arXiv:2304.07610v1 [stat.ME] 15 Apr 2023

逆问题的贝叶斯统计方法教程

Faaiq G. Waqar[1], Swati Patel[2*]和 Cory M. Simon[3*]

[1]俄勒冈州立大学电气工程与计算机科学学院，科瓦利斯，俄勒冈州，美国。[2]俄勒冈州立大学数学系，科瓦利斯，俄勒冈州，美国。[3]俄勒冈州立大学化学、生物与环境工程学院，科瓦利斯，俄勒冈州，美国。
[*]cory.simon@oregonstate.edu, patelswa@oregonstate.edu

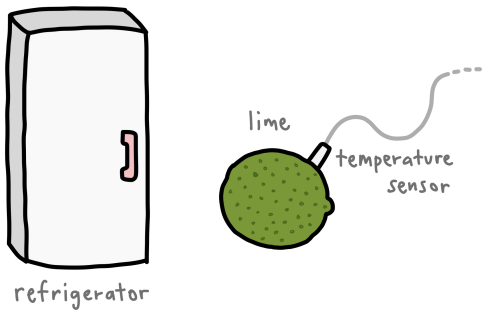
2023年4月18日

摘要

逆问题在科学与工程学领域中无处不在。关于物理系统的逆问题有两类：（1）根据观测到的输入-输出对，估计系统模型中的参数；（2）给定系统模型，重建导致某个观测输出的系统输入。应用逆问题颇具挑战，因为其解可能（i）不存在，（ii）不唯一，或（iii）对污染数据的测量噪声十分敏感。

贝叶斯统计反演（BSI）是一种解决不适定和/或条件不良逆问题的方法。BSI 的优势在于，它提供了一种“解”，能够：(i) 为未知参数/输入的每个可能取值赋予概率，从而量化不确定性；(ii) 纳入关于该参数/输入的先验信息和信念。

本文通过介绍环境空气向冷酸橙传递热量的示例，提供一篇关于将 BSI 用于逆问题的教程。首先，我们使用 BSI，根据酸橙温度随时间变化的测量值，推断酸橙温度动态模型中的一个参数。其次，我们使用 BSI，根据稍后某一时刻测得的温度，重构酸橙的初始条件。我们展示了如何纳入先验信息，直观呈现参数/初始条件的后验分布，并展示模型生成的酸橙温度轨迹的后验样本。本教程旨在面向广泛的科学家和工程师。



1 引言

1.1 物理系统的数学模型

在科学与工程领域，我们常常运用物理原理建立物理系统的数学模型，以描述某种感兴趣的现象。基于物理的模型有助于深入了解系统，解释观测结果，指导未来的实验，发现新的科学问题，并做出预测 [1]。

抽象而言，基于物理学的系统模型通常是一个算子 $f_\beta : x \mapsto y$，它 (i) 能够预测对任意给定输入 y 的输出 x，并且 (ii) 包含一个表征该系统的物理参数向量 β。参见图 1。

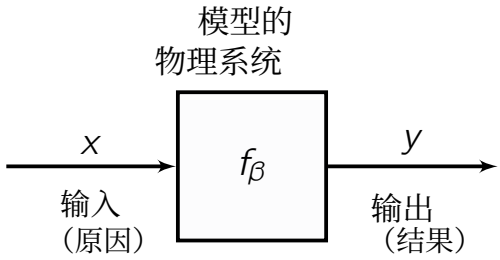


图 1：**数学模型** $y = f_\beta(x)$以 β 为参数，用于预测物理系统对输入 x的响应输出 y。

输入和输出可以是标量、向量或函数。在输入 x 处求值算子 f_β，可能包括计算函数、求解代数方程组、与矩阵相乘、求解微分方程、计算积分或运行计算机仿真。 [2, 3] 请注意，图 1 中对物理系统的抽象并不要求该系统具有质量和/或能量输入/输出；根据定义，输入仅仅是在实验开始时设定的因果因素，而输出是输入的效应/结果 [4]。

1.2 正问题

给定模型结构 $f_\beta(x)$ 及其参数 β，预测物理系统对给定输入 x 的响应输出 y，也就是预测原因所产生的结果，这就是正问题 。

正问题通过计算$f_\beta(x)$来求解。

正问题往往（但并非总是如此[1]）是适定且良态的（即具有唯一的解，且该解对问题的输入数据 x 中的误差不敏感） [6]。

[1]例如，在混沌动力系统中，未来状态对初始状态 [5] 高度敏感。

1.3 逆问题

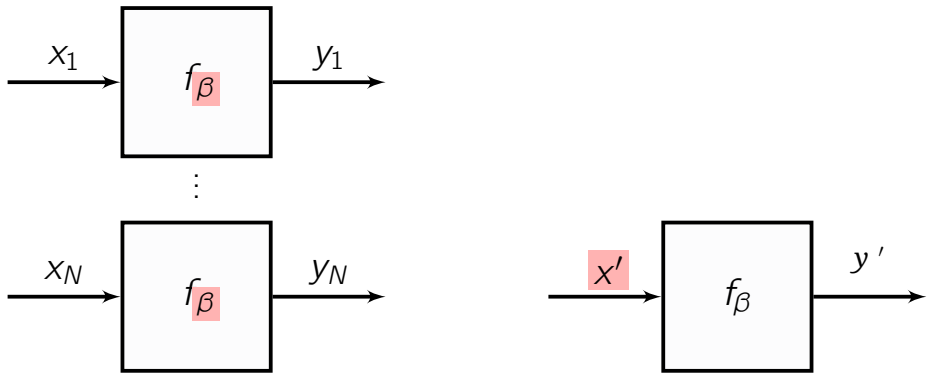
> 数学家发现很难定义“逆问题”，但大多数人在看到逆问题时都能辨认出来。
>
> *Charles W. Groetsch* [3]

逆问题逆问题 [2, 3, 7–12] 分为两类（见图 2）：

1. 参数识别 问题：确定表征某个系统的参数 β，该系统产生了一组观测输入输出对 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$。
2. 重建问题：在给定模型参数 β的情况下，确定/重建产生观测系统输出 y'的输入 x'。也就是说，预测观测到的结果所对应的原因。

逆问题	未知	data	模型结构，$f_\beta(x)$	模型参数，β
参数识别	β	$\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{N}$	✓	X
重建	x'	y'	✓	✓

(a) 摘要



(b) 参数识别问题。

(c) 重建问题。

图 2：**两类逆问题**。

逆问题在科学与工程中无处不在。参数识别通常是开发定量预测模型的一环。当我们理想中希望进行的测量难以实施、无法触及、具有侵入性、危险和／或破坏性时，就会出现重建问题；例如：(i) 使用间接测量进行传感或成像[2],(ii) 根据区域边界上的测量值推断其内部情况，以及 (iii) 时间反演：根据对系统当前状态的测量值重建其过去状态。 [2, 3]

一个著名的逆问题，即重建问题，是“人们能否通过声音听出鼓的形状？” [15–18]。

[2]一个简单的例子是，利用汞的热膨胀模型，根据温度计中汞的体积测量值推断空气的温度 [13, 14]。

能否听出鼓的形状?

假设我们在 $t = 0$ 时用鼓槌敲击鼓面。作用力会在鼓面中产生横波，横波传递到空气中，在空气中产生纵波（声音）。

将鼓面视为均匀的弹性膜，波动方程是描述该膜在位置$x \in \Omega$ 和时间$t \geq 0$处垂直位移$u(x, t)$的数学模型：

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c\Delta_x u, \quad x \in \Omega, t \geq 0 \qquad \text{wave equation} \tag{1}$$
$$u|_{\partial\Omega} = 0. \qquad \text{clamped boundary conditions}$$

参数$c > 0$ 是膜中空间均匀的张力与其密度之比；Δ_x 是拉普拉斯算子；$\Omega \subset \mathrm{R}^2$ 定义了膜的几何形状（$\partial\Omega \subset \mathrm{R}^2$ 是 Ω 的边界）。忽略阻尼。方程 1 的初始位置和速度由敲击鼓面的鼓槌设定。 [19]

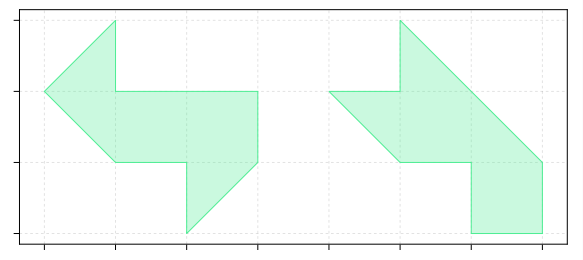
鼓面能够发出的纯音由波动方程的驻波解$e^{i\omega t}\phi(x)$决定。代入方程 1，可得鼓面纯音的频率 ω与区域Ω上拉普拉斯算子的一个特征值有关：

$$c\Delta_x \phi = -\omega^2 \phi, \quad x \in \Omega \qquad \text{an eigenvalue problem} \tag{2}$$
$$\phi|_{\partial\Omega} = 0. \qquad \text{固定边界条件}$$

根据公式 2，膜由其物理属性 c 和几何形状 Ω 表征，可以产生离散的振动频率谱 $\omega_1 \geq \omega_2 \geq \cdots$。 [15]

传统的正问题 是：给定膜的物理属性 c和几何形状 Ω，利用公式 2 确定它能够产生的振动频率谱 $\omega_1 \geq \omega_2 \geq \cdots$。在本科数学课程中，学生会针对矩形或圆形鼓面解析地求解正问题。 [20]

逆问题 是：给定膜的物理属性c 及其振动频率谱 $\omega_1 \geq \omega_2 \geq \cdots$，利用公式 2 确定其几何形状 Ω。鼓能够产生的纯音包含膜几何形状的信息；然而，这些纯音（以及c）是否能够唯一确定 膜的几何形状，并非显而易见。这个逆问题——“能否听出鼓的形状？”——由 Kac 于 1966年推广开来，但直到 1992年，Gordon、Webb 和 Wolpert 才发现了两个具有相同振动频率谱的非全等区域 [18]，如下所示。



也就是说，人们无法听出鼓的形状 [18]。

传统上，人们通过调整输入x或参数β，使模型输出与观测系统输出相匹配，例如通过最小二乘法 [21,22],，以确保模型与数据 [23]保持一致。

1.3.1 应用逆问题中的挑战

与理论上的精确逆问题不同，在应用逆问题中， [24], 我们必须应对污染系统输出测量值的噪声。这些噪声可能源于：(i) 测量仪器不完善，和/或 (ii) 对重复输入作出响应时，系统输出存在方差，这是由于 (a) 固有的随机性，和/或 (b) 未被识别或未得到妥善控制、因而未纳入模型的输入/条件影响了输出。此外，模型$f_\beta(x)$可能无法充分近似物理现实——这或许部分归因于 (ii)b。 [23]

应用逆问题尤其有趣且具有挑战性，因为与正问题不同，它们往往是不适定和/或病态的 [6, 25]；应用逆问题的解：

- 可能不存在，原因是测量输出中存在噪声且模型失配。

  – 在重建问题中，观测输出可能落在f_β的像之外，因此不存在与之相符的物理可行输入。– 在参数识别中，可能不存在这样的参数β，使模型$f_\beta(x)$能够重现所有观测输入-输出对。

- 可能并不唯一。

  – 在重建问题中，由于存在多对一的f_β，许多不同的输入都可能与观测到的输出相符。– 在参数识别中，（i）观测到的输入-输出对数量可能不足以对参数施加充分约束；或者（ii）模型本质上不可辨识（即无论有多少数据，都无法对参数施加充分约束） [25–27]。

- 可能不连续地依赖于测量噪声，或对污染数据的测量噪声十分敏感。即使逆问题的解存在且唯一，污染系统输出测量值的噪声也会传播到逆问题的解中并使其失真。在条件不良的逆问题中， [14], 数据中的微小噪声实现值会导致解发生巨大变化。

要应对应用逆问题，这些挑战促使我们考虑污染输出测量值的噪声，重新审视我们对“解”的理解，并量化解中的不确定性 [28, 29]。

1.4 贝叶斯统计反演（BSI）

贝叶斯统计反演（BSI） [13, 29–34] 是一种灵活的框架，可用于解决 [可能] 不适定和/或病态的应用逆问题。BSI 有两项关键优势。首先，BSI

使我们能够将关于输入/参数的先验信息（即收集数据之前的信息）和/或信念纳入逆问题的解中。其次，BSI 能为逆问题提供概率解，并量化输入/参数的不确定性。

📖 *BSI* 的重要参考文献： [13, 35]。

不确定性建模。 为了对未知输入/参数的不确定性进行建模，我们将其视为随机变量，并对其概率分布进行建模。在这种贝叶斯观点下，赋予输入/参数空间中各个区域的概率，反映了我们认为输入/参数落在相应区域内的可信程度。这种判断基于主观信念与客观信息的某种结合。 [36, 37] 宽泛地说，概率密度在输入/参数空间中的分布范围（集中程度）反映了我们对其取值的不确定性（确定性）。

先验分布与后验分布。 在进行实验、收集数据并将这些数据与模型进行比较之前和之后，我们对输入/参数的不确定性有所不同。因此，在考虑数据之前，输入/参数具有 先验 密度；而在数据为我们提供新的认识之后，它具有更新后的 后验 密度。

对数据生成过程建模。 为了承认污染测量值的不可观测噪声，我们将对系统输出的测量结果（即数据）视为随机变量的实现值。将（i）系统的数学模型 $f_\theta(x)$ 与（ii）噪声概率分布模型相结合，即可得到随机数据生成过程的模型。

BSI 的两个要素。使用 BSI 处理逆问题的两个关键要素是：

1. 输入/参数的先验分布，表达我们在收集/观测数据之前对它的认知。先验的构建取决于具体情境，并带有一定程度的主观性。根据对输入/参数的不确定性所允许的程度，先验大致可分为弥散型、弱信息型或信息型 [38], 。信息型先验（例如方差较小的高斯分布）表达了对输入/参数高度确定的认知。另一方面，弥散型先验（例如均匀分布）会将其密度广泛分布于输入/参数空间，以表达极高程度的不确定性。 [38]与弥散型先验相比，信息型先验对后验的影响更大；弥散型先验则“让数据自行说明” [39]。通常，随着我们收集到更多数据，先验对后验的影响往往会减弱（但在不可辨识系统中不会如此 [26]），因为数据会逐渐取代 / 压过先验。

2. 输入/参数的 似然函数，给出在输入/参数取每个值的条件下数据的概率密度。似然函数由以下部分构成：(i) 数据；(ii) 我们对数据生成过程的模型，其中包括 (a) 正向模型，以及 (b) 用于对测量值中噪声进行建模的概率分布

。似然量化了数据对未知输入/参数各个取值的支持度。 [38]

有了这两个要素，接下来我们就可以“运转贝叶斯流程” [40] ，得到未知输入/参数的后验分布。

逆问题的 BSI 解。逆问题的 BSI“解”，即未知输入/参数的后验分布，可根据输入/参数的先验密度和似然函数，通过贝叶斯定理得出。未知输入/参数的后验密度给出了在给定数据的条件下，输入/参数落在参数空间中任意给定区域内的概率。后验分布根据数据更新先验，在先验和似然之间取得折衷；其离散程度反映了输入/参数的不确定性，因此构成了逆问题的原始解。 [28] 实践中，通常会使用某种推断引擎（例如马尔可夫链蒙特卡罗采样）来近似后验分布 [40]。我们可以用可信区域（例如最高密度区域 [41]）来概括输入/参数的后验分布。该区域包含后验密度中的一个较大比例 α ，因而可以有充分依据地认为输入/参数位于其中（前提是似然和先验中的假设成立；精确而言，其概率为 α） [42]。请注意，参数/输入的贝叶斯可信区间不同于频率学派置信区间，而且可以说更直观、更自然 [43]。

1.5 我们的贡献：通过热传递逆问题示例介绍 BSI

我们通过教程介绍如何运用 BSI 求解参数识别和重建这两类逆问题，同时纳入先验信息并量化不确定性。本教程通过一个简单直观的物理过程举例说明：环境空气向冷酸橙的对流传热。我们希望吸引各领域的科学家和工程师。

在第 2.1 节中，我们介绍实验装置：(i) 将冷的酸橙从冰箱中取出，使其通过自然对流与室内空气进行热交换；(ii) 插入酸橙中的探针测量其内部温度。在第2.2节中，我们基于牛顿冷却定律，提出一个支配酸橙温度时间演化的数学模型。该模型包含一个参数。为描述数据生成过程，在第 2.3 节中，我们在该模型的基础上加入一个概率模型，用于描述使用不完美的温度探针对酸橙温度进行含噪测量的过程。接下来，在第 2.4 节中，我们使用酸橙温度的时间序列数据，采用 BSI 推断酸橙温度动态模型中的参数（一个超定逆问题）。随后，我们使用带有推断参数的酸橙温度模型处理两个时间反演问题：（第 2.5 节，病态）已知酸橙当前温度的测量值及其离开冰箱的时间，重建酸橙的初始温度；以及（第 2.6 节，欠定）已知酸橙当前温度的测量值，重建酸橙的初始温度和离开冰箱的持续时间。在 BSI 下，每个逆问题的解通过参数/初始条件的后验概率密度表达不确定性。我们通过与 BSI 程序中留出的实测初始条件进行比较，评估该

重建问题解的准确性。通过这些具体且具有启发性的示例，我们希望读者能够在自己的研究领域中识别出可采用 BSI 的逆问题，从而纳入先验信息并量化不确定性。

2 贝叶斯统计反演（BSI）教程

作为一篇介绍如何运用 BSI 求解逆问题、同时纳入先验信息并量化不确定性的教程，我们将探讨一系列与环境空气通过自然对流和酸橙之间发生的热交换有关的逆问题。

2.1 实验装置：酸橙与空气之间的热交换

我们将一个酸橙（直径 ~5 厘米）放在冰箱里数日。随后，在时间 $t := t_0$ [分钟], ，我们将酸橙从冰箱中取出，放在一块薄薄的隔热泡沫塑料板上，让它通过自然对流与室内空气进行热交换。插入酸橙中的电阻式温度传感器[3] 可让我们测量任意时间 t 的内部温度，从而生成一个数据点（t, θ_{obs}）（“obs” = 表示观测值）。图 3 展示了我们的实验装置，第 S1.1 节介绍了温度传感器和 Arduino 微控制器装置。

2.2 酸橙温度的数学模型

我们建立一个数学模型，用于描述酸橙温度 $\theta = \theta(t)$ [°C], 随时间$t \geq t_0$ [分钟], 变化的规律；在此过程中，酸橙与主体温度为 θ^{air} [°C]的环境空气浴（即远离酸橙处的空气）交换热量。酸橙与空气之间的热传递机制为自然对流，其结果 [44]是两种作用的共同影响：(i) 热传导，以及 (ii) 空气运动将热量传递到酸橙附近；空气运动由空气温度变化导致密度变化所产生的浮力驱动 [45]。酸橙的初始温度为$\theta(t_0) =: \theta_{0}$。

假设。我们采用了几项简化假设：

- 酸橙的温度在空间上均匀[4]
- 空气浴的主体温度 $\theta_{\text{空气}}$保持恒定（在距离酸橙足够远处）
- 酸橙与其放置的泡沫塑料表面之间的热传导可以忽略不计 e

[3]为避免早期数据反映温度探针因自身热容量不为零而与酸橙达到热平衡时的 [短] 时间温度动态，我们在将酸橙放入冰箱之前，先将探针插入酸橙中，使探针从一开始就与酸橙处于热平衡状态。[4]根据以下数据，我们估算毕奥数 [44] 为 $\text{Bi} := hr/k \approx 0.6$：(i) 测得酸橙半径$r \approx 2.5$ cm；(ii) 文献报道的酸橙热导率$k \approx 0.595$ J/(s·m·°C) [46], ；(iii) 估算的气体自然对流传热系数$h \approx 15$ J/(s·m^2·°C) [44, 47]。

系统：一个酸橙
过程：通过自然对流进行热传递
测量仪器：一支温度探针
一个数据点：（t，θ_{obs}）

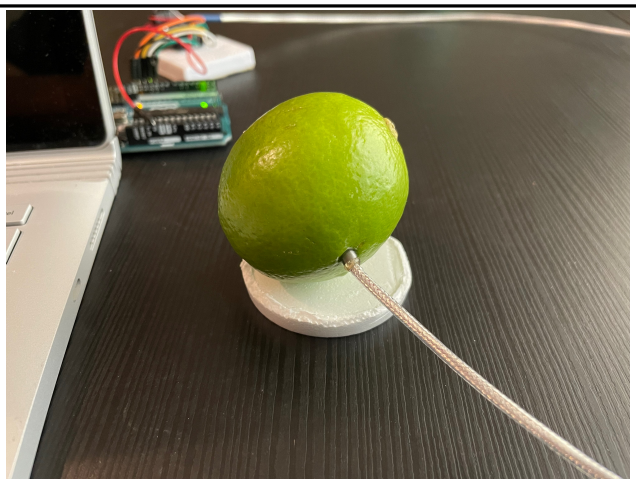


图3：**实验装置**。一颗最初温度较低的酸橙放在泡沫塑料板上，并通过自然对流与室内空气进行热交换。插入酸橙中的温度传感器可以测量其在任意时间t的内部温度，从而得到一个数据点（t，θ_{obs}）。

- 酸橙的质量保持不变（例如，水分随时间流失可以忽略不计）
- 酸橙的热容不随温度变化
- 化学反应（例如氧化）释放或消耗的热量可以忽略不计
- 插入酸橙中的温度探针，其热容量可以忽略不计
- 空气与酸橙之间的热交换速率遵循牛顿冷却定律

牛顿冷却定律。牛顿冷却定律 [48–51] 规定了热传递速率 [J/min] 在时间$t \geq t_0$ 时空气向酸橙传递的热量与酸橙和空气之间的温差（即该时刻热传递的热力学驱动力）成正比：

$$\text{rate of heat transfer from air to lime} \propto \theta^{\text{air}} - \theta(t). \tag{3}$$

确切的速率，$hA[\theta^{\text{air}} - \theta(t)]$, 取决于两个（假定为常数的）参数：(i) 酸橙与空气接触的表面积，A [cm^2]；(ii) 空气与酸橙表面之间的 [自然] 对流传热系数，h [J/(°C·min·cm^2)]，[44]。

微分方程模型。对酸橙应用能量守恒，可得其温度变化 $\mathrm{d}\theta = \mathrm{d}\theta(t)$ 对应于时间的微分变化 $\mathrm{d}t$：

$$C\mathrm{d}\theta(t) = hA[\theta^{\text{air}} - \theta(t)]\mathrm{d}t \quad \text{for } t \geq t_0, \tag{4}$$

其中 C [J/°C] 是酸橙的热容量。方程 4 平衡了时间区间 $[t, t + dt)$ 内储存在酸橙中的显热量 [J]（左侧）和传递给酸橙的热量 [J]（右侧）。因此，酸橙温度的时间演化可用一个一阶微分方程描述 [48, 49]:

$$\lambda \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \theta^{\text{air}} - \theta(t) \quad \text{for } t \geq t_0 \qquad (5)$$
$$\theta(t = t_0) = \theta_0.$$

模型中唯一的集总参数 $\lambda := C/(hA)$ [分钟] 是一个时间常数，它决定了酸橙与空气之间热传递的动态过程。

模型的解析解。通过变量变换再积分，可以得到方程 5 的解析解:

$$\theta(t) = \theta^{\text{air}} + (\theta_0 - \theta^{\text{air}})e^{-(t-t_0)/\lambda}, \quad \text{for } t \geq t_0. \qquad (6)$$

从 θ_0 开始，随着酸橙与空气之间的温差呈指数衰减，酸橙温度 $\theta(t)$ 单调趋近于空气温度（$\lim_{t\to\infty} \theta(t) = \theta^{\text{air}}$）。参数 λ 表示酸橙与空气达到热平衡所需的时间尺度。具体而言，酸橙从冰箱取出持续时间 $t - t_0 = \lambda$ 后，其温度将达到空气温度方向上 63% 的位置，即 $e^{-1} \approx 0.63$。

图 4 展示了酸橙温度模型的解，我们将其写作$\theta(t; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})$，以强调其对参数 λ、初始条件 (t_0, θ_0) 以及空气温度 θ^{air} 的依赖关系。

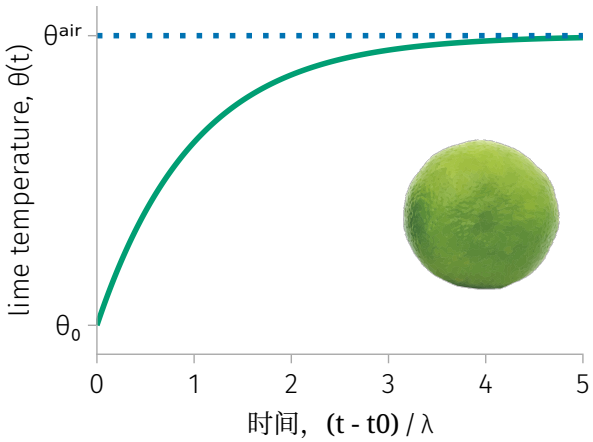


图4：**石灰温度数学模型的解**，θ（t； λ， t_0， θ_0， θ^{air}）。

2.3 数据生成过程的概率模型

设想使用我们的温度探针这一不完美的测量仪器，在时间t测量石灰温度，从而得到一个数据点（t, θ_{obs}）。

我们将测得的温度 θ_{obs} 视为随机变量 Θ_{obs} 的一次实现，这是由两个随机性来源造成的。首先是测量噪声：温度探针产生的不可观测噪声会干扰测量。其次是残差变异：在条件相同的重复实验中（$t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}}$），时间$t$ 的石灰温度可能会因控制不佳或未被识别、因而未纳入模型 $\theta(t)$ [23]的条件或输入发生变化而呈现方差。例如，(i) 空气温度 θ^{air} 并未得到完全控制，可能会随时间波动；(ii) 建筑物门的开关可能会在房间内引发变化的气流，使传热系数h 随时间变化。

我们将观测到的酸橙温度中的噪声建模为随机变量 E_σ ，它是模型预测的加性项，在重复测量之间相互独立，并且随时间具有相同的分布。于是，数据生成过程的概率模型为：

$$\Theta_{\text{obs}} = \theta(t; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}}) + E_\sigma, \tag{7}$$

其中，E_σ 是均值为零、方差为 σ^2 的高斯分布：

$$E_\sigma \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2). \tag{8}$$

公式 7 假设温度探针与酸橙达到热平衡所需的时间尺度可忽略不计，因此不会产生时间延迟。

随机变量 E_σ 可以捕捉来自测量仪器的噪声和残差变异。然而，公式 7 假设，在相同条件（$t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}}$）下重复实验时，时间 t 测得的酸橙温度的均值由模型$\theta(t; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})$ 给出。也就是说，我们的数据生成模型忽略了模型偏差的可能性。模型偏差是指：(a) 在相同条件（$t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}}$）下多次实验中，时间 t 测得的酸橙温度期望值，与 (b) 酸橙温度的模型预测值 $\theta(t; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})$ 之间的非零差异。 [23]

根据公式 7，在给定 $\lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma$ 的情况下，时刻 t 测得的酸橙温度 Θ_{obs} 的概率密度函数由公式 8 中噪声的密度平移得到，使其中心位于模型预测值：

$$\pi_{\text{likelihood}}(\theta_{\text{obs}} \mid \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta_{\text{obs}} - \theta(t; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})}{\sigma}\right)^2\right]. \tag{9}$$

2.4 逆问题 I：参数识别

问题与方法概述

任务：使用 BSI，根据热传递实验的数据，推断表征石灰的参数 Λ （即，将 λ 视为随机变量），该参数出现在式 6 的石灰温度模型中。

首先，我们通过粗略估算得出 λ，并利用该估算为 Λ 构建弱信息先验分布。

为了纳入我们对数据生成过程模型（公式 7）中测量噪声方差的不确定性，我们将 Σ^2 视为一个未知参数，并从数据中推断该参数。我们对 Σ^2施加弥散先验分布，其支持度依据温度探针的噪声特性确定。

接下来，我们进行热传递实验并收集数据（见第 2.1 节）。用于界定实验条件的测量值包括：(i) 石灰的初始温度，对应数据（$t_0 = 0, \theta_{0,\text{obs}}$）；以及 (ii) 空气温度，对应数据 $\theta^{\text{air}}_{\text{obs}}$。为了将这些测量值视为含噪测量，我们将石灰的初始温度 Θ_0 和空气温度 Θ^{air} 视为从数据中推断的随机变量，但根据这些测量值对它们施加信息性先验分布。在实验过程中，我们测量石灰温度，得到时间序列数据 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^N$，这些数据提供了关于 Λ的信息。

最后，我们利用贝叶斯定理，根据数据构建 (Λ、Θ_0、Θ^{air}、Σ) 的后验分布，使用马尔可夫链蒙特卡罗算法从中抽样，并计算参数 Λ 的可信区间，以量化其取值的后验不确定性。

快速概览:

- 数据：酸橙的初始温度测量值 ($t_0 = 0$，$\theta_{0,\text{观测}}$)、空气温度 θ_{airobs}，以及实验过程中酸橙温度的测量值 $\{(ti,\ \theta i,\text{观测})\}Ni=1$
- 根据数据推断的随机变量：参数 Λ、酸橙初始温度 Θ_0、空气温度 Θ_{air}、测量噪声方差 Σ^2
- 先验来源：Λ：粗略估算；Θ_0、Θ_{air}：对它们的含噪测量；Σ^2：温度传感器的精度

结果摘要：见图 5。

经典而言，这个逆问题是超定的，因为不存在一个参数 λ 能够给出一个模型$\theta(t; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})$，使其通过所有数据点 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^N$。

2.4.1 先验分布

在考虑数据 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^N$ 之前，在 BSI 中，我们必须通过先验概率密度函数表达对每个变量取值的先验信念和信息。

该参数， Λ。对 $\lambda = C/(hA)$ 进行粗略估算，结果为 ≈ 1 小时，依据如下。将酸橙近似为球体，其直径为 ~5厘米。酸橙的质量

[5]注意，我们并非试图根据数据 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^N$ 分别确定公式 4 中的每个 C、h 和 A，而是要确定集总参数 $\lambda := C/(hA)$。前一种做法会使系统变得不可辨识，因为任何能给出相同 λ 的 (C, h, A) 都会产生相同的模型 $\theta(t)$。

为 $\sim$100 g。酸橙的比热容报告为 $\sim$4.0 kJ/[kg·°C] [46, 52]。气体自然对流的典型传热系数 h 为 15 J/[s·m^{2}·°C] [44, 47]。

我们将弱信息先验密度 $\pi_{\text{prior}}(\lambda)$ 指定为一个高斯分布的密度，该高斯分布：(i) 以我们粗略估算的 λ 为中心；(ii) 方差较大，以反映我们对这一粗略估算信心不足；(iii) 截断于零以下，以确保其为正：

$$\Lambda \sim \mathcal{N}_{>0}\left(1\ \text{hr}, (0.3\ \text{hr})^2\right). \tag{10}$$

见图 5b。

实验条件， Θ_0 **和** Θ^{air}。根据对初始酸橙温度的（含噪）测量值，我们为其设定信息性先验分布 Θ_0，并为空气温度 Θ^{air} 设定信息性先验分布：

$$\Theta_0 \sim \mathcal{N}(\theta_{0,\text{obs}}, \sigma^2) \tag{11}$$
$$\Theta^{\text{air}} \sim \mathcal{N}(\theta^{\text{air}}_{\text{obs}}, \sigma^2). \tag{12}$$

测量噪声的方差， Σ^2。我们对测量噪声标准差的先验分布反映了我们对温度探针精度的判断，其形式为

$$\Sigma \sim \mathcal{U}([0\,^\circ\text{C}, 1\,^\circ\text{C}]), \tag{13}$$

其中，$\mathcal{U}(\cdot)$ 表示区间 $\cdot$ 上的均匀分布。

联合先验分布。由于我们采用了独立先验，对应于合理的假设，因此该逆问题中所有未知量的联合先验分布可以分解，其中包括参数 λ（酸橙的）与空气温度之间不存在因果联系这一假设。

$$\pi_{\text{prior}}(\lambda, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma) = \pi_{\text{prior}}(\lambda)\pi_{\text{prior}}(\theta_0)\pi_{\text{prior}}(\theta^{\text{air}})\pi_{\text{prior}}(\sigma). \tag{14}$$

💡 先验分布 $\pi_{\text{prior}}(\lambda, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma)$ 总结了在当前阶段、考虑数据 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^{N}$ 之前，我们对未知量（λ，θ_0，θ^{air}，σ）所拥有的信息和信念。

2.4.2 数据和似然函数

数据。 热传递实验的数据如图 5a 所示：

- 酸橙的初始条件（$t_0 = 0$，$\theta_{0,\text{观测}}$）
- 空气温度 θ_{airobs}
- 实验过程中石灰的温度 $\{(t_i, \theta_{i,\text{观测}})\}_{Ni=1}$。

似然函数。似然函数给出了数据$\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^N$在参数 $\Lambda = \lambda$和 $\Sigma = \sigma$以及实验条件 $\Theta_0 = \theta_0$和 $\Theta^{\text{air}} = \theta^{\text{air}}$各个可能取值条件下的概率密度。我们根据 (i) 数据 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^N$ 和 (ii) 第 9 式中的数据生成过程模型构造似然函数。似然函数为：

$$\pi_{\text{likelihood}}(\theta_{1,\text{obs}}, \ldots, \theta_{N,\text{obs}} \mid \lambda, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma) \propto \prod_{i=1}^{N} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta_{i,\text{obs}} - \theta(t_i; \lambda, t_0 = 0, \theta_0, \theta^{\text{air}})}{\sigma}\right)^2\right]. \tag{15}$$

似然之所以可以分解，是因为我们将测量噪声E_σ建模为一个独立随机变量。请注意，实际上，似然也以模型结构为条件。

💡 由于此时我们已拥有数据$\{(t_i,\ \theta_{i,\ \text{obs}})\}_{i=1}^N$，因此我们（i）将似然视为未知量（$\lambda$，$\theta_0$，$\theta^{\text{air}}$，$\sigma$）的函数，并且（ii）将其解释为数据$\{(t_i,\ \theta_{i,\ \text{obs}})\}_{i=1}^N$对未知量的每个取值（$\lambda$，$\theta_0$，$\theta^{\text{air}}$，$\sigma$）所提供支持度的度量。 [38]

2.4.3 后验分布

（联合）后验密度决定了在给定时间序列数据$\{(t_i,\ \theta_{i,\ \text{obs}})\}_{i=1}^N$的条件下，未知量（$\Lambda$，$\Theta_0$，$\Theta^{\text{air}}$，$\Sigma$）的概率分布。根据贝叶斯定理 [42]，，后验密度与似然函数和先验密度的乘积成正比：

$$\pi_{\text{posterior}}(\lambda, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma \mid \theta_{1,\text{obs}}, \ldots, \theta_{N,\text{obs}}) \propto \pi_{\text{likelihood}}(\theta_{1,\text{obs}}, \ldots, \theta_{N,\text{obs}} \mid \lambda, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma)\pi_{\text{prior}}(\lambda, \theta_0, \theta^{\text{air}}, \sigma). \tag{16}$$

请注意，由于我们将采用马尔可夫链蒙特卡罗算法从后验分布中采样，并通过经验方式对其进行近似，因此无需知道归一化因子；这些采样器只需要后验密度的比值。

我们尤其关注参数 Λ 的后验分布，其中 (Θ_0，Θ^{air}，Σ) 已边缘化。

💡 未知量 $\pi_{\text{posterior}}$(λ，θ_0，θ^{air}，$\sigma \mid \theta_{1,\ \text{obs}}$，……，$\theta_{N,\ \text{obs}}$) 的后验密度　　：

- 是这个参数辨识问题的原始解，因为它为 (λ，θ_0，$\theta_{\text{空气}}$，σ) 空间中的每个区域赋予一个概率，以反映我们相信未知量 (λ，θ_0，$\theta_{\text{空气}}$，σ) 落在该区域内的后验程度。

- 表示根据数据 $\{(t_i,\ \theta_{i,\ \text{观测}})\}_{Ni=1}$ 对我们的先验密度 $\pi_{\text{先验}}$(λ，θ_0，$\theta_{\text{空气}}$，σ) 的更新。

- 体现了以下两者之间的折中：(i) 我们关于（$\lambda, \theta_0, \theta_{\text{空气}}, \sigma$）的先验知识和信念，以及 (ii) 根据我们对数据生成过程的模型，数据$\{(t_i,\ \theta_{i,\text{观测}})\}_{Ni=1}$对（$\lambda, \theta_0, \theta_{\text{空气}}, \sigma$）提供的支持度。

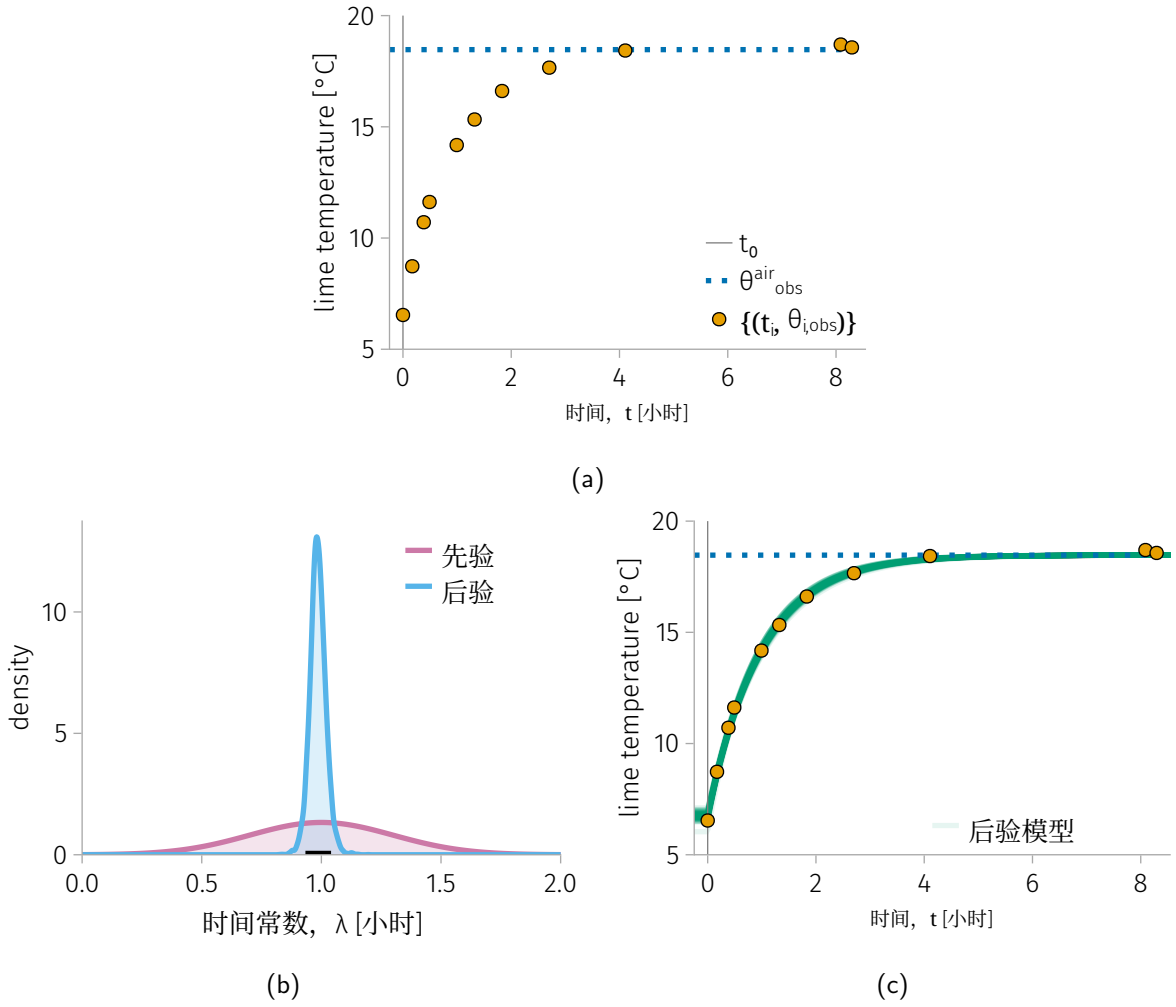


图5：逆问题 I：参数识别：根据实验条件的测量值 $(t_0 = 0, \theta_{0,obs})$ 和 θ^{air}_{obs}，以及石灰温度的时间序列数据 $\{(t_i, \theta_{i,obs})\}_{i=1}^{N}$，推断石灰温度模型 $\theta(t; \lambda, t0, \theta_0, \theta^{air})$ 中的参数 Λ。(a) 数据。(b) Λ 的先验分布和后验分布。黑色条表示 Λ 的等尾90%后验可信区间。(c) 100 条模型轨迹 $\theta(t; \lambda, t_0 = 0, \theta_0, \theta^{air})$ 的样本，其中 $(\lambda, \theta_0, \theta^{air})$ 从后验中抽样得到。

关于后验不确定性来源的说明： $\wedge$。即使考虑了数据 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^{N}$，关于 Λ 的不确定性仍然存在。这种后验不确定性的来源，是数据不足（N较小），加上我们的数据生成过程模型（见公式 7 [23]）所涵盖的两种噪声原因：(i) 石灰温度测量值受到使用不完美温度传感器所产生的[不可观测] 噪声的干扰；(ii) 未被识别和/或控制不佳的输入/条件会影响石灰温度，并且在实验过程中发生变化。然而，我们的后验分布并未涵盖以下因素导致的不确定性：(i) 残差变异：未被识别和/或控制不佳的输入/条件会影响石灰温度，并且在不同实验之间发生变化（因为我们只进行了一次实验）；或 (ii) 模型失配：当 $\theta(t)$无法如实预测在相同条件下进行多次实验时，测得的石灰温度的期望值 $(t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})$（这或许部分归因于 (i)）时，就会引入偏差。

从后验中采样。我们采用马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）算法——无转向采样器（NUTS） [53] ，其实现位于 `Turing.jl` [54] Julia 中 [55], ，以获取式（16）中联合后验分布的样本，从而（i）使用核密度估计以经验分布近似该分布，并（ii）计算未知量的均值和可信区间。我们运行四条独立链，共收集 2 500 个样本/链，其中前一半作为预热期而舍弃。

马尔可夫 从后验分布中进行链式蒙特卡罗（MCMC）采样

在通过 BSI 进行参数推断的一般情形下，令

- $U \in \mathbb{R}^K$ 表示逆问题中的K 个未知参数组成的随机向量
- $d \in \mathbb{R}^N$ 表示含噪测量值/观测的数据向量。

U 的后验密度由贝叶斯定理 [42]得出：

$$\pi(u) := \pi_{\text{posterior}}(u \mid d) = \frac{\pi_{\text{likelihood}}(d \mid u)\pi_{\text{prior}}(u)}{\pi_{\text{evidence}}(d)}. \tag{17}$$

分母，即证据，是数据的概率密度——一个作为分子归一化因子的常数：

$$\pi_{\text{evidence}}(d) = \int \pi_{\text{likelihood}}(d \mid u)\pi_{\text{prior}}(u)du. \tag{18}$$

通常，我们无法解析地计算这个K维积分。如果K 很大，那么也可能难以使用数值求积来近似 $\pi_{\text{evidence}}(d)$。计算后验均值，或边缘化掉一部分我们较不关注的未知量时，也可能遇到同样的积分难题。 [40]

MCMC方法使我们能够从后验密度 $\pi(u)$ 中获取样本 $u_1, \ldots, u_n$，而只需知道一个与其成比例 的函数（如公式 16 所示）。这避免了计算 $\pi_{\text{evidence}}(d)$ 的需要。利用样本 $u_1, \ldots, u_n$，我们可以 (i) 使用核密度估计 [56] 构造经验后验分布，以及 (ii) 近似 (a) 后验均值（以样本均值估计），

以及 (b) 根据某个未知量的样本百分位数，近似该未知量的等尾可信区间。请注意，只需忽略抽样向量中其余的维度，就可以轻松构造一组未知量的经验边缘后验分布。

MCMC方法的核心思想是：（i）构造一条马尔可夫链$U_1, U_2, \ldots$，使得（a）其状态空间为参数空间，并且（b）支配从一个状态u转移到另一个状态u'的概率的转移核赋予该链一个与后验分布$\pi(u)$相等的平稳分布；然后（ii）模拟该马尔可夫链，得到一组实现$u_1, \ldots, u_n$，并将其视为来自$\pi(u)$的（序列相关）样本。[38, 40, 57, 58]

或许最容易理解的MCMC模拟算法是随机游走Metropolis算法[40, 57]。这里，通过迭代执行“提议，然后接受或拒绝”的随机过程n次，得到马尔可夫链$U_1, \ldots, U_n$的一组实现$u_1, \ldots, u_n$。假设u是链的当前状态。我们提议转移到一个新状态u'，该状态根据从u出发的各向同性随机游走随机选取。也就是说，提议的新状态是一个随机变量$U' = u + \Delta U$，其中$\Delta U \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$。我们以如下概率接受这一提议的状态转移

$$\min\left[1, \frac{\pi(u')}{\pi(u)}\right] \tag{19}$$

否则就拒绝该提议，并停留在u。这条规则（i）总是接受“上坡”移动，即移动到密度高于u的状态u'；（ii）偶尔也接受“下坡”移动。请注意，该规则只需要两个状态的密度之比。因此，归一化因子会抵消，无需计算$\pi_{\text{evidence}}(u)$。提议分布与接受规则共同确定了转移核$\pi(u' \mid u)$，使马尔可夫链$U_1, U_2, \ldots$具有等于$\pi(u)$的平稳密度。因此，$u_1, \ldots, u_n$是从后验$\pi(u)$中抽取的序列相关样本。[40] 随机游走提议分布中的尺度参数σ决定了采样效率，具体体现在样本的序列相关性上。如果σ太小，就需要进行过多的随机游走步进才能探索状态空间。如果σ太大，就会有过多提议落在密度较低的区域而被拒绝，导致采样过程停留在原地。这两种极端情况都会降低采样器的效率。[57, 59]

NUTS [53], 是哈密顿蒙特卡罗（HMC）的扩展 [60], ，由于其提议方案比在状态空间中进行随机游走更为智能，因此它比随机游走Metropolis算法更高效。

2.4.4 结果摘要

图5a展示了热传递实验的全部数据，我们利用这些数据通过BSI推断参数Λ。

🚀 图5b对比了（i）参数Λ的先验分布与（ii）通过核密度估计构建的、经过更新的（边际）经验后验分布。该条形表示Λ、[0等尾*90%*后验可信区间。94小时，1。01小时]。根据定义，酸橙的真实参数λ以90%的概率位于此区间内，以5%的概率低于该区间，

以5%的概率高于该区间。因此，区间的宽度反映了我们对 Λ 的后验不确定性。这种解释以我们的数据生成过程模型和先验假设成立为前提。

图5c展示了函数 $\theta(t)$ 的后验分布，该函数用于建模酸橙温度。图中给出了酸橙温度模型的100个随机实现值样本， $\theta(t;\lambda, t0\ \theta_0\ \theta^{\text{air}}$ $\lambda\ \theta_0\ \theta^{\text{air}}$,,)，其中 (,,) 是从后验分布中抽取的样本。这些模型对数据 $\{(t_i, \theta_{i,\text{obs}})\}_{i=1}^{N}$ 拟合良好，且方差很小（见图S3中的残差图；酸橙温度的平均后验模型与每个数据点的偏差均在 ± 0.25°C 以内），这表明根据数据，对参数 λ 的不确定性很低。

我们发现，在联合后验分布中， Λ 与 Σ 之间的相关性很低（皮尔逊相关系数为 0.01）。 Λ 和 Σ 的（边缘）后验分布可很好地近似为相互独立的高斯分布 $\mathcal{N}(0.98\text{ 小时}, (0.02\text{ 小时})^2)$ 和 $\mathcal{N}(0.16°\text{C}, (0.03°\text{C})^2)$。

为评估 MCMC采样器的效率，并确保马尔可夫链蒙特卡罗样本能够可靠地近似后验分布 [58], ，我们绘制了轨迹图，并将四条独立链的经验分布可视化。见图S2。

2.5 逆问题IIa：时间反演

问题与方法概述

任务：使用 BSI 推断酸橙的初始（$t_0 = 0$）温度 Θ_0 （即， θ_0 将其视为随机变量），依据的是在时间 $t' > t_0$ 时对其温度的测量 θ'_{obs}，以及测得的空气温度 $\theta^{\text{air}}_{\text{obs}}$。

首先，我们根据冰箱中常见的温度范围，为 Θ_0 设定一个弥散先验分布。

其次，我们根据第 2.4 节参数识别活动所得的后验分布，为表征酸橙的参数 Λ 和测量噪声的方差 Σ^2 设定信息性先验分布。“昨日的后验就是今日的先验。” [61]

接下来，我们对同一个酸橙再进行一次热传递实验（见第 2.1 节）。用于确定实验条件的测量值是测得的空气温度 $\theta^{\text{air}}_{\text{obs}}$。为了（间接）获取有关 Θ_0 的信息，我们在时间 t' 测量酸橙的温度，即将其从冰箱取出 t' 后的持续时间，此时测得的温度为 θ'_{obs}。

最后，我们根据数据利用贝叶斯定理构建 $(\Theta_0, \Lambda, \Theta^{\text{air}}, \Sigma)$ 的后验分布，使用马尔可夫链蒙特卡罗算法从中采样，并得出初始青柠温度 Θ_0 的可信区间，以量化其数值的后验不确定性。

请注意，我们还测量了酸橙的初始温度，但为了检验 Θ_0 后验分布的保真度，我们在 BSI 程序中排除了这些数据（$t_0 = 0$， $\theta_{0,\ \text{obs}}$）。

快速概览：

- 数据：测得的空气温度 $\theta_{\text{空气观测值}}$ 和石灰温度（t'， $\theta'_{\text{观测}}$），其中 $t' > t_0 = 0$。
- 根据数据推断的随机变量：</*style*}酸橙初始温度 、参数、空气温度 空气以及测量噪声的方差 Σ^2
- 先验来源： Θ_0：冰箱中遇到的温度范围； Λ， Σ^2：我们在第 2.4 节的参数识别活动中得到的后验； $\Theta_{\text{空气}}$：我们对空气温度的含噪测量。

结果摘要：请参见图6和图7。

从经典角度看，这是一个确定性的时间反演问题，当t'较大时会变得病态。为了解病态条件，令 $\delta\theta'$ 表示我们对 $\theta(t')$测量中的误差，令 $\delta\theta_0$ 表示由此导致的初始温度预测误差$\hat{}\ \theta_0 =: \theta_0 + \delta\theta_0$。误差 $\delta\theta_0$ 和 $\delta\theta'$ 通过公式 5 的扰动版本相关联：

$$\theta' + \delta\theta' = \theta^{\text{air}} + (\theta_0 + \delta\theta_0 - \theta^{\text{air}})e^{-(t-t_0)/\lambda}, \tag{20}$$

这意味着，预测初始温度的误差 $\delta\theta_0 = \delta\theta' e^{(t-t_0)/\lambda}$ 会随着测量石灰温度的时间 $t' > t_0$ 呈指数增长。通过对此时间反演问题进行图解法，即从点（$t', \theta(t') + \delta\theta'$）出发，沿着石灰温度的模型轨迹向时间过去的方向追溯，直至（$t_0 = 0, \hat{}\theta_0$），就能看出这种病态性。如果 t' 足够大，使测得的石灰温度接近空气温度，那么在t'时测得的石灰温度中一个很小的误差 $\delta\theta'$，就会导致向过去追溯的轨迹发生很大变化。参见图S4。

2.5.1 先验分布

初始温度， Θ_0。我们根据冰箱中可能出现的（较宽泛的）温度范围，为石灰的初始温度设定一个弥散先验分布：

$$\Theta_0 \sim \mathcal{U}([0\,^\circ\text{C}, 15\,^\circ\text{C}]). \tag{21}$$

空气温度， Θ^{air}。我们根据对空气温度的（含噪）测量，为其设定一个信息性先验分布 Θ^{air}：

$$\Theta^{\text{air}} \sim \mathcal{N}(\theta^{\text{air}}_{\text{obs}}, \sigma^2). \tag{22}$$

参数 Λ 以及测量噪声的方差 Σ^2。在第 2.4 节的参数识别过程中，我们利用所获得的关于 Λ 和 Σ 的信息，为参数 Λ （表征同一颗酸橙）以及来自同一个温度传感器的测量噪声方差 Σ 构建信息性先验分布。具体而言，我们使用第 2.4 节中的后验分布。“昨日的后验，就是今日的先验。” [61]

$$\Lambda \sim \mathcal{N}(0.98\ \text{hr}, (0.02\ \text{hr})^2) \tag{23a}$$
$$\Sigma \sim \mathcal{N}(0.16^\circ\text{C}, (0.03^\circ\text{C})^2). \tag{23b}$$

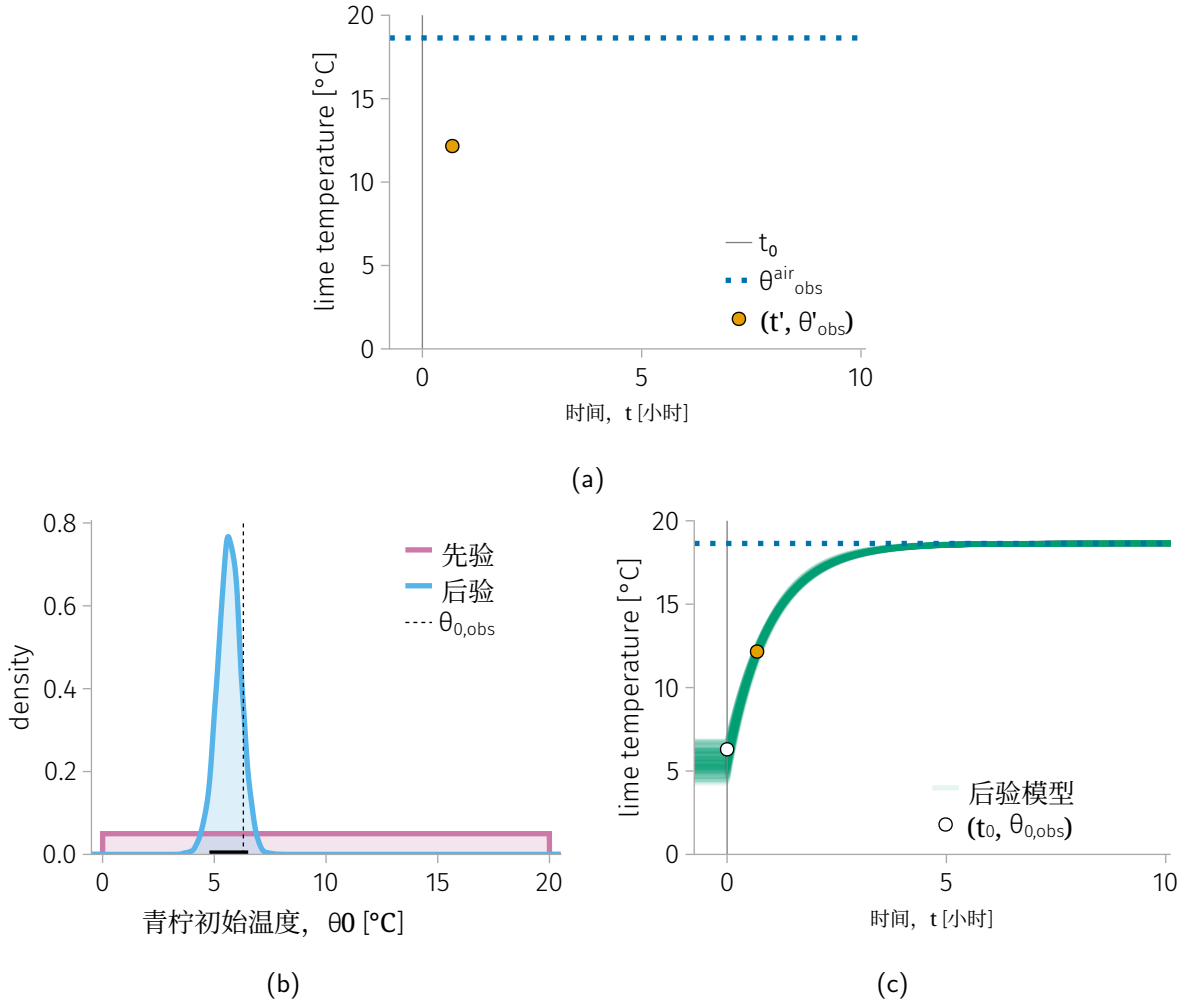


图6：**逆问题IIa：时间反演**：根据酸橙较晚时刻（$t_0 = 0$）的温度测量值，推断其初始温度 Θ_0。（a）数据。（b） Θ_0的先验分布和后验分布。黑色条形表示其等尾90%可信区间。竖线表示留出测量值 $\theta_{0,\text{obs}}$。（c）从后验分布中抽取的100条模型轨迹 $\theta(t; \lambda, t_0 = 0, \theta_0, \theta^{\text{air}})$。

联合先验分布。 同样，对于这个逆问题，所有未知量的联合先验分布$\pi_{\text{prior}}(\theta_0,\ \lambda,\ \theta^{\text{air}},\ \sigma)$会因我们采用独立先验而分解。

2.5.2 数据和似然函数

数据。第二次热传递实验的数据如图6a所示：

- 测得的空气温度，θ_{airobs}
- 一次石灰温度测量（温度′，$\theta'_{\text{观测}}$），其中温度′ > 温度$_0 = 0$。

注意，酸橙从冰箱取出的时间$t_0 = 0$是已知的。

似然函数。 似然函数给出了在每个可能的参数值 θ'_{obs}以及 $\Lambda = \lambda$ 和 $\Sigma = \sigma$实验条件 $\Theta_0 = \theta_0$ 和 $\Theta^{\text{air}} = \theta^{\text{air}}$条件下数据 $(t', \theta'_{\text{obs}})$ 的概率密度。我们根据 (i) 数据和 (ii) 方程 7 中数据生成过程的模型构造似然函数。似然函数为：

$$\pi_{\text{likelihood}}(\theta'_{\text{obs}} \mid \theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta'_{\text{obs}} - \theta(t'; \lambda, t_0 = 0, \theta_0, \theta^{\text{air}})}{\sigma}\right)^2\right]. \quad (24)$$

它量化了　　据点（t', θ'_{obs}）对未知量（$\theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma$）的每个取值提供的支持　　.

2.5.3 后验分布

（联合）后验密度 决定了在给定数据（t', θ'_{obs}）的条件下，未知量（$\Theta_0, \Lambda, \Theta^{\text{air}}, \Sigma$）的概率分布。根据贝叶斯定理，后验密度与似然函数和先验密度的乘积成正比：

$$\pi_{\text{posterior}}(\theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma \mid \theta'_{\text{obs}}) \propto \pi_{\text{likelihood}}(\theta'_{\text{obs}} \mid \theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma)\pi_{\text{prior}}(\theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma). \quad (25)$$

我们尤其关注青柠初始温度 Θ_0 的后验分布，其中（$\Lambda, \Theta^{\text{air}}, \Sigma$）已边缘化。

同样，我们使用 NUTS 从后验分布中获取样本，然后构建其经验近似。

2.5.4 结果摘要

图6a展示了我们用于通过 BSI 推断酸橙初始温度 Θ_0 的热传递实验数据。

🚀 图6b比较了：(i) 酸橙初始温度 Θ_0 的先验分布，以及 (ii) 通过核密度估计构建的更新后的（边缘）经验后验分布。柱形表示 Θ_0 的 90% 等尾后验可信区间。值得注意的是，留出测试数据中的测量酸橙初始温度 $\theta_{0,\ \text{obs}}$，落在该可信区间内。

图6c通过展示酸橙温度模型 $\theta(t;\ \lambda, t$
$0\ \theta_0\ \theta^{\text{air}}$　　$\theta_0\ \lambda\ \theta^{\text{air}}$　　$_0 =$
$,,)$ 的 100 个实现值的随机样本，说明了酸橙温度反向轨迹的后验分布，其中 $(,,)$ 是从后验分布中抽取的样本。

病态条件。 图 7 显示了在不同时间Θ_0 测量酸橙′ 温度时，酸橙初始温度的边缘后验分布$(t',$ $\theta'_{\text{obs}})$。随着t' 增大，后验分布 Θ_0 变得更加分散，反映出更高的不确定性。这展示了 BSI 捕捉重建逆问题中病态条件的能力。

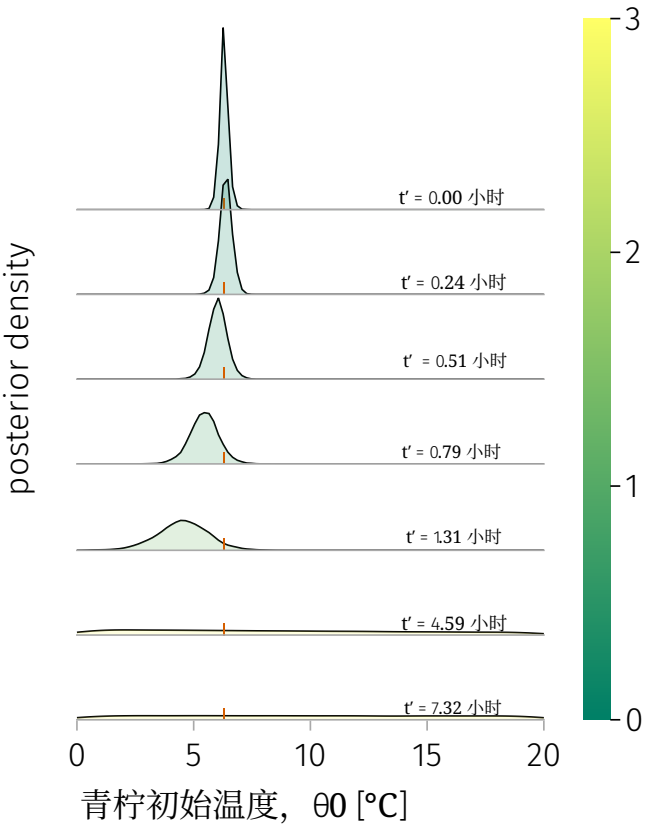


图 7：**逆问题IIa：时间反演**：Θ_0 的（经验边缘）后验分布，其中Θ_0 表示测量酸橙温度的时间；随着t'增大，该分布也随之增大。

2.6 逆问题IIb：时间反演

问题与方法概述

任务：运用 BSI，根据在时间$t' > t_0$, θ'_{obs}测得的酸橙温度以及测得的空气温度 $\theta^{\text{air}}_{\text{obs}}$，推断酸橙从冰箱中取出的时间$T_0$ （即t_0 视为随机变量）和酸橙的初始温度 Θ_0 。

首先，我们根据冰箱中常见的温度范围，为 Θ_0 设定一个弥散先验分布；并根据我们对时间流逝的感知，为T_0 设定一个弱信息性先验分布。

其次，我们根据第 2.4 节中参数识别工作的后验分布，对表征酸橙的参数 Λ 和测量噪声方差 Σ^2施加信息性先验分布。

接下来，我们对同一个石灰进行另一次热传递实验[a] （见第 2.1 节）。用于界定实验条件的测量值是测得的空气温度， $\theta^{\text{air}}_{\text{obs}}$。为了（间接）收集有关（$T_0, \Theta_0$）的信息，我们测量了时间

t', θ'_{obs}。

最后，我们利用贝叶斯定理，根据数据构造 $(T_0,\ \Theta_0,\ \Lambda,\ \Theta^{\text{air}},\ \Sigma)$ 的后验分布，使用马尔可夫链蒙特卡罗算法从中抽样，并得到初始酸橙温度 Θ_0 和酸橙从冰箱取出的时间T_0 的经验边际联合后验分布，以量化这些值的后验不确定性。

请注意，我们也测量了酸橙的初始温度，并知道它从冰箱取出的时间，但在 BSI 程序中，我们不使用这些数据 $(t_0 = 0,\ \theta_{0,\ \text{obs}})$，以检验 $(T_0,\ \Theta_0)$ 的后验分布的准确性。

快速概览：

- 数据：测得的空气温度 $\theta_{\text{空气观测值}}$ 和石灰温度 $(t',\ \theta'_{\text{观测值}})$。
- 根据数据推断的随机变量：酸橙从冰箱取出的时间T_0、酸橙初始温度 Θ_0、参数 Λ、空气温度 $\Theta_{\text{空气}}$、测量噪声的方差 Σ^2。
- 先验来源：T_0：我们对时间流逝的主观判断；Θ_0：冰箱中遇到的温度范围；Λ，Σ^2：我们在第 2.4 节进行参数识别得到的后验；$\Theta_{\text{空气}}$：我们对空气温度的含噪测量。

[a]嗯，我们使用第 2.5 节中第二个热传递实验的同一组数据。重要的是，这是一个不同于用于参数识别的实验。

从经典角度看，这个时间反演问题是欠定的。从概念上说，酸橙的当前状态（t'，θ'_{obs}）与以下两种情况相符：(1)“酸橙起初非常冷，在冰箱外放了很长时间”以及(2)“酸橙起初不太冷，在冰箱外放了很短时间”。从数学上说，在（t_0，θ_0）平面（两个主要未知量）中，存在一条包含无穷多个解的直线；这些解都满足已知（t'，θ'）和 θ^{air}条件下的公式 5 中的模型：

$$\theta' = \theta^{\text{air}} + (\theta_0 - \theta^{\text{air}})e^{-(t'-t_0)/\lambda}. \tag{26}$$

将式 26 中的经典解曲线与通过 BSI 得到的解进行对比，(i) 根据先验分布的不同，BSI 中的后验分布可能会为各个经典解（这些解本质上具有相同的权重）赋予不同的权重；(ii) 通过考虑测量噪声，BSI 也会纳入经典解曲线之外的解。对于较大的t'，这个时间反演问题仍会变得病态：随着$t' > t_0$ 增加，式 26 所描述的曲线会对测得的误差 θ' 变得敏感。

2.6.1 先验分布

我们对 Θ_0、Θ^{air}、Λ 和 Σ^2 采用与第 2.5 节相同的先验分布。此外，我们现在根据对时间流逝的不可靠判断，对酸橙从冰箱取出的时间 T_0 施加先验分布：

$$T_0 \sim \mathcal{N}_{-1\le T_0\le 1}\left(-0.1\,\text{hr}, (0.25\,\text{hr})^2\right). \tag{27}$$

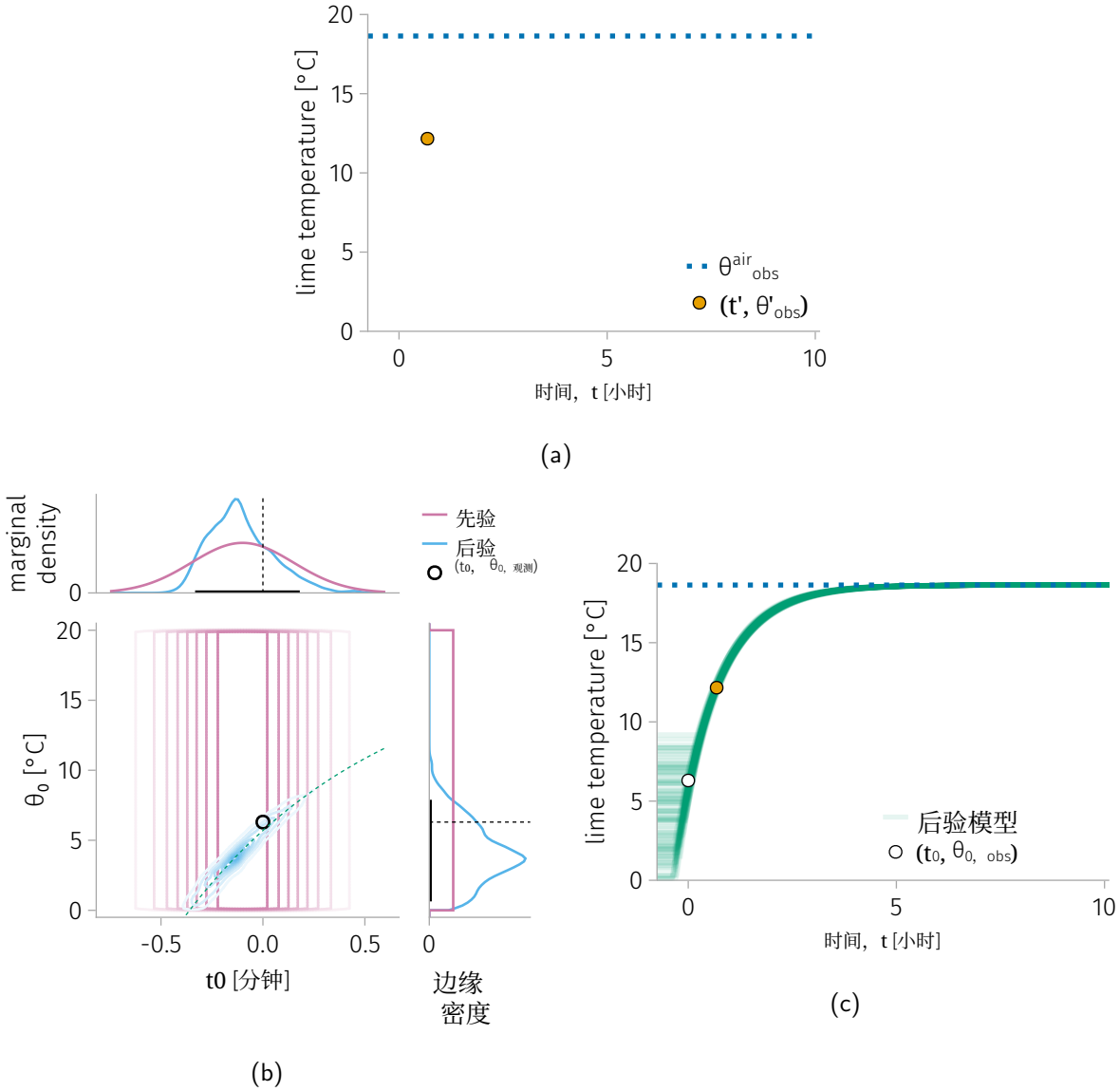


图8：**逆问题 IIb：时间反演**：根据之后对酸橙温度的测量，推断酸橙的初始温度 Θ_0 以及它从冰箱取出的时间T_0 ，(t', θ'_{obs})。(a) 数据。(b) (T_0, Θ_0)的联合及边缘先验分布和后验分布。黑点/虚线表示对酸橙初始条件的留出测量。绿色虚线表示方程26中的经典解，其中 λ 取为第 2.4 节后验的均值。边缘图中的黑色条表示90%等尾可信区间。(c) 100条模型轨迹 $\theta(t; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{air})$ 样本，其中 $(T_0, \Theta_0, \Lambda, \Theta^{air})$ 是从后验分布中抽取的样本。

这为该逆问题给出了一个联合先验分布 $\pi_{prior}(t_0, \theta_0, \lambda, \theta^{air}, \sigma)$。我们在图 8b 中展示了 (T_0, Θ_0) 的先验分布。

2.6.2 数据与似然函数

数据。第二次热传递实验的数据如图 8a 所示：

- 测得的空气温度，θ_{airobs}
- 一次石灰温度测量，$(t',\ \theta'_{\text{obs}})$，其中 t'。

石灰从冰箱中取出的时间t_0 未知。

似然函数。似然函数给出了在给定每个可能的参数值 $\Lambda = \lambda$ 和 $\Sigma = \sigma$ 以及实验条件 $T_0 = t_0$、$\Theta_0 = \theta_0$ 和 $\Theta^{\text{air}} = \theta^{\text{air}}$ 的情况下，测量值 θ'_{obs} 的概率密度。

$$\pi_{\text{likelihood}}(\theta'_{\text{obs}} \mid t_0, \theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\theta'_{\text{obs}} - \theta(t'; \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})}{\sigma}\right)^2\right]. \tag{28}$$

2.6.3 后验分布

（联合）后验密度决定了在给定数据（t'，θ'_{obs}）条件下未知量（T_0，Θ_0，Λ，Θ^{air}，Σ）的概率分布。根据贝叶斯定理，后验密度与似然函数和（联合）先验密度的乘积成正比：

$$\pi_{\text{posterior}}(t_0, \theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma \mid \theta'_{\text{obs}}) \propto \pi_{\text{likelihood}}(\theta'_{\text{obs}} \mid t_0, \theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma)\pi_{\text{prior}}(t_0, \theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}}, \sigma). \tag{29}$$

我们尤其关注酸橙初始条件（T_0，Θ_0）的后验分布，其中（Λ，Θ^{air}，Σ）已边缘化。

同样，我们使用 NUTS 从后验分布中获取样本。

2.6.4 结果摘要

图 8a 展示了热传递实验中的数据，我们利用这些数据通过 BSI 推断酸橙的初始条件（T_0，Θ_0）。

🚀 通过展示等高线，图 8b 比较了 (i) 酸橙初始条件的联合先验分布（T_0, Θ_0），与 (ii) 通过核密度估计构建的（T_0, Θ_0）更新后的经验联合后验分布。由于该逆问题是欠定的，后验密度在（t_0, θ_0）平面上构成经典解的曲线周围分布得相当广泛，如式 26 所示。然而，由于（T_0, Θ_0）的先验分布具有非均匀密度和有限支持度，通常每个经典解在后验密度中的权重各不相同。此外，后验密度还沿垂直于经典解曲线的方向扩散，从而量化了数据中纳入测量噪声所带来的不确定性。请注意，留出测试数据——酸橙的测量初始条件（$t_0 = 0, \theta_{0,\text{obs}}$）——落在后验密度较高的区域。不过，这一结果部分是因为式 27 中我们对 T_0 的先验均值接近真实的 $t_0 = 0$。图 8b 还比较了 T_0 和 Θ_0 的边缘后验分布，包括其 90% 等尾后验可信区间。其中

Θ_0 的可信区间在此处宽得多，远宽于图 6b 中逆问题IIa的可信区间，尽管使用的是同一测量值 θ'_{obs}，因为在这个欠定逆问题中，t_0 未指定。

图8c通过展示石灰温度模型的 100 个随机实现值样本，说明了石灰温度反向轨迹的后验分布：$\theta(t;\ \lambda, t_0, \theta_0, \theta^{\text{air}})$，其中 $(t_0, \theta_0, \lambda, \theta^{\text{air}})$ 是来自后验分布的一个样本。图8c直观地揭示了图 8b 中T_0 与 Θ_0 联合后验密度之间相关性的原因：数据（t', θ'_{obs}）与以下两种情况均相符：(i)“酸橙最初不太冷，而且刚从冰箱里拿出来不久”；(ii)“酸橙最初很冷，而且从冰箱里拿出来已有一段时间”。

2.7 结论

作为示例，我们介绍了贝叶斯统计反演（BSI）教程，用于求解逆问题，同时纳入先验信息并量化不确定性。我们聚焦于一个简单、直观的物理过程——室内环境空气通过自然对流向冰冷的酸橙传递热量。首先，我们针对酸橙温度建立了一个简单的数学模型，其中仅包含一个参数。接着，我们利用酸橙温度时间序列数据集，通过 BSI 推断模型参数的后验分布。随后，我们使用推断得到的参数和模型，通过 BSI 处理两个时间反演重建问题。第一个问题是病态问题：根据稍后时刻的温度测量，预测酸橙的初始温度。第二个问题是欠定问题：根据稍后时刻的温度测量，预测酸橙的初始温度以及 它从冰箱中取出的时间。我们希望本教程能帮助科学家和工程师：(i) 识别其所在领域中的逆问题；(ii) 运用 BSI 求解这些问题，同时纳入先验信息并量化不确定性。

我们针对涉及酸橙的逆问题所求得的贝叶斯统计反演解存在一些局限。首先，我们对酸橙温度建立的数学模型依赖于第2.2节所列的若干简化假设。若放宽这些假设并对模型加以修正，以考虑例如（i）整体空气温度 $\theta^{\text{air}}(t)$ 随时间的变化，以及（ii）酸橙内部的空间温度梯度、几何形状和空间异质性（果皮、果肉、种子），模型可能会更加准确。其次，理想情况下，我们会多次重复热传递实验，并利用酸橙温度的全部时间序列数据，在第 2.4 节中推断参数 Λ。这样，后验分布 Σ 便能捕捉重复实验中酸橙温度的全部残差变异，这些变异源于控制不佳和/或未识别的输入/条件对酸橙温度的影响。第三，我们忽略了模型偏差 [23] 的可能性；这些因素可能导致模型偏差，使酸橙参数/初始条件的后验中产生未纳入考量的不确定性来源和系统性偏差。

3 讨论

我们提供了一篇关于贝叶斯统计反演的入门教程，介绍如何将其作为解决逆问题的工具。逆问题可能是不适定的；贝叶斯统计反演既能（i）纳入先验信息，又能（ii）以输入/参数空间上的概率密度函数形式给出解，并通过其离散程度量化不确定性。逆问题遍及科学与工程领域，例如热传递或辐射传递、引力场、波散射、断层成像和电磁学 [62–67]，弹簧与梁的振动 [68]，成像 [7, 69]，流体力学 [70]，生理学 [71]，流行病学 [72, 73]，生态学 [74]，地球物理学 [67]，环境科学 [75, 76]，古气候学 [77]，化学/生化反应 [78–82]，以及吸附 [83]。从数学上看，这些领域中的重建问题通常可归结为利用数据确定：（1）经矩阵 [13, 84, 85]，线性变换的向量；（2）常微分方程或偏微分方程中的初始条件、边界条件或强迫项 [7]，；（3）被积函数中的某个函数 [86, 87]，；或（4）某个区域的几何形状 [9]。

不确定性量化的经典方法。对于通过最小二乘法求解的超定逆问题，自助抽样 [88]，渐近理论 [89]，以及损失函数的海森矩阵 [90] 可以为未知输入/参数以及模型的新预测提供不确定性估计。

模型偏差。模型偏差 [23] 指在相同条件下进行重复实验时，系统输出的预期测量值与模型对系统输出的预测之间存在非零差异。如果这种偏差显著存在，却未在数据生成过程的模型中加以考虑，就会破坏逆问题的贝叶斯统计反演解 [91]。首先，忽略模型偏差会引入偏差，即使收集到越来越多的数据，参数/输入的后验密度也不会以真实值为中心。其次，这会导致校准不当的不确定性量化，即使收集到越来越多的数据，后验可信区间也不太可能包含参数/输入的真实值。

为考虑模型偏差，我们可以修改数据生成过程的模型，明确纳入模型偏差函数 $\Delta(x)$（一个依赖于输入 x 的随机变量），并将其作为高斯过程 [92]，利用数据对其进行推断。也就是说，我们将测得的系统输出Y_{obs} 建模为

$$Y_{\text{obs}}(x) = f_\beta(x) + \Delta(x) + E, \tag{30}$$

其中 E 为噪声，根据定义，其均值为零。

模型选择。我们假设模型结构已知（见表 2a）。在模型选择中，任务是根据给定的数据，从一组候选模型中选出最能描述某个物理系统的模型。用于模型选择的贝叶斯方法包括贝叶斯信息准则 [93] 和贝叶斯因子 [38, 94]。

其他近似后验分布的方法。在这里，我们使用了 NUTS[53] 马尔可夫链蒙特卡罗方法，从后验分布中获取样本以近似该分布。其他近似后验分布的方法包括：(i) 其他蒙特卡罗抽样方法，包括近似贝叶斯计算（ABC） [95], 序贯蒙特卡罗 [40], 和自适应Metropolis算法 [96] ；以及 (ii) 获取一个易于处理的解析表达式来近似后验分布，包括拉普拉斯近似[97] 和变分贝叶斯 [97]。BSI 从业者在选择近似当前后验分布的方法时，必须考虑准确性、速度和实现难易度 [40] 。

数据和代码可用性

本文中用于复现图表的所有数据和 Julia 代码均可在 `github.com/faaiqgwaqar/Inverse-Problems` 获取。

致谢

F.W. 感谢美国国家科学基金会提供的 1920945 号资助。C.M.S. 感谢美国国土安全部大规模杀伤性武器防范部门通过 CWMD学术研究倡议合作协议21CWDARI00043 提供的支持。此项支持并不构成政府明示或暗示的认可。感谢 Edward Celarier 和 Luther Mahoney 对我们稿件提出的意见。

参考文献

[1] Joshua M Epstein. 为什么要建模？人工社会与社会模拟杂志，11(4):12，2008年。[2] Richard C Aster、Brian Borchers 和 Clifford H Thurber。参数估计与逆问题。爱思唯尔，2018年。[3] Charles W Groetsch。逆问题：本科生实践活动，第12卷。剑桥大学出版社，1999年。[4] Marco Iglesias 和 Andrew M Stuart。逆问题与不确定性量化。*SIAM News*，20:2–3，2014年。[5] Steven H Strogatz。非线性动力学与混沌：及其在物理学、生物学、化学和工程学中的应用。CRC出版社，2018年。[6] Sergei Igorevich Kabanikhin。逆问题与不适定问题的定义和示例。反问题与不适定问题杂志，16(4):317–357，2008年。[7] Francisco Duarte Moura Neto 和 Antˆonio Jos´e da Silva Neto。逆问题导论及其应用。施普林格科学与商业媒体，2012年。[8] Juan Luis Fern´andez-Mart´ınez、Z Fern´andez-Mu˜niz、JLG Pallero 和 Luis Mariano Pedruelo-Gonz´alez。从贝叶斯到 Tarantola：对理解逆问题中的不确定性的新见解。应用地球物理学杂志，98:62–72，2013年。[9] Kazufumi Ito 和 Bangti Jin。逆问题：蒂霍诺夫理论与算法，第22卷。世界科学出版社，2014年。[10] Aleksandr Mihajlovi˘c Denisov。逆问题理论要素，第14卷。VSP，1999年。[11] Jennifer L Mueller 和 Samuli Siltanen。线性与非线性反问题及其实用应用。工业与应用数学学会，2012年。[12] Luis Tenorio。逆问题数据分析与不确定性量化导论。工业与应用数学学会，2017年。[13] Jari Kaipio 和 Erkki Somersalo。统计与计算反问题，第 160 卷。施普林格科学与商业媒体，2006 年。[14] Marko Vauhkonen、Tanja Tarvainen 和 Timo L¨ahivaara。逆问题。载于数学建模。施普林格，2016年。[15] Mark Kac。能否听出鼓的形状？《美国数学月刊》，73(4P2):1–23，1966年。[16] MH Protter。能否听出鼓的形状？再探。《*SIAM*评论》，29 197，1987 2 185( ): – 。

[17] Carolyn Gordon、David L Webb 和 Scott Wolpert。无法听出鼓的形状。《美国数学会通报》，27(1):134–138，1992年。[18] Carolyn Gordon 和 David Webb。你听不出鼓的形状。《美国科学家》，84(1):46–55，1996年。[19] Erwin Kreyszig。《高等工程数学》，第10版，2009年。[20] James R Kuttler 和 Vincent G Sigillito。二维拉普拉斯算子的特征值。《*SIAM*评论》，26(2):163–193，1984年。[21] Guy Chavent。逆问题的非线性最小二乘：理论基础及应用逐步指南。施普林格科学与商业媒体，2010年。[22] LR Lines 和 S Treitel。最小二乘反演及其在地球物理问题中的应用综述。《地球物理勘探》，32(2):159–186，1984年。[23] Marc C Kennedy 和 Anthony O'Hagan。计算机模型的贝叶斯校准。《皇家统计学会会刊：*B*辑（统计方法学）》，63(3):425–464，2001年。[24] Pierre C Sabatier。逆问题的过去与未来。《数学物理学杂志》，41(6):4082–4124，2000年。[25] Oliver J Maclaren 和 Ruanui Nicholson。哪些量可以估计？可辨识性、可估计性、因果推断与不适定逆问题。*arXiv* 预印本 *arXiv:1904.02826*，2019年。[26] Joseph HA Guillaume、John D Jakeman、Stefano Marsili-Libelli、Michael Asher、Philip Brun- ner、Barry Croke、Mary C Hill、Anthony J Jakeman、Karel J Keesman、Saman Razavi 和 Johannes D Stigterers。可辨识性分析入门概述：评估数据类型是否适合建模目的的指南。《环境建模与软件》，119:418–432，2019年。[27] Oana-Teodora Chis、Julio R Banga 和 Eva Balsa-Canto。系统生物学模型的结构可辨识性：方法的批判性比较。《公共科学图书馆·综合》，6(11):e27755，2011年。[28] Masoumeh Dashti 和 Andrew M Stuart。逆问题的贝叶斯方法。载于《不确定性量化手册》，第311–428页。施普林格，2017年。[29] Albert Tarantola、Bernard Valette 等。逆问题= 信息探索。《地球物理学杂志》，50(1):159–170，1982年。[30] Andrew M Stuart。逆问题：贝叶斯视角。《数值数学学报》，19 559，2010 451: – 。[31] Albert Tarantola。逆问题理论与模型参数估计方法。工业与应用数学学会，2005年。[32] J´erˆome Idier。逆问题的贝叶斯方法。约翰·威立父子公司，2013年。[33] Tadeusz J Ulrych、Mauricio D Sacchi 和 Alan Woodbury。贝叶斯反演之旅：教程。《地球物理学》，66(1):55–69，2001年。

[34] Ben G Fitzpatrick。逆问题中的贝叶斯分析。《逆问题》，7(5):675，1991年。[35] Daniela Calvetti 和 Erkki Somersalo。逆问题：从正则化到贝叶斯推断。《*Wiley*跨学科评论：计算统计学》，10(3):e1427，2018年。[36] Roberto Trotta。天空中的贝叶斯：宇宙学中的贝叶斯推断与模型选择。《当代物理学》，49(2):71–104，2008年。[37] Jayanta K Ghosh、Mohan Delampady 和 Tapas Samanta。《贝叶斯分析导论：理论与方法》，第725卷。施普林格，2006年。[38] Rens van de Schoot、Sarah Depaoli、Ruth King、Bianca Kramer、Kaspar M¨artens、Mahlet G Tadesse、Marina Vannucci、Andrew Gelman、Duco Veen、Joukje Willemsen 和 Christopher Yau。贝叶斯统计学与建模。《自然综述：方法导论》，1(1):1–26，2021年。[39] Allen B Downey。《思考贝叶斯》

2 https://allendowney.github.io/ThinkBayes2/ 。，。index.html 2021

[40] Kevin P Murphy。《概率机器学习：高级主题》。麻省理工学院出版社，2023年。[41] Rob J Hyndman。最高密度区域的计算与绘制。《美国统计学家》，50(2):120–126，1996年。[42] Karl-Rudolf Koch。《贝叶斯统计学导论》。施普林格科学与商业媒体，2007年。[43] Luiz Hespanhol、Caio Sain Vallio、Luc´ıola Menezes Costa 和 Bruno T Saragiotto。理解和解读效应估计值的置信区间与可信区间。《巴西物理治疗杂志》，23(4):290–301，2019年。[44] Yunus Cengel、John Cimbala 和 Robert Turner。《热流体科学基础》。麦格劳-希尔，2017年。[45] R Byron Bird、Warren E Stewart 和 Edwin N. Lightfoot。《传递现象》。约翰·威立父子出版公司，2002年。[46] OJ I kegwu、FC Ekwu 等。尼日利亚一些热带水果及其果汁的热学和物理性质。《食品技术杂志》，7(2):38–42，2009年。[47] Philip Kosky、Robert Balmer、William Keat 和 George Wise。第12章——机械工程。载于 Philip Kosky、Robert Balmer、William Keat 和 George Wise 编，《探索工程学》，第259–281页。学术出版社，波士顿，第3版，2013年。[48] Michael Vollmer。重新审视牛顿冷却定律。《欧洲物理学杂志》，30 1063，2009 5( ): 。[49] WG Rees 和 C Viney。茶和咖啡的冷却。《美国物理学杂志》，56(5):434–437，1988年。[50] Colm T O'Sullivan。牛顿冷却定律——批判性评估。《美国物理学杂志》，58(10):956–960，1990年。

[51] Craig F Bohren. 对 Colm T. O’Sullivan 所著《牛顿冷却定律——批判性评估》的评论 [《美国物理学杂志》5 8, 956–960 (1990)]. 《美国物理学杂志》, 59(11):1044– 1046, 1991.[52] Matia Mukama, Alemayehu Ambaw, and Umezuruike Linus Opara. 水果的热物理性质——关于采后处理的综述。《食品测量与表征杂志》, 14(5):2917–2937, 2020.[53] Matthew D Hoffman, Andrew Gelman, et al. 无转向采样器：在哈密顿蒙特卡罗中自适应设定路径长度。《机器学习研究杂志》, 15(1):1593–1623, 2014.[54] Hong Ge, Kai Xu, and Zoubin Ghahramani. Turing：一种用于灵活概率推断的语言。载于人工智能与统计国际会议，*AISTATS 2018*，*2018*年*4*月*9*日至*11*日，西班牙加那利群岛兰萨罗特岛普拉亚布兰卡，第1682–1690页，2018年。[55] Jeff Bezanson, Stefan Karpinski, Viral B Shah, and Alan Edelman. Julia：一种用于技术计算的快速动态语言。*arXiv*预印本 *arXiv:1209.5145*，2012年。[56] Yen-Chi Chen. 核密度估计教程及其最新进展。《生物统计学与流行病学》, 1(1):161–187, 2017.[57] Chris Sherlock, Paul Fearnhead, and Gareth O Roberts. 随机游走Metropolis算法：通过案例研究连接理论与实践。《统计科学》, 25(2):172–190, 2010.[58] Vivekananda Roy. 马尔可夫链蒙特卡罗的收敛诊断。《统计学及其应用年度评论》, 7:387–412, 2020.[59] Gareth O Roberts and Jeffrey S Rosenthal. 各种梅特罗波利斯-黑斯廷斯算法的最优尺度。《统计科学》, 16(4):351–367, 2001.[60] Michael Betancourt. 哈密顿蒙特卡罗的概念性介绍。*arXiv*预印本 *arXiv:1701.02434*，2017年。[61] D Calvetti and E Somersalo. 主观知识还是客观信念? 对贝叶斯方法的另一种审视。《大规模逆问题与不确定性量化》，第33–70页，2010年。[62] Jari P Kaipio and Colin Fox. 热传递逆问题的贝叶斯框架。《传热工程》, 32(9):718–753, 2011.[63] Jingbo Wang and Nicholas Zabaras. 一种针对反热传导问题的贝叶斯推断方法。《国际传热传质杂志》, 47(17-18):3927– 3941, 2004.[64] Helcio RB Orlande, George S Dulikravich, Markus Neumayer, Daniel Watzenig, and Marcelo J Colaco. 加速贝叶斯推断：估计热传导问题中的空间变化热通量。《数值传热：*A*辑：应用》, 65(1):1–25, 2014.

[65] Victor Isakov. 偏微分方程逆问题，第127卷。施普林格，2006年。[66] Alemdar Hasanov Hasanoˇglu and Vladimir G Romanov. 微分方程逆问题导论。施普林格，2021年。[67] Mathias Richter. 逆问题：地球物理学基础、理论与应用。施普林格·自然，2021年。[68] Graham ML Gladwell. 振动逆问题。1986年。[69] Alejandro Ribes and Francis Schmitt. 成像线性逆问题。*IEEE*信号处理杂志, 25(4):84–99, 2008.[70] Simon L Cotter, Massoumeh Dashti, James Cooper Robinson, and Andrew M Stuart. 函数的贝叶斯逆问题及其在流体力学中的应用。《逆问题》, 25(11):115008, 2009.[71] Sven Zenker, Jonathan Rubin, and Gilles Clermont. 从数理生理学中的逆问题到定量鉴别诊断。《*PLoS*计算生物学》, 3 204, 2007 11( ):e .[72] Xingjie Hao, Shanshan Cheng, Degang Wu, Tangchun Wu, Xihong Lin, and Chaolong Wang. 武汉COVID-19完整传播动态的重建。《自然》, 584(7821):420–424, 2020.[73] Mehrad Ansari, David Soriano-Pa˜nos, Gourab Ghoshal, and Andrew D White. 利用最大熵推断疾病暴发的空间源头。《物理评论*E*》, 106 014306, 2022 1( ): .[74] Michael Dowd and Renate Meyer. 一种解决生态系统逆问题的贝叶斯方法。《生态建模》, 168(1-2):39–55, 2003.[75] M Andrle and A El Badia. 热方程的反源问题：在污染检测问题中的应用，II。《科学与工程中的逆问题》, 23(3):389– 412, 2015.[76] Eugene Yee, Fue-Sang Lien, Andrew Keats, and R´eal D'Amours. 浓度数据的贝叶斯反演：大气扩散伴随表示中的源重建。《风工程与工业空气动力学杂志》, 96(10-11):1805–1816, 2008.[77] John Haslett, Matt Whiley, Sudipto Bhattacharya, M Salter-Townshend, Simon P Wilson, JRM Allen, B Huntley, and FJG Mitchell. 贝叶斯古气候重建。《皇家统计学会杂志：*A*辑（社会统计学）》, 169(3):395–438, 2006.[78] Heinz W Engl, Christoph Flamm, Philipp K¨ugler, James Lu, Stefan M¨uller, and Peter Schus- ter. 系统生物学中的逆问题。《逆问题》, 25(12):123014, 2009.[79] Rodolfo Guzzi, Teresa Colombo, and Paola Paci. 系统生物学中的逆问题：批判性综述。系统生物学，第69–94页，2018年。

[80] Fadil Santosa 和 Benjamin Weitz。反应动力学中的一个逆问题。数学化学杂志，49(8)，2011年。[81] David S Mebane、K Sham Bhat、Joel D Kress、Daniel J Fauth、McMahan L Gray、Andrew Lee 和 David C Miller。使用从头算先验对负载型胺吸附剂中 CO_2 的吸收热力学模型进行贝叶斯校准。《物理化学化学物理》，15(12):4355–4366，2013年。[82] Philipp Kugler、Erwin Gaubitzer 和 Stefan M¨uller。利用稀疏性促进正则化识别化学反应系统的参数：亚氯酸盐-碘化物反应案例研究。《物理化学杂志*A*辑》，113(12):2775–2785，2009年。[83] Chunkai Shih、Jongwoo Park、David S Sholl、Matthew J Realff、Tomoyuki Yajima 和 Yoshiaki Kawajiri。吸附等温线参数确定的分层贝叶斯估计。《化学工程科学》，214:115435，2020年。[84] Andreas Hofinger 和 Hanna K Pikkarainen。线性逆问题贝叶斯方法的收敛速率。逆问题，23(6):2469，2007年。[85] Ali Mohammad-Djafari。逆问题的完整贝叶斯方法。载于最大熵与贝叶斯方法：美国新墨西哥州圣菲，*1995*年，第十五届最大熵与贝叶斯方法国际研讨会论文集，第135–144页。施普林格，1996年。[86] Charles W Groetsch。第一类积分方程、逆问题与正则化：速成课程。《物理学杂志：会议系列》，73(1):012001，2007年。[87] Charles W Groetsch 和 CW Groetsch。数学科学中的逆问题，第52卷。施普林格，1993年。[88] Bradley Efron 和 Robert Tibshirani。用于计算标准误、置信区间及其他统计精度度量的自助法。《统计科学》，第54–75页，1986年。[89] Harvey Thomas Banks、Kathleen Holm 和 Danielle Robbins。逆问题不确定性量化中的标准误计算：渐近理论与自助抽样。《数学与计算机建模》，52(9-10):1610–1625，2010年。[90] Ni Zhan 和 John R Kitchin。机器学习和非线性最小二乘回归模型中的不确定性量化。《美国化学工程师学会期刊》，68(6):e17516，2022年。[91] Jenn`y Brynjarsd´ottir 和 Anthony O'Hagan。了解物理参数：模型偏差的重要性。逆问题，30(11):114007，2014年。[92] Matthias Seeger。用于机器学习的高斯过程。《国际神经系统杂志》，14(02):69–106，2004年。[93] Andrew A Neath 和 Joseph E Cavanaugh。贝叶斯信息准则：背景、推导与应用。《威利跨学科评论：计算统计学》，4(2):199–203，2012年。

[94] Robert E Kass 和 Adrian E Raftery。贝叶斯因子。《美国统计学会杂志》，90(430):773–795，1995年。[95] Mikael Sunn˚aker、Alberto Giovanni Busetto、Elina Numminen、Jukka Corander、Matthieu Foll 和 Christophe Dessimoz。近似贝叶斯计算。《*PLoS*计算生物学》，9(1):e1002803，2013年。[96] Heikki Haario、Eero Saksman 和 Johanna Tamminen。自适应Metropolis算法。《*Bernoulli*》，第223–242页，2001年。[97] Shiliang Sun。贝叶斯机器学习确定性近似推断技术综述。《神经计算与应用》，23:2039–2050，2013年。[98] Joseph Wu。RTD测量基础指南。《变更》，100(4.183):10–12，2018年。[99] Grayson King 和 Toru Fukushima。使用ADuC8xx微转换器®进行RTD接口与线性化。*AN709，Analog Devices*，2004年。

S1 补充信息

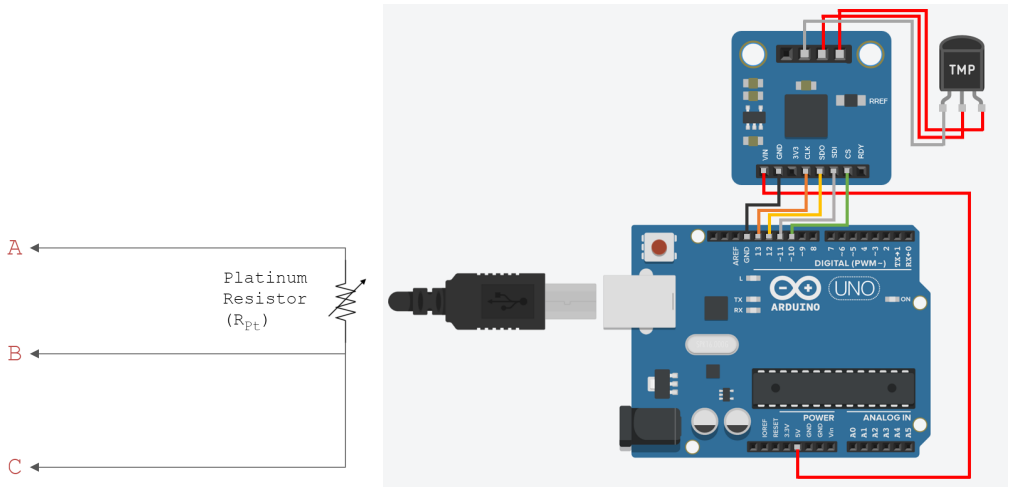
S1.1 温度传感器与 Arduino 设置

为了测量石灰与环境空气达到热平衡时的温度，我们使用电阻温度检测器（RTD）传感器。具体而言，我们使用 PT1000，这是一种高精度三线式铂电阻温度检测器，在 0 °C 时的标称电阻为 $R_0 = 1000\,\Omega$。如图 S1a 所示，PT1000 由一个连接在三根铜线之间的铂电阻构成。铂电阻的温度变化时，其电阻也会随之变化。测量 A 点与 C 点之间的电阻，得到的是铂电阻的电阻（R_{Pt}）加上 A 线和 C 线的引线电阻。我们采用三线接口，以减小铜引线寄生电阻的影响。利用模数转换器，将 B 点与 C 点之间的电阻（R_{BC}）从 A 点与 C 点之间的电阻（R_{AC}）中扣除，从而分离出铂电阻的电阻值 R_{Pt}，再根据电阻-温度关系推算相应的温度。

铂的电阻与其温度$T > 0$ [°C]之间的关系由卡伦德-范杜森方程 [98]描述：

$$R_{Pt}(T) = R_0(1 + AT + BT^2), \tag{S31}$$

系数为 $A = 3.9083 \times 10^{-3}$ $[\circ\mathrm{C}]^{-1}$ 和 $B = -5.775 \times 10^{-7}$ $[\circ\mathrm{C}]^{-2}$ [99]。软件实现细节见 `https://github.com/adafruit/Adafruit_MAX31865`。



(a) 电阻温度检测器温度传感器　　(b) Arduino装置

图 S1：**电阻温度检测器温度传感器和 Arduino 装置**。(a) 三线电阻温度检测器接口假定存在共用寄生引线电阻。铂电阻的电阻$R_{Pt} = R_{AC} - R_{BC}$。(b) 电阻温度检测器直接连接到 MAX31865，并将焊盘短接，以将放大器设置为三线配置。Arduino 为放大器供电。此外，使用数字引脚设置串行外设接口通信。软件中指定了 Arduino 上用于时钟、串行数据输入/输出和片选连接的数字引脚。

在我们的实验中，电阻温度探测器搭配热电偶放大器 Adafruit MAX31865 使用。该放大器通过板载模数转换器和精度为 0.1% 的参考电阻，能够高精度地观测电阻的微小变化。MAX31865 读取电阻温度探测器的电阻值，然后通过串行外设接口将读数传送给微控制器。

在我们的微控制器 Arduino Uno 上，我们向 MAX31865 发出信号，使其每 10 秒读取一次石灰的温度。随后，这些数据会传回 Arduino。接着，Arduino 根据电阻温度探测器的电阻，通过方程 S31 的解计算石灰温度。该计算速度很快，温度和墙上时钟时间会通过通用异步接收器/发送器接口传输到连接的计算机。计算机会将这些读数填入逗号分隔值文件，以便进一步进行数据处理。见图 S1b。

S1.2 马尔可夫链蒙特卡洛模拟的收敛诊断

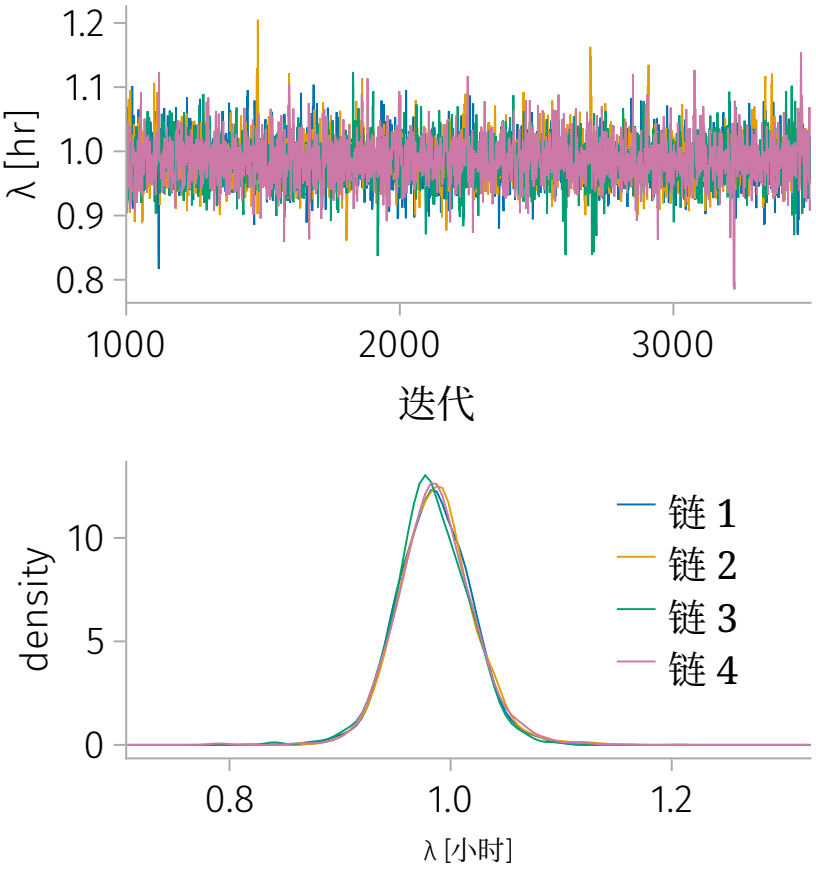


图 S2：**收敛诊断 [58] 适用于逆问题 I 的 NUTS算法**。四种颜色分别对应四条独立链。(a) 轨迹图显示了马尔可夫链第 i 步的参数 λ_i。请注意：(i) 每条链探索的 λ 范围大致相同；(ii) 链的混合情况良好，常常会遇到并呈现局部极大值和极小值。迭代从 1000 开始，因为此前迭代的样本已作为“预热期”舍弃。(b) Λ 的经验后验分布。请注意，四条独立链的后验分布大致一致。

S1.3 残差

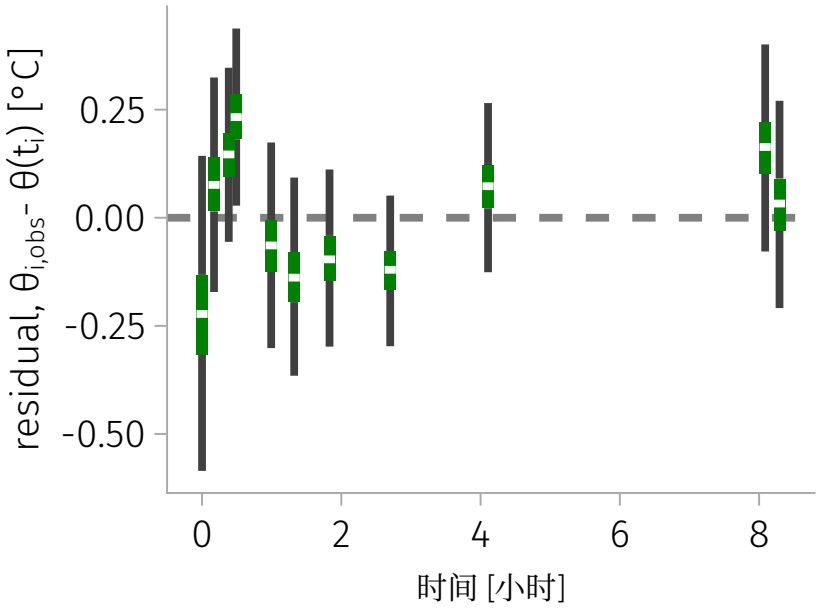


图 S3：**残差**。 对于逆问题 I，我们使用箱线图来可视化每个残差的后验分布 $\theta_{i,\,\mathrm{obs}} - \theta(t_i;\ \Lambda,\ t_0 = 0,\ \Theta_0,\ \Theta^{\mathrm{air}})$。

S1.4 逆问题IIa的图解法

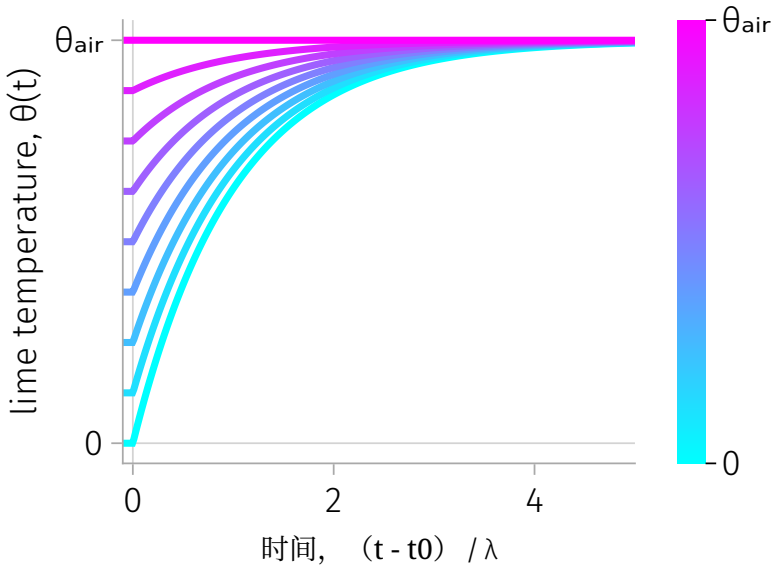


图 S4：**逆问题 IIa 的图解法**。根据方程 6 中的模型，初始温度不同（$t = t_0$）时酸橙温度的变化轨迹 θ_0 。已知较晚时刻t'的酸橙温度测量值 θ'，通过沿经过（t'，θ'）的轨迹向时间回溯至$t = t_0$，即可得到预测的酸橙初始温度θ_0，即逆问题 IIa 的经典解。从图中可以看出，在较长时间下，该逆问题会变得病态，因为 θ' 的微小扰动会导致回溯轨迹发生显著变化。