,\alpha}}{\pi(x|\mathcal{D}_{obs})} dx = \int q_{x,\alpha} \log \frac{q_{x,\alpha}}{\hat{\pi}(x)} dx + \log C,$$

这等价于最小化以下泛函

$$\begin{aligned} \int q_{x,\alpha} \log \frac{q_{x,\alpha}}{\hat{\pi}(x)} dx &= \int p_{z,\theta^*} \log \frac{q_{x,\alpha}\left(f_\alpha^{-1}(z)\right)}{\hat{\pi}\left(f_\alpha^{-1}(z)\right)} dz \\ &\approx \frac{1}{I} \sum_{i=1}^{I} \log q_{x,\alpha}\left(f_\alpha^{-1}\left(z^{(i)}\right)\right) - \frac{1}{I} \sum_{i=1}^{I} \log \hat{\pi}\left(f_\alpha^{-1}\left(z^{(i)}\right)\right), \quad z^{(i)} \sim p_{z,\theta^*}. \end{aligned} \tag{21}$$

令 $x^{(i)}=f_\alpha^{-1}\left(z^{(i)}\right)$。(21) 右侧的第二项可表示为

$$\begin{aligned}-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log\hat{\pi}\left(x^{(i)}\right)&=-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log\left(\int\pi\left(\mathcal{D}_{obs}|y,x^{(i)}\right)p_{y|x^{(i)},\theta^*}dy\right)-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log p_{x^{(i)},\theta^*}\\&\leq-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\int p_{y|x^{(i)},\theta^*}\log\pi\left(\mathcal{D}_{obs}|y,x^{(i)}\right)dy-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log p_{x^{(i)},\theta^*}\\&\approx-\frac{1}{I}\frac{1}{J}\sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\log\pi\left(\mathcal{D}_{obs}|y^{(i,j)},x^{(i)}\right)-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log p_{x^{(i)},\theta^*},\quad y^{(i,j)}\sim p_{y|x^{(i)},\theta^*},\end{aligned}$$

其中应用了詹森不等式，$\pi\left(\mathcal{D}_{obs}|y^{(i,j)},\ x^{(i)}\right)$表示似然函数。由于右侧第一项对应于相对于由$p_{y|x,\ \theta^*}p_{x,\ \theta^*}$给出的联合分布，对 $\log\pi(\mathcal{D}_{obs}|y,\ x)$ 的期望，因此我们可以直接令$J=1$。由此得到需要最小化的目标函数

$$\mathcal{L}_{KRnet}=\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log q_{x^{(i)},\alpha}-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log\pi\left(\mathcal{D}_{obs}|y^{(i)},x^{(i)}\right)-\frac{1}{I}\sum_{i=1}^{I}\log p_{x^{(i)},\theta^*},\tag{22}$$

其中$x^{(i)}=f_\alpha^{-1}\left(z^{(i)}\right)$，$z^{(i)}\sim p_{z,\ \theta^*}$且$y^{(i)}\sim p_{y|x^{(i)},\ \theta^*}$。

KRnet 通过最小化 $\mathcal{L}_{KRnet}$ 完成训练后，我们可以通过预训练的解码器估计后验分布$\pi(y|\mathcal{D}_{obs})$ 的矩，

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[y]&=\int y\left(\int p_{y|x,\theta^*}q_{x,\alpha^*}dx\right)dy\approx\frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\int yp_{y|x^{(i)},\theta^*}dy\\&\approx\frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\mu_{de,\theta^*}\left(x^{(i)}\right),\quad x^{(i)}=f_{\alpha^*}^{-1}\left(z^{(i)}\right),\ z^{(i)}\sim p_{z,\theta^*},\end{aligned}\tag{23}$$

$$\begin{aligned}\mathbb{V}[y]&=\mathbb{E}\left[(y-\mathbb{E}[y])\,(y-\mathbb{E}[y])^{\mathsf{T}}\right]\\&=\int(y-\mathbb{E}[y])(y-\mathbb{E}[y])^{\mathsf{T}}\left(\int p_{y|x,\theta^*}q_{x,\alpha}dx\right)dy\\&\approx\frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\int(y-\mathbb{E}[y])(y-\mathbb{E}[y])^{\mathsf{T}}p_{y|x^{(i)},\theta^*}dy\\&\approx\frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s}\mathrm{diag}\left(\sigma_{de,\theta^*}^{\odot2}\left(x^{(i)}\right)\right),\quad x^{(i)}=f_{\alpha^*}^{-1}\left(z^{(i)}\right),\ z^{(i)}\sim p_{z,\theta^*},\end{aligned}\tag{24}$$

其中，$p_{y|x^{(i)},\theta^*}=\mathcal{N}\left(\mu_{de,\theta^*}\left(x^{(i)}\right),\mathrm{diag}\left(\sigma^{\odot2}{}_{de,\theta^*}\left(x^{(i)}\right)\right)\right)$是第 3.1 节给出的预训练解码器，$\alpha^*$表示 KRnet 的最优参数，而$N_s$是后验样本的数量。

3.3. 物理约束代理建模

除预训练解码器外，我们还需要为正问题预训练一个代理模型，以便通过基于随机梯度的优化[36]高效地最小化式（22）中给出的 $\mathcal{L}_{KRnet}$。假设控制方程定义在二维规则$H \times W$网格上，其中H和W分别表示空间域沿两个坐标轴的网格点数。我们通过一个映射将代理建模问题转化为图像到图像回归问题

$$\hat{\mathcal{F}} : y \in \mathbb{R}^{d_y \times H \times W} \to u \in \mathbb{R}^{d_u \times H \times W}. \tag{25}$$

这里，d_y和d_u被视为输入图像和输出图像中的通道数，类似于自然图像中的 RGB ˆ 通道。更具体地说，具有模型参数 Θ 的代理模型 $u = \mathcal{F}_\Theta(y)$ 由卷积编码器和解码器网络组成，即 u = 解码器 ∘ 编码器(y)。该代理模型无需标注数据即可训练；换言之，不会针对某些选定的y求解偏微分方程。与物理信息神经网络类似，该模型通过施加式 (1) 给出的约束进行训练 [31]，即最小化以下目标函数：

$$\mathcal{J}\left(\Theta; \{y^{(i)}\}_{i=1}^N\right) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[\left\|\mathcal{R}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right), y^{(i)}\right)\right\|_2^2 + \beta\left\|\mathcal{B}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right)\right)\right\|_2^2\right], \tag{26}$$

其中，$\mathcal{R}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right)、\ y^{(i)}\right) = \mathcal{L}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right);\ y^{(i)}\right) - h$ 以及 $\mathcal{B}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right)\right) = \mathrm{b}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right);\ y^{(i)}\right) - g$ 分别衡量 $\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right)$ 满足偏微分方程和边界条件的程度，$\beta > 0$ 为惩罚参数。$\mathcal{R}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right)、\ y^{(i)}\right)$和 $\mathcal{B}\left(\hat{\mathcal{F}}_\Theta\left(y^{(i)}\right)\right)$ 都可能涉及对空间坐标的积分和微分，这些运算通过高效的离散运算近似实现，例如Sobel滤波器 [37, 33]。使用损失函数 (26) 训练得到的代理模型称为物理约束代理模型。训练过程总结于算法2。

ˆ 一旦获得预训练解码器$p_{y|x,\theta^*}$和预训练代理模型 $\mathcal{F}_{\Theta^*}(y)$，我们就可以在低维潜空间中找到从先验分布到后验分布的传输映射，其实现过程见算法3。寻找降维 KRnet 映射（DR-KRnet）的整个过程如图1所示。

算法2 训练物理约束代理模型 输入：先验数据集 $Y := \{y^{(i)}\}^N$ $i=1$、最大训练轮数 E、批量大小 n_{batch}和学习率 η。1：将 Y 划分为 N_b 个小批量 $\{Y_j\}^{N_b}$ $j=1$，其中 $N_b = N\ n_{batch}$。2：初始化代理网络的 Θ。3：对于 $i = 1 : E$ 执行 4：对于 $j = 1 : N_b$ 执行 5：计算式（26）中的目标函数 $\mathcal{J}(\Theta; Y\ j)$ 及其梯度 $\nabla_\Theta \mathcal{J}(\Theta; Y\ j)$。6：使用基于梯度的优化算法（例如，Adam优化器[34]，学习率为 η）更新参数 Θ。7：结束循环 8：结束循环 9：令 $\Theta^* = \Theta$，其中 Θ 包含代理网络在最后一个训练轮次的参数。

输出： 代理模型$u = \hat{\mathcal{F}}_{\Theta^*}(y)$ 与最优参数 Θ^*。

算法3降维 KRnet 映射（DR-KRnet）

输入：预训练解码器 $p_{y|x,\theta^*} = \mathcal{N}\left(\mu_{de,\theta^*}(x),\ \mathrm{diag}\left(\sigma^{\odot 2}_{de,\theta^*}(x)\right)\right)$，预训练代理模型 $\hat{\mathcal{F}}_{\Theta^*}$，从 $\mathcal{N}(0, I)$ 中抽取的样本量，后验分布的样本量 N_s，批量大小 n_{batch}，最大训练轮数 E，学习率 η。1：生成训练数据集 $Z := \{z^{(i)}\}_{i=1}^{I}$，其中 $z^{(i)} \sim \mathcal{N}(0, I)$。2：将 Z 划分为 N_b 个小批量 $\{Z_j\}_{j=1}^{N_b}$，其中 $N_b = I\, n_{batch}$。3：初始化 α KRnet 映射的参数。4：对于 $i = 1 : E$，执行：5：对于 $j = 1 : N_b$，执行：6：根据式 (20) 计算 $X_j = f_{\alpha}^{-1}(Z_j)$。7：计算高维参数：$Y_j = \mu_{de,\theta^*}(X_j)$。8：计算代理模型：$U_j = \hat{\mathcal{F}}_{\Theta^*}(Y_j)$。9：根据式 (22) 计算损失函数 $\mathcal{L}_{KRnet}$ 及其梯度 $\nabla_{\alpha}\mathcal{L}_{KRnet}$。10：使用基于梯度的优化算法（例如，Adam优化器[34]，学习率为 η）更新参数 α。

11: **结束循环**

12: **结束循环**

13: 令 $\alpha^* = \alpha$，其中 α包含 KRnet 映射在最后一个训练轮次的参数。14: 从 $\{z^{(i)}\}_{i=1}^{N_s}$ 采样，其中 $z^{(i)} \sim \mathcal{N}(0, I)$。15: 对于 $i = 1, 2, \ldots, N_s$，$x^{(i)} = f_{\alpha^*}^{-1}\left(z^{(i)}\right)$。16: 根据式 (23) 计算后验均值 $\hat{\mathbb{E}}[y] = \frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s} \mu_{de,\theta^*}\left(x^{(i)}\right)$。17: 根据式 (24) 计算后验方差 $\hat{\mathbb{V}}[y] = \frac{1}{N_s}\sum_{i=1}^{N_s} \mathrm{diag}\left(\sigma^{\odot 2}_{de,\theta^*}\left(x^{(i)}\right)\right)$。

输出： 后验均值 $\hat{\mathbb{E}}[y]$ 和后验方差 $\hat{\mathbb{V}}[y]$。

4. 数值实验

我们考虑单相稳态达西流。设 $\alpha(s)$ 表示一个未知的渗透率场。压力场 $u(s,y(s))$ 由以下扩散方程定义

$$-\nabla \cdot (\alpha(s)\nabla u(s, \alpha(s))) = h(s), \quad s \in \mathcal{S}, \tag{27}$$

其中，考虑物理区域 $\mathcal{S} = (0,1)^2 \in \mathbb{R}^2$。我们在左、右边界采用齐次狄利克雷边界条件，在顶部采用齐次诺伊曼边界条件

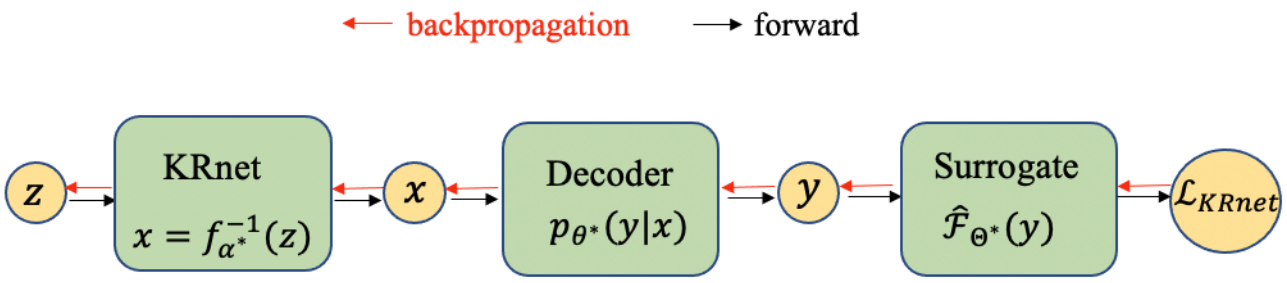


图1：寻找降维 KRnet 映射的完整流程。

和底部边界采用齐次诺伊曼边界条件，
即，

$$u(s, \alpha(s)) = 0, \quad s \in \{0\} \times [0, 1],$$

$$u(s, \alpha(s)) = 0, \quad s \in \{1\} \times [0, 1],$$

$$\alpha(s)\nabla u(s, \alpha(s)) \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad s \in \{(0, 1) \times \{0\}\} \cup \{(0, 1) \times \{1\}\},$$

其中，$\boldsymbol{n}$是诺伊曼边界的外法向量。源项指定为$h(s) = 3$。在接下来的数值实验中，计算域$\mathcal{S}$由均匀64×64 网格离散，即式（25）中的$H = 64$、$W = 64$。本文的目标是根据含噪且不完整的观测，推断对数渗透率场$y(s) = \log \alpha(s)$。

我们假设对数渗透率场$y(s)$是一个高斯随机场（GRF），即$y(s) \sim \mathcal{GP}(m(s), k(s_1, s_2))$，其中$m(s)$和$k(s_1, s_2)$分别为均值函数和协方差函数。设$s_1 = [s_{1,1}, s_{1,2}]^\mathsf{T}$和$s_2 = [s_{2,1}, s_{2,2}]^\mathsf{T}$表示两个任意的空间位置。协方差函数$k(s_1, s_2)$取为

$$k(s_1, s_2) = \sigma^2 \exp\left(-\sqrt{\left(\frac{s_{1,1} - s_{2,1}}{l_1}\right)^2 + \left(\frac{s_{1,2} - s_{2,2}}{l_2}\right)^2}\right), \tag{28}$$

其中，σ^2为方差，l_1, l_2为长度尺度。该随机场可通过截断的 Karhunen-Lo`eve 展开（KLE）进行近似，

$$y(s) \approx m(s) + \sum_{k=1}^{d_{KL}} \sqrt{\lambda_k} y_k(s) \xi_k, \tag{29}$$

其中，$d_{KL} \in \mathbb{N}_+$、$y_k(s)$和λ_k分别是$k(s_1, s_2)$的特征函数和特征值；$\{\xi_k\}^{d_{KL}}{}_{k=1}$是均值为零、方差为单位值的独立同分布高斯随机变量。在数值实验中，我们设定$m(s) = 1$和$\sigma^2 = 0.5$。我们将d_{KL}设得足够大，使得指数协方差函数总方差的 95% 得以保留。

现在，我们生成数据集，作为训练 VAE 先验的历史数据。可以假设这些数据来自具有不同长度尺度的随机场。具体而言，我们考虑两种难度逐渐增加的实验设置。测试问题1中，长度尺度设为$l_1 = l_2 = 0.2 + 0.01i, i = 0, 1, 2, \ldots, 9$；测试问题2中，长度尺度设为$l_1 = l_2 = 0.1 + 0.01i, i = 0, 1, 2, \ldots, 9$。对于每个长度尺度，我们生成 2000 个样本，并将它们合并，得到用于训练 VAE 先验的先验数据集 $\{y^{(i)}\}_{i=1}^{N}$，其中$N = 20000$。需要注意的是，KLE方法不适用于处理变化的相关长度，但第 3.1 节中用于描述先验分布的 VAE 先验不受此限制。本文所用神经网络的架构已汇总于附录中。所有神经网络模型均在一张 NVIDIA GeForce GTX 1080Ti 图形处理器上训练。

为评估估计的后验均值场的准确度，定义相对误差如下

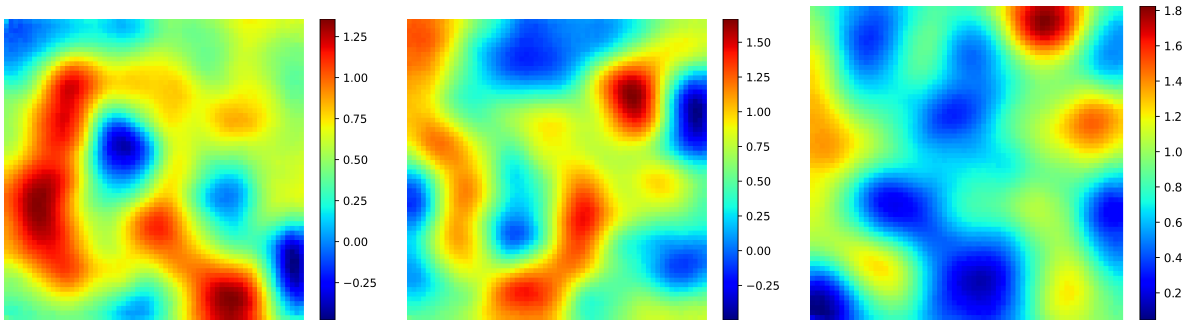
$$\epsilon_{relative} := \|\mathbb{E}[y] - y_{exact}\|_2 / \|y_{exact}\|_2, \tag{30}$$

其中，y_{exact} 是精确的对数渗透率场，而 $\mathbb{E}[y]$ 可通过式（23）计算后验均值得到近似。

4.1. 测试问题*1*

给定先验数据集 $\{y^{(i)}\}_{i=1}^{N}$，其中 $y^{(i)} \in \mathbb{R}^{64\times64}$，将潜变量设为 $x \in \mathbb{R}^{36}$，然后训练相应的 VAE 先验分布。在算法 1 中，我们设置批量大小 $n_{batch} = 100$ 和最大训练轮数 $E = 200$，并采用学习率为 $\eta = 00.0001$的 Adam优化器。VAE 先验分布的架构见附录 A。为生成与先验数据集一致的样本，可以从高斯分布 $\mathcal{N}(0, \boldsymbol{I})$ 中采样潜变量 x，然后通过学习得到的解码器 $p_{y|x,\theta^*}$ 生成 $y = \mu_{de,\theta^*}(x)$ 的样本。一些由 VAE 先验分布生成的样本如图 2 所示。

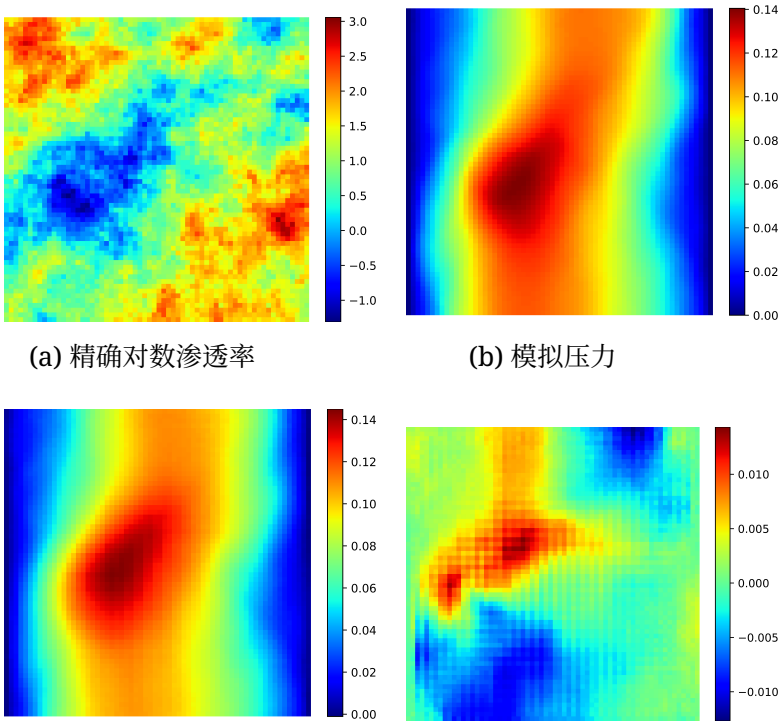
使用数据集 $\{y^{(i)}\}_{i=1}^{N}$，我们通过算法2训练代理模型。式（27）的损失函数和代理模型的架构见附录B。在算法1中，批量大小和最大训练轮数分别设为 $n_{batch} = 100$ 和 $E = 100$，并采用学习率为 $\eta = 0.001$ 的 Adam优化器。图3通过比较代理模型的预测结果与使用 FEniCS 实现的有限元方法得到的模拟结果，展示了训练后的代理模型的性能 [38]。代理压力 $\hat{u}$与模拟压力 u 之间的差异定义为 $\hat{u} - u$（见图 3(d)）。相对误差（$\|\hat{u} - u\|_2/\|u\|_2$）为 0.05694。



(a) 先验样本 1　(b) 先验样本 2　(c) 先验样本 3

(d) 先验样本 4　(e) 先验样本 5　(f) 先验样本 6

图 2：测试问题1中由 $p_{y|x,\ \theta^*}p_x$ 生成的 64×64 分辨率随机样本，其中 $x \in \mathbb{R}^{36}$、$p_{y|x,\ \theta^*}$ 是 VAE 先验的解码器，且 $p_x = \mathcal{N}(0,\boldsymbol{I})$。



(a) 精确对数渗透率　　(b) 模拟压力

(c) 代理压力　　(d) 模拟压力与代理压力之间的差异

图3：测试问题1的代理模型结果示意图。

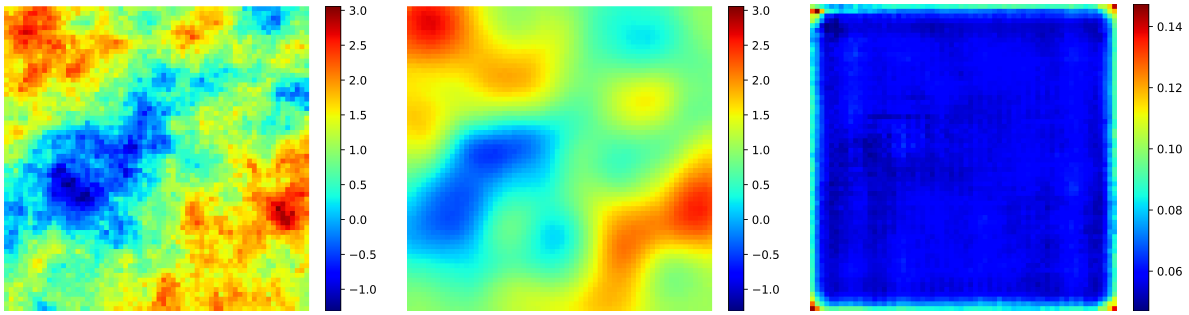
表1：测试问题1中 DR-KRnet 与 VAEprior-MCMC 的比较。

模型	$\epsilon_{relative}$	耗时
VAEprior-MCMC	0.4014	5.2224 分钟
DR-KRnet	0.3914	1.9608 分钟

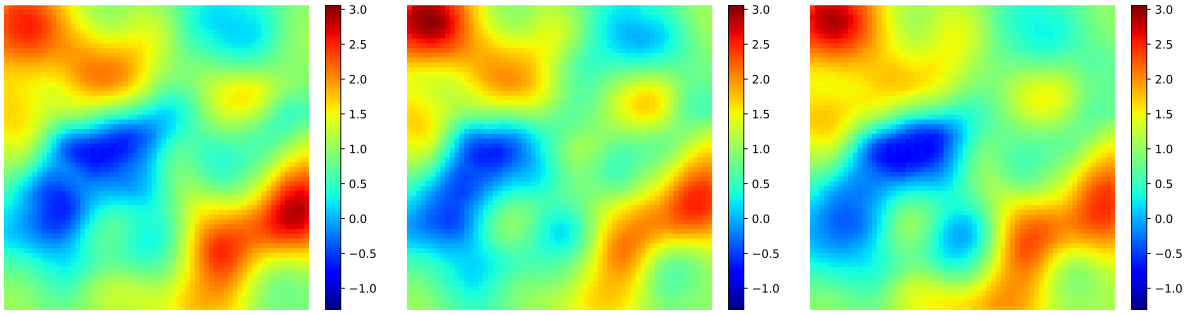
我们将 DR-KRnet 与 VAEprior-MCMC 进行比较。后者使用马尔可夫链蒙特卡罗，根据与 DR-KRnet 中相同的 VAE 先验分布对潜变量的后验分布进行采样。我们考虑来自位置 $[0.0625 + 0.125i, 0.0625 + 0.125i], i = 0, 1, 2, \ldots, 7$ 的 64 个压力观测。含噪观测通过向模拟压力场添加 5% 的独立加性高斯噪声得到（见图 3(b)）。

利用预训练解码器和代理模型，我们采用算法3寻求一种 KRnet，以近似潜在空间中的后验分布。对于 KRnet，我们将$x \in \mathbb{R}^{36}$ 的分量划分为 6 个相等的组，并在 8 个仿射耦合层后停用其中一组；每个耦合层对应的双射基于一个神经网络的输出，该网络包含两个各有 48 个神经元的全连接隐藏层（有关 KRnet 结构的更多细节，参见 [23, 24]）。在算法3中，批量大小和最大训练轮数分别设为$n_{batch} = 100$和$E = 5$，并采用学习率为 $\eta = 0.01$ 的 Adam优化器。标准高斯分布的样本量为I =5000。后验分布的样本量为$N_s = 2000$。对于 VAEprior-MCMC，我们采用预条件 Crank Nicolson 马尔可夫链蒙特卡洛（pCN-MCMC）方法 [39, 40]，随后运行 10000 次迭代以确保收敛。对于所有马尔可夫链蒙特卡洛算法的实现，保留最后 2000 个状态并将其视为后验样本。相应的接受率（接受的样本数除以总样本量）为 30.64%。

图4和图5分别给出了 DR-KRnet 和 VAEprior-MCMC 得到的反演结果。可以看出，这两种策略得到的均值、方差和后验样本一致。表1列出了准确度和效率的更多详情，其中相对误差通过式（30）计算。DR-KRnet（见算法3）和 VAEprior-MCMC 的耗时分别是使用 KRnet 和马尔可夫链蒙特卡罗近似潜变量后验分布的计算成本。DR-KRnet 的相对误差小于 VAEprior-MCMC，且计算成本降低了一半。

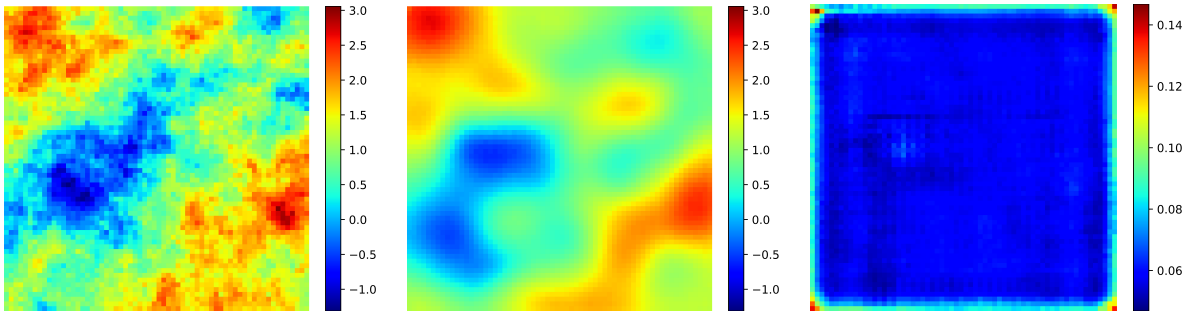


(a) 精确的对数渗透率场　（b）后验均值　（c）后验方差

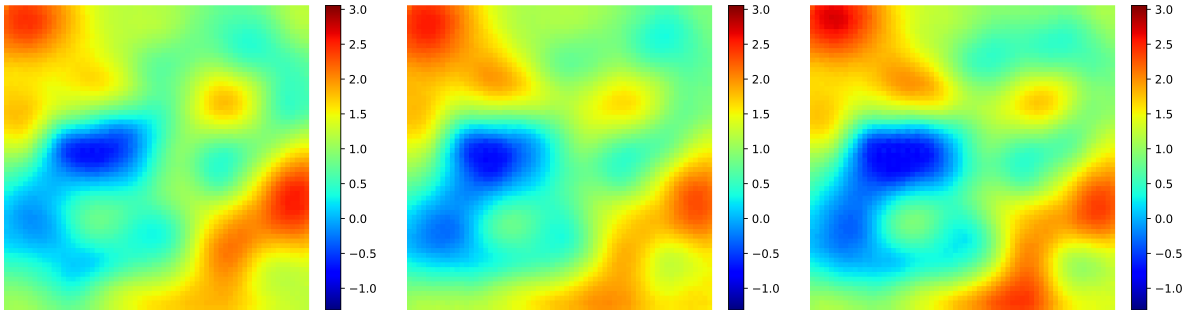


（d）后验样本 1　（e）后验样本 2　(f) 后验样本 3

图4：DR-KRnet 对测试问题1的反演结果。

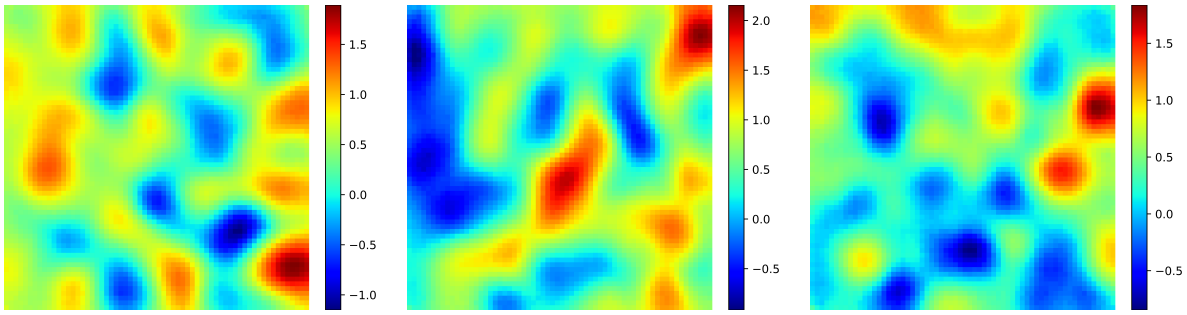


(a) 精确的对数渗透率场　（b）后验均值　（c）后验方差

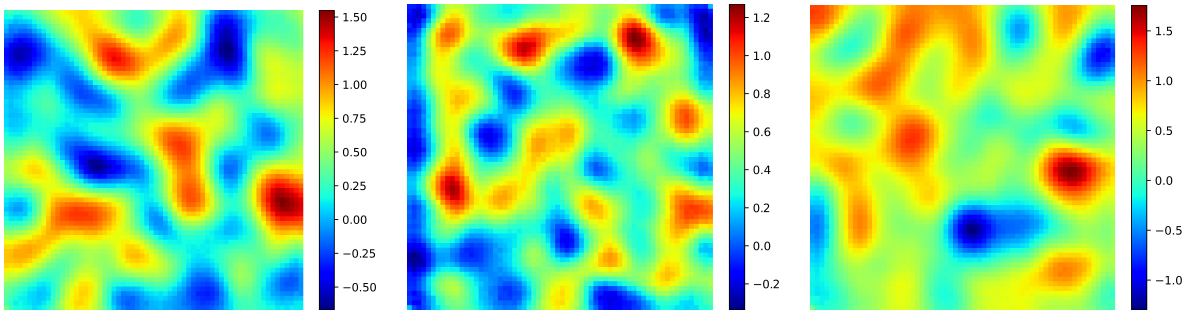


（d）后验样本 1　（e）后验样本 2　(f) 后验样本 3

图5：测试问题1的 VAEprior-MCMC 反演结果。



(a) 先验样本 1　(b) 先验样本 2　(c) 先验样本 3



(d) 先验样本 4　(e) 先验样本 5　(f) 先验样本 6

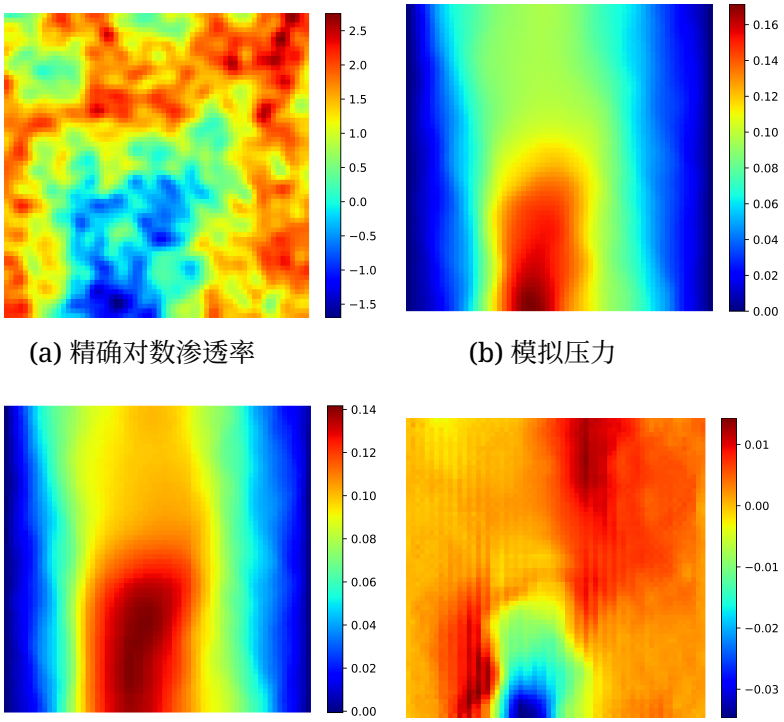
图 6：由$p_{y|x,\theta^*}p_x$ 生成的 64×64 分辨率随机样本，用于测试问题2，其中$x \in \mathbb{R}^{64}$，$p_{y|x,\theta^*}$ 是 VAE 先验的解码器，$p_x = \mathcal{N}(0,\boldsymbol{I})$。

4.2. 测试问题*2*

在此情形下，生成先验数据集时，我们考虑较大的d_{KL}，并采用较短的相关长度。使用$N = 20000$张图像作为先验数据集，我们通过算法1训练 VAE 先验，其神经网络架构见附录 A。这里的超参数与测试问题1相同，但潜变量的维数增加到了 64。图 6 展示了由训练后的 VAE 先验解码器生成的 6 个实现。

代理模型的设置和超参数与测试问题1相同。代理模型的性能如图 7 所示。对于图 7(a)所示的对数渗透率，有限元方法得到的模拟压力场和代理模型预测的压力场分别见图 7(b)–(c)。代理压力 $\hat{u}$ 与模拟压力u 之差定义为图 7(d)所示的 $\hat{u} - u$。相对误差（$\|\hat{u} - u\|_2/\|u\|_2$）为 0.08260。与测试问题1相比，代理模型的预测充分捕捉了解，但准确度略有下降。

由于测试问题2比测试问题1更具挑战性，我们考虑225个均匀分布在 $[0.0625 + 0.125i$、$0.0625 + 0.0625i], i = 0$、1、2、……、14处的压力观测。观测值



(a) 精确对数渗透率

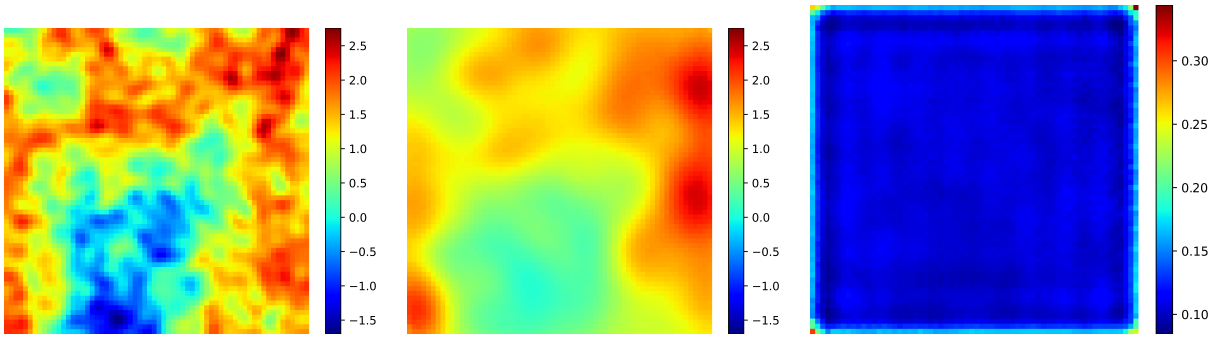
(b) 模拟压力

(c) 代理压力

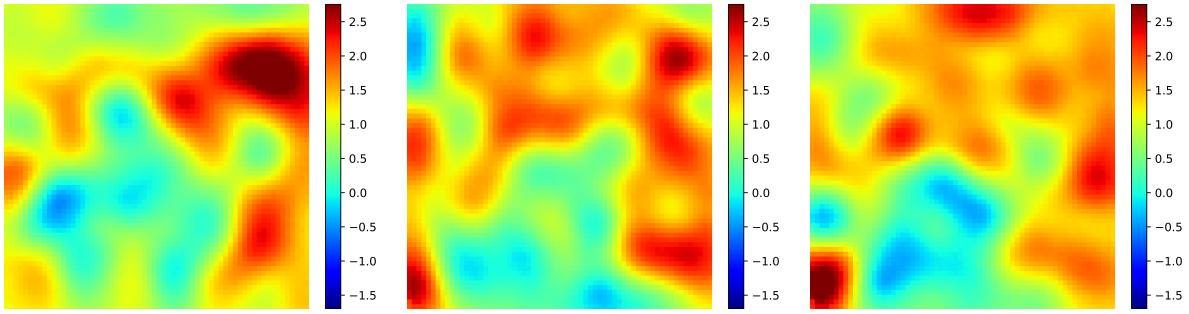
(d) 模拟压力与代理压力之间的差异

压力与代理压力

图 7：测试问题2的代理模型结果示意图。



(a) 精确的对数渗透率场　(b) 后验均值　(c) 后验方差



(d) 后验样本 1　(e) 后验样本 2　(f) 后验样本 3

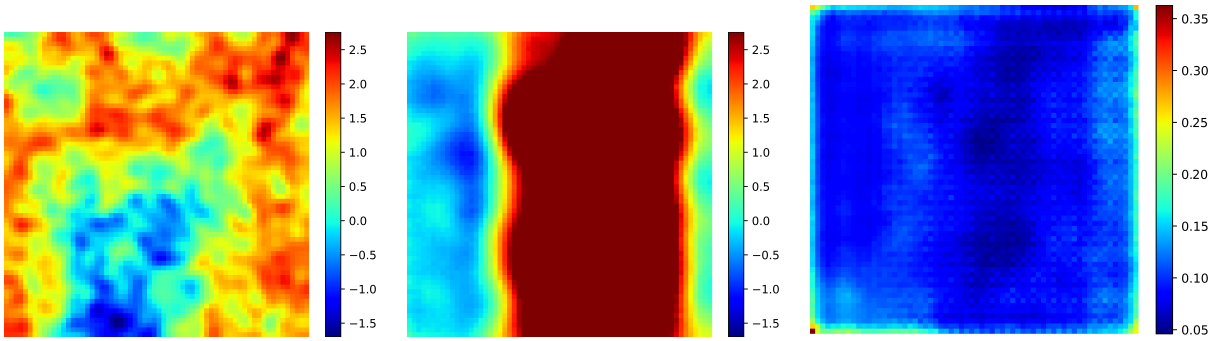
图8：DR-KRnet 在测试问题2中的反演结果。

通过向模拟压力场添加 1% 的独立加性高斯噪声生成。

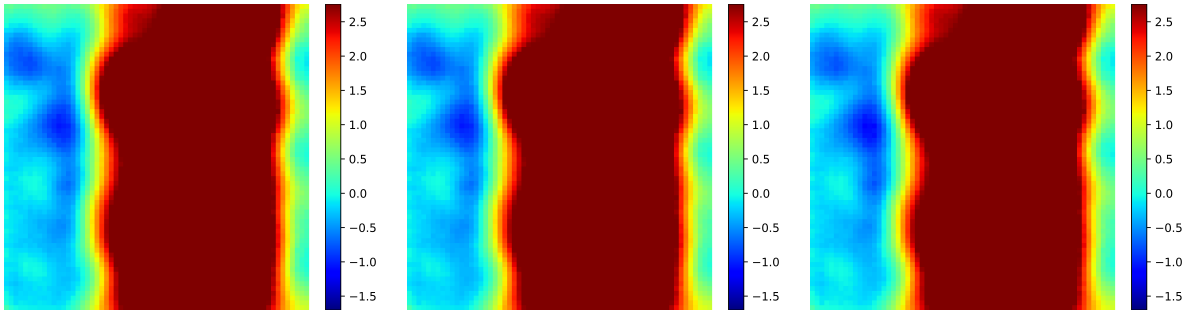
对于 DR-KRnet，KRnet 的架构与测试问题1中的相同，不同之处在于，$x \in \mathbb{R}^{64}$ 的分量被划分为 8 个相等的组。对于 VAEprior-MCMC，我们运行 10000 次迭代，并将最后 2000 个状态设为后验样本，接受率为 24.07%。两种方法的反演结果如图8–9所示。可以看出，在这种情况下，DR-KRnet 的反演结果与精确的对数渗透率一致，而 VAEprior-MCMC 未能逼近潜变量的后验分布。表2从潜变量维度d方面考虑了更多情形。可以看出，在准确度和计算成本方面，DR-KRnet 均优于 VAEprior-MCMC。

5. 结论

我们提出了一种用于高维贝叶斯反问题的降维 KRnet 映射方法（DR-KRnet），该方法在变分自编码器先验的低维潜在空间中应用 KRnet，构建从先验分布到后验分布的可逆传输映射。我们方法的关键思想是



(a) 精确的对数渗透率场　(b) 后验均值　(c) 后验方差



(d) 后验样本 1　(e) 后验样本 2　(f) 后验样本 3

图9：测试问题2中 VAEprior-MCMC 的反演结果。

表2：测试问题2中 DR-KRnet 与 VAEprior-MCMC 的比较。

模型	d	$\epsilon_{relative}$	耗时	接受率
DR-KRnet	36	0.3854	1.9842 分钟	-
DR-KRnet	64	0.4206	2.6844 分钟	-
VAEprior-MCMC	36	2.9391	4.9152 分钟	25.64%
VAEprior-MCMC	64	2.0616	5.4462 分钟	24.07%
VAEprior-MCMC	128	2.0760	5.1006 分钟	27.97%
VAEprior-MCMC	256	2.6581	4.824 分钟	30.5%
VAEprior-MCMC	512	2.2229	5.388 分钟	31.8%

采用一种名为 KRnet 的深度生成模型，在潜在空间中近似后验分布，从而使该方法能够将降维技术融入贝叶斯框架。因此，当我们只能获取高维先验数据时，所提出的方法仍适用于实际问题。借助 KRnet，我们的方法能够为后验分布的概率近似和样本生成提供有效且高效的算法。数值实验表明，DR-KRnet 能够求解高维贝叶斯反问题。总体而言，基于 KRnet 映射的推断比马尔可夫链蒙特卡罗具有更高的可靠性和效率，尤其是在高维贝叶斯反问题中。未来还有若干值得探索的方向。首先，变分自编码器易于训练，我们可以将 DR-KRnet 与信息论结合，设计新的数据驱动先验。其次，我们可以将该方法应用于更具挑战性的问题，例如石油储层模拟。

致谢：作者感谢 Yingzhi Xia 提供的宝贵建议并参与讨论。

资助：Y. Feng 和 Q. Liao 获得了国家自然科学基金委员会（编号：12071291）、上海市科学技术委员会（编号：20JC1414300）以及上海市自然科学基金（编号：20ZR1436200）的资助。K. Tang 获得了中国博士后科学基金会项目（编号：2022M711730）的资助；X. Wan 的工作则获得了美国国家科学基金会项目（编号：DMS-1913163）的资助。

附录 A。VAE先验的神经网络架构

在第 3.1 节中，采用卷积神经网络（CNN）构建 VAE先验的编码器和解码器。表 A.3 展示了 VAE先验的神经网络架构，其中测试问题1-2 中潜变量的维度分别为$d = 36$ 和$d = 64$。

附录B。 物理约束代理模型的神经网络架构 l

本文采用卷积神经网络（CNN）构建物理约束代理模型。代理模型的神经网络架构列于表 B.4 中。对于达西流，损失函数（26）中的方程损失和边界损失定义如下：

$$\left\|\mathcal{R}\left(\hat{\mathcal{F}}_\theta\left(y^{(i)}\right), y^{(i)}\right)\right\|_2^2 = \left\|\nabla\cdot\tau\left(y^{(i)}\right) - h\right\|_2^2 + \left\|\tau\left(y^{(i)}\right) + \exp\left(y^{(i)}\right)\nabla u\left(y^{(i)}\right)\right\|_2^2, \tag{B.1}$$

$$\left\|\mathcal{B}\left(\hat{\mathcal{F}}_\theta\left(y^{(i)}\right)\right)\right\|_2^2 = \left\|u\left(y^{(i)}\right)\right\|_2^2 + \left\|\exp\left(y^{(i)}\right)\nabla u\left(y^{(i)}\right)\cdot\boldsymbol{n}\right\|_2^2. \tag{B.2}$$

表 A.3：测试问题1–2的 VAE先验神经网络架构。

编码器	解码器
输入：y	输入：x
批归一化	全连接层($8 * 8 * 48$, 激活函数='ReLU')
二维卷积(16,2,2,激活函数='ReLU')	重塑((48, 8, 8))
批归一化	批归一化
二维卷积(16,3,1,填充='相同',激活函数='ReLU')	二维转置卷积(64,3,2,填充='相同',激活函数='ReLU')
批归一化	批归一化
二维卷积(32,2,2,激活函数='ReLU')	二维转置卷积(64,3,1,填充='相同',激活函数='ReLU')
批归一化	批归一化
二维卷积(32,3,1,填充='相同',激活函数='ReLU')	二维转置卷积(32,3,2,填充='相同',激活函数='ReLU')
批归一化	批归一化
二维卷积(64,2,2,激活函数='ReLU')	二维转置卷积(32,3,1,填充='相同',激活函数='ReLU')
批归一化	批归一化
二维卷积(64,3,1,填充='相同',激活函数='ReLU')	二维转置卷积(16,3,2,填充='相同',激活函数='ReLU')
展平	批归一化
全连接层($2d$)	二维转置卷积(16,3,1,填充='相同',激活函数='ReLU')
输出：$\left(\mu_{en},\ \text{对数}\ \left(\sigma_{en}^2\right)\right)$	批归一化 二维转置卷积(2,3,1,填充='相同') 输出：$\left(\mu_{de},\ \text{对数}\ \left(\sigma_{de}^2\right)\right)$

此外，测试问题1–2 中的权重 β 设为 100。

表 B.4：测试问题1–2的偏微分方程代理模型的神经网络架构。

网络	特征图
输入：y	(1, 64, 64)
二维卷积	(48,2,2,激活函数=‘relu’)
二维卷积	(144,3,1,填充=‘相同’,激活函数=‘relu’)
二维卷积	(72,2,2,激活函数=‘relu’)
二维卷积	(200,3,1,填充=‘相同’,激活函数=‘ReLU’)
二维上采样	2
二维卷积	(100,3,1,填充=‘相同’,激活函数=‘ReLU’)
二维卷积	(196,3,1,填充=‘相同’,激活函数=‘ReLU’)
二维上采样	2
二维卷积	(3,3,1,填充=‘相同’,激活函数=‘ReLU’)
输出：$(u(y), \tau_1, \tau_2)$	(3, 64, 64)

参考文献

[1] Y. Efendiev、T. Hou、W. Luo，使用粗尺度模型对马尔可夫链蒙特卡罗模拟进行预条件化，SIAM科学计算杂志 28 (2)（2006年）776–803。

[2] Y. M. Marzouk、H. N. Najm、L. A. Rahn，采用随机谱方法高效求解反问题的贝叶斯解，计算物理学杂志 224 (2)（2007年）560–586。

[3] H. Wang、G. Lin、J. Li，用于故障检测的高斯过程代理模型：一种贝叶斯实验设计方法，计算物理学杂志 313（2016年）247–259。

[4] X. Huan、Y. M. Marzouk，针对非线性系统的基于仿真的最优贝叶斯实验设计，计算物理学杂志 232(1)（2013年）288–317。

[5] W. Li、G. Lin，针对多峰分布的贝叶斯反演自适应重要性采样算法，计算物理学杂志 294（2015年）173–190。

[6] C. Lieberman, K. E. Willcox, O. Ghattas，《大规模统计逆问题的参数与状态模型降阶》，《SIAM科学计算杂志》32 (5) (2010年) 2523–2542。

[7] T. Cui, K. J. Law, Y. M. Marzouk, 《维数无关的似然信息引导 MCMC》, 《计算物理学杂志》304 (2016年) 109–137。

[8] C. P. Robert, G. Casella, G. Casella, 《蒙特卡罗统计方法》, 第 2 卷, Springer, 1999年。[9] J. Li, Y. M. Marzouk, 《用于反问题贝叶斯求解的代理模型自适应构建》, 《SIAM 科学计算杂志》36 (3) (2014) A1163–A1186。

[10] T. Cui, Y. M. Marzouk, K. E. Willcox, 《用于反问题贝叶斯求解的数据驱动降阶》, 《国际数值方法工程杂志》102(5) (2015年) 966–990。

[11] L. Jiang, N. Ou, 《地下流动贝叶斯反问题的多尺度降阶方法》, 《计算与应用数学杂志》319 (2017年) 188–209。

[12] Q. Liao, J. Li, 《一种用于高维贝叶斯反问题的自适应降阶基 ANOVA 方法》, 《计算物理学杂志》396(2019年) 364–380。

[13] H. Wang, J. Li, 基于自适应高斯过程近似的昂贵似然函数贝叶斯推断, 《神经计算》30（11）（2018年）3072–3094。

[14] H. Goh, S. Sheriffdeen, J. Wittmer, T. Bui-Thanh, 通过变分自编码器求解贝叶斯反问题, 载于：数学与科学机器学习, PMLR, 2022年, 第386–425页。

[15] Y. Xia, Q. Liao, J. Li, VI-DGP：一种采用深度生成先验求解高维反问题的变分推断方法, arXiv 预印本 arXiv:2302.11173。

[16] A. Tewari, B. Wheelock, J. Clark, D. Foster, M. Li, Y. Marzouk, 基于深度地质先验的地下不确定性量化：变分贝叶斯框架, 载于：第二届应用地球科学与能源国际会议, 2022年。doi:10.1190/image2022-3750132.1。

[17] D. M. Blei、A. Kucukelbir、J. D. McAuliffe, 《变分推断：统计学家的综述》, 美国统计学会杂志 112 (518) (2017年) 859–877。

[18] A. Spantini、D. Bigoni、Y. Marzouk, 基于低维耦合的推断, 《机器学习研究杂志》19 (1) (2018年) 2639–2709。

[19] T. A. El Moselhy、Y. M. Marzouk，利用最优映射进行贝叶斯推断，《计算物理学杂志》231 (23) (2012年) 7815–7850。[20] R. T. Chen、Y. Rubanova、J. Bettencourt、D. K. Duvenaud，神经常微分方程，《神经信息处理系统进展》31。[21] L. Dinh、D. P. Kingma、S. Bengio，NICE：非线性独立成分估计，arXiv 预印本 arXiv:1410.8516。[22]L. Dinh、J. Sohl-Dickstein、S. Bengio，使用 real NVP 进行密度估计，arXiv 预印本 arXiv:1605.08803。[23] K. Tang、X. Wan、Q. Liao，基于可逆块三角映射的深度密度估计，《理论与应用力学快报》10 (3) (2020年) 143–148。[24] K. Tang、X. Wan、Q. Liao，福克-普朗克方程的自适应深度密度逼近，《计算物理学杂志》457 (2022年) 111080。[25] X. Wan、S. Wei，VAE-KRnet及其在变分贝叶斯中的应用，《计算物理通讯》31 (4) (2022年) 1049–1082。[26] Y. Xia、N. Zabaras，用于求解高维逆问题的贝叶斯多尺度深度生成模型，《计算物理学杂志》455 (2022年) 111008。[27] Z. Xu、Y. Xia、Q. Liao，一种用于贝叶斯反问题的域分解 VAE 方法，arXiv 预印本 arXiv:2301.05708。[28] D. V. Patel、D. Ray、A. A. Oberai，利用深度生成先验求解基于物理的贝叶斯逆问题，《计算机方法与应用力学和工程》400 (2022年) 115428。[29] J. Tromp、C. Tape、Q. Liu，地震层析成像、伴随方法、时间反演与香蕉甜甜圈核，《国际地球物理学杂志》160 (1) (2005) 195–216。[30] Y. Cao、S. Li、L. Petzold、R. Serban，微分代数方程的伴随灵敏度分析：伴随微分代数方程组及其数值解，《SIAM科学计算杂志》24 (3) (2003年) 1076–1089。

[31] M. Raissi，P. Perdikaris，G. E. Karniadakis，物理信息神经网络：一种用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和反问题的深度学习框架，计算物理学杂志 378 (2019) 686–707。

[32] Y. Zhu，N. Zabaras，用于代理建模和不确定性量化的贝叶斯深度卷积编码器–解码器网络，计算物理学杂志 366 (2018) 415–447。

[33] Y. Zhu，N. Zabaras，P.-S. Koutsourelakis，P. Perdikaris，无需标注数据的高维代理建模和不确定性量化的物理约束深度学习，计算物理学杂志 394 (2019) 56–81。[34] D. P. Kingma，J. Ba，Adam：一种随机优化方法，arXiv预印本 arXiv:1412.6980。[35] G. Carlier，A. Galichon，F. Santambrogio，从Knothe传输到Brenier映射及一种最优传输的延续方法，SIAM数学分析杂志 41 (6) (2010) 2554–2576。

[36] L. Bottou, F. E. Curtis, J. Nocedal，大规模机器学习的优化方法，SIAM评论60 (2)(2018年)223–311。

[37] Y. Ma, S. Soatto, J. Koˇseck´a, S. Sastry，三维视觉导论：从图像到几何模型，第26卷，Springer，2004年。[38] H. P. Langtangen, A. Logg，使用Python求解偏微分方程：FEniCS教程I，Springer Nature，2017年。[39] A. Beskos, G. Roberts, A. Stuart, J. Voss，扩散桥的马尔可夫链蒙特卡罗方法，《随机性与动力学》8 (03) (2008年) 319–350。[40] S. Cotter, G. Roberts, A. Stuart, D. White，函数的马尔可夫链蒙特卡罗方法：改进旧算法以提高速度，《统计科学》28 (3) (2013年) 424–446。