利用代理建模和贝叶斯推断推进函数型输入的逆散射

Chih-Li Sung[a]、Yao Song[b]、Ying Hung[b*]

[a]密歇根州立大学
[b]罗格斯大学（新泽西州立大学）

arXiv:2305.01188v1 [stat.AP] 2 May 2023

摘要

逆散射旨在利用接收到的散射波以及从正向数学模型中收集的训练数据，推断隐藏对象的信息。近年来计算技术的发展，使人们日益关注函数型逆推断，因为它能够揭示隐藏对象更为详细的性质。然而，关于函数逆问题的严谨研究仍然十分有限，包括函数输入的重建和不确定性量化。受一个逆散射问题的启发——该问题旨在推断表示有界散射体折射率的函数输入——本文提出了一种新的贝叶斯框架。该框架包含一个通过核函数直接考虑函数型输入的代理模型，以及一个通过后验分布推断函数型输入的贝叶斯过程。此外，所提贝叶斯框架还通过整合多保真度模拟扩展到函数逆问题的重建，其中包括采用有限元方法求解的高保真度模拟器，以及称为Born近似的低保真度模拟器。与现有的基于有限基展开的方法相比，所提方法能够以更小的预测变异实现更准确的函数型恢复。

关键词：计算机实验；多保真度模拟；不确定性量化；逆问题；高斯过程

*作者衷心感谢美国国家科学基金会提供的资助，项目编号为 DMS-2113407、DMS-2107891 和 CCF-1934924。

1 引言

散射问题是指描述波与物体如何相互作用的波散射现象。利用波探测隐藏对象后，逆散射旨在根据接收到的响应波推断隐藏对象的信息（Kaipio and Somersalo，2006；Cakoni 等，2016）。逆散射在多个科学领域有广泛应用，例如医学成像、无损检测、遥感和雷达成像等。例如，在电阻抗断层成像（EIT）中，逆散射用于推断电导率（Mueller 和 Siltanen，2020），从而为肺栓塞的诊断、胸部肿瘤的检测，以及缺血性卒中与出血性卒中的诊断和鉴别提供关键医学信息。另一项重要应用是计算机断层扫描（CT），它广泛应用于医学研究，通过生成详细的人体横截面图像来重建内部结构（Courdurier 等人，2008；Li 等人，2019）。

要根据散射波的测量结果推断隐藏对象的属性，首先要从数学模型（也称为正问题求解器）中学习正问题信息。这些模型通常涉及描述电磁波或声波在隐藏对象中传播的偏微分方程（Kaipio and Somersalo，2006）。正问题求解器有多种类型。其中，非线性正问题求解器涉及非线性偏微分方程，这类方程通过有限元方法等数值方法求解（Cakoni 等，2016）。这类求解器相对准确，但通常需要大量计算资源，因此适用范围受到限制。另一种常用方法是用问题的线性化版本近似非线性方程，例如 Born近似（Kazei and Alkhalifah，2018年；Muhumuza 等人，2018年）。虽然这些近似方法计算效率较高，但它们

其准确性不如非线性求解器。逆散射的目标是同时利用各种求解器的优势，高效且准确地重建隐藏对象的属性。

应用数学和统计学领域已对逆散射问题进行了广泛研究（Colton and Kress, 2006；Kaipio and Somersalo，2006；Cakoni and Colton，2014；Kaipio 等，2019）。近年来，计算技术的进步为研究逆问题创造了新的机遇，使得涉及更复杂数学模型的计算机模拟（包括函数型输入）成为可能。这使得人们对具有函数型输入的逆问题给予了越来越多的关注，因为这类问题能够揭示有关隐藏对象的更详细信息。例如，考虑图1所示的一个逆散射问题，其目标是根据响应远场模式 u^s，以函数形式恢复图1中间位置的未知散射体的非均匀材料属性（记为 g）。对于任意函数输入 g，远场模式 u^s 均可通过由偏微分方程组构成的计算机模型进行模拟（Cakoni 等，2016），并可采用有限元方法等数值方法求解。给定来自计算机模拟的训练数据，最终目标是根据观测到的远场测量结果，重建并推断函数输入 g。

尽管关于逆问题的研究已相当丰富，但现有文献中的大多数成果并不适用于对未知函数型输入进行推断，包括对其进行估计及量化估计的不确定性。近年来，针对函数型输入的研究主要依赖截断基展开的思路（Tan, 2019; Li and Tan, 2022）。这一方法直观且在函数型数据分析中广泛使用，但可能导致估计效率低下，并在逆估计中引入额外的不确定性。要有效解决含函数型输入的逆问题，关键而又具有挑战性的一步是为数学正向求解器构建高效的代理模型，使其能够准确

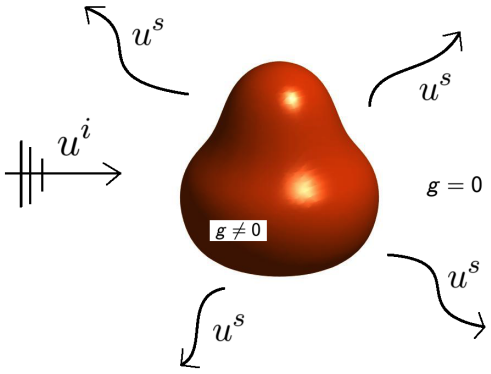

图1：逆散射问题。

捕捉函数型输入中的信息，并对预测不确定性进行严格量化。

受一类逆散射问题的启发——该问题关注的函数输入是有界散射体上的折射率——本文提出了一种新颖的贝叶斯框架。该框架通过构建能够直接考虑函数型输入的高效代理模型，以及一种贝叶斯过程，从而通过后验分布高效、准确地推断函数逆问题，应对上述挑战。具体而言，该代理模型采用带有函数型输入的高斯过程先验构建，通过核函数直接捕捉函数输入中的信息，无需有限基展开，从而保留全部信息，避免任何截断。此外，该代理模型还用于高效整合多保真度模拟，包括低保真度模拟（如 Born近似）和高保真度模拟（如通过有限元方法求解的非线性方程），以提高重建精度和计算效率。尽管多保真度仿真领域已有大量进展（Kennedy and O'Hagan，2000年），

现有工作大多聚焦于标量输入，而将其扩展到函数型输入并非易事。

请注意，在当前设定下识别函数逆问题，与近期研究中针对函数参数进行计算机模型校准有所不同（Plumlee 等，2016；Brown 和 Atamturktur，2018；Tuo 等，2021；Sung，2022）。这些研究关注的校准参数表示为控制变量的函数，而每个模型输出都是通过一个标量参数生成的，该参数被假定为未知函数 $g(x)$ 的一个实现。相比之下，本文的逆散射问题涉及单个函数 g，该函数已明确给出（例如，$g(x) = 1 + x$），并在计算机模型中生成仅一种响应模式。因此，可用于指导在函数空间中搜索逆的信息大幅减少，使问题更具挑战性。

本文其余部分安排如下。第2节介绍仅有一个数值模拟器可用时，逆散射问题的贝叶斯框架。第3节提出一种通过整合多保真模拟器来重建逆函数的方法。第4节展示有界散射体折射率的逆向预测和不确定性量化结果。最后，第5节总结全文并讨论未来研究方向。详细算法见附录，用于复现数值结果的 `R` (R Core Team，2018) 代码见补充材料。

2 函数逆问题的贝叶斯推断

假设 V 是由定义在紧凸区域 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ 上的函数组成的函数型输入空间，且所有函数 $g(\mathbf{x}) \in V$ 在 Ω 上均连续，其中 $\mathbf{x} \in \Omega$。

给定函数输入 $g(\mathbf{x}) \in V$，$\mathbf{y}^s(g)$ 是通过正向数学求解器得到的相应输出，而此类求解器通常计算开销很大，例如通过有限元方法 (FEMs) 求解一系列非线性偏微分方程。对于每个函数输入，输出通常是一幅图像，可将其向量化为长度为 m 的向量，因此有 $\mathbf{y}^s: V \to \mathbb{R}^m$。例如，根据图2面板标题中显示的十个训练输入函数，相应的十个输出 $\mathbf{y}^s(g)$ 以图像格式呈现，如图2所示，可将其视为长度为 $m = 1024$ 的向量。令 $\mathbf{y}^p$ 为观测到的远场模式向量。假设

$$\mathbf{y}^p = \mathbf{y}^s(g) + \mathbf{e}, \tag{1}$$

其中$\mathbf{e}$ 是随机噪声，其每个元素均服从均值为零、方差为 σ_e^2 的相同且相互独立的正态分布，即 $\mathbf{e} \sim \mathcal{N}_m(\mathbf{0}_m, \sigma_e^2\mathbf{I}_m)$，且$\mathbf{I}_m$ 是一个大小为 m 的单位矩阵。基于从数学正向求解器获得的训练集，逆散射的目标是重建与接收到的远场模式相对应的函数输入 g 。

为构建用于逆散射问题的贝叶斯方法，第 2.1 节首先引入一个用于数学求解器的代理模型，以便高效模拟具有函数型输入的$\mathbf{y}^s(g)$。这一步至关重要，因为数学求解器通常计算量很大，因此无法使用数学求解器探索整个函数型输入空间。基于（1）和第 2.1 节构建的代理模型，第2.2节提出了一种用于逆散射的贝叶斯框架。

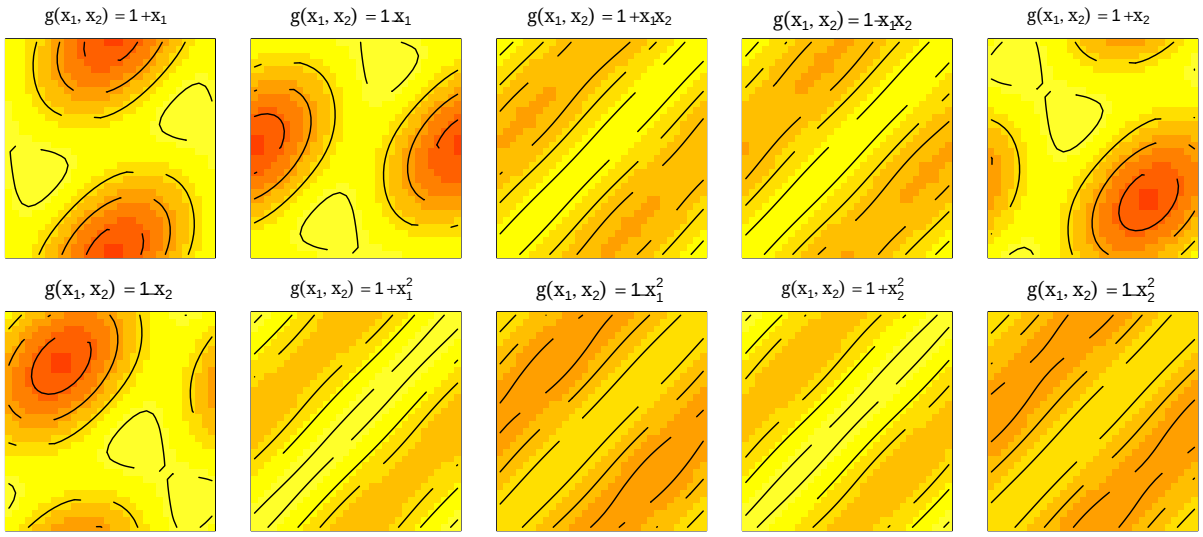

图2： 来自有限元模拟的训练数据，其中函数型输入显示在面板标题中，图像则是其对应的远场输出。

2.1 带函数型输入的代理模型

由于响应远场模式$\mathbf{y}^s(g)$是图像，我们首先采用降维方法对图像进行预处理。具体而言，我们进行主成分分析（PCA），以确定前 L 个主成分$\mathbf{u}_l \in \mathbb{R}^{1024}$，$l = 1$、2，……，$L$，这些主成分能够解释训练集中图像 99% 以上的变异性。因此，给定函数输入 g_i（适用于 $i = 1$，……，n），远场图像的输出可近似表示为

$$\mathbf{y}^s(g_i) \approx \sum_{l=1}^{L} f_l(g_i)\mathbf{u}_l, \tag{2}$$

其中，$\{f_l(g_i)\}_{l=1}^{L}$ 是前 L 个主成分得分，通过 $f_l(g_i) = \mathbf{u}_l^T \mathbf{y}^s(g_i)$ 计算得出。降维后，目标不再是对输出图像建模，而是构建一个高效的代理模型来预测主成分。

任意 $g \in V$ 的分量得分 $f_l(g)$。

高斯过程（GP）模型（Santner 等人，2018年；Gramacy，2020）广泛用于为数学求解器构建统计代理模型，但当输入 g 是函数形式而非标量输入时，为$f_l(g)$构建代理模型颇具挑战。这是因为需要一个新的核函数，记为 $K_l(g, g')$，其中 $g, g' \in V$，以便直接描述函数空间中的相关结构。为此，我们采用 Sung 等人（2023）提出的函数输入高斯过程模型：

$$f_l(g) \sim \mathcal{FIGP}(\mu_l, K_l(g, g')),$$

其中，μ_l 是未知均值，$K_l(g, g')$ 是半正定的，并且假设 $\{f_l(g)\}_{l=1}^{L}$ 彼此独立。如 Sung 等人（2023）所介绍，对于任意函数型输入 g_1，$g_2 \in V$，核函数分为两类，其中包括线性核：

$$K_l(g_1, g_2) = \tau_l^2 \int_\Omega \int_\Omega g_1(\mathbf{x}) g_2(\mathbf{x}') \Phi_{\boldsymbol{\theta}_l}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \mathrm{d}\mathbf{x} \mathrm{d}\mathbf{x}', \tag{3}$$

和一个非线性核：

$$K_l(g_1, g_2) = \tau_l^2 \phi(\gamma_l \| g_1 - g_2 \|_{L_2(\Omega)}), \tag{4}$$

其中，τ_l^2为正标量，$\Phi_{\boldsymbol{\theta}_l}$ 为定义在 Ω × Ω 上的正定核函数，其超参数为 $\boldsymbol{\theta}_l$，$\phi(r)$：$\mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}$ 为径向基函数，其在 $\mathbb{R}^d$ 中对应的核对于任意 $d \geq 1$、$\| \cdot \|_{L_2}$均为严格正定，$_{(\Omega)}$ 表示函数的 L_2-范数，定义为 $\|h\|_{L_2(\Omega)} = (\langle h, h \rangle_{L_2(\Omega)})^{1/2}$，$\gamma_l > 0$ 是控制核函数相对于 L_2-范数衰减的参数。本文始终假设核函数$\Phi_{\boldsymbol{\theta}_l}$ 为 Mat´ern 核，该核在相关文献中得到广泛使用（Santner 等人，

2018年；Stein，1999）。Mat´ern 核函数的形式为

$$\Phi_{\boldsymbol{\theta}_l}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \phi(\|\boldsymbol{\theta}_l \odot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')\|_2) \tag{5}$$

采用 Mat´ern 径向基函数:

$$\phi(r) = \frac{1}{\Gamma(\nu)2^{\nu-1}}(2\sqrt{\nu}r)^{\nu} B_{\nu}(2\sqrt{\nu}r), \tag{6}$$

其中， $\odot$ 是 Hadamard 积， $\boldsymbol{\theta}_l$ 是长度为 d 的长度尺度参数， $\|\cdot\|_2$表示欧几里得范数， B_{ν} 是第二类修正贝塞尔函数， ν表示平滑度参数。可使用准蒙特卡罗积分（ Morokoff 和 Caflisch，1995）对核中的积分进行数值计算。具体而言，假设 Ω 是一个单位立方体，则线性核（3）可近似为

$$K_l(g_1, g_2) \approx \frac{\tau_l^2}{N^2}\left(\mathbf{g}_{1,N}^T \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\theta}_l} \mathbf{g}_{2,N}\right), \tag{7}$$

其中， $\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\theta}_l}$ 是一个 $N \times N$ 矩阵，其每个元素为 $(\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\theta}_l})_{i,\ j} = \Phi_{\boldsymbol{\theta}_l}(\mathbf{x}_i,\ \mathbf{x}_j)$, $\mathbf{g}_{j,\ N}$ 是一个长度为 N 的向量，即 $\mathbf{g}_{j,\ N} = (g_j(\mathbf{x}_1) \ldots, g_j(\mathbf{x}_N))^T$，而 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ 是来自单位立方体的低差异序列，此处采用 Sobol 序列（Sobol'，1967；Bratley 和 Fox，1988）。

基于选定的核函数， n 输出（$f_l(g_1) \ldots, f_l(g_n)$）服从多元正态分布，

$$\mathbf{f}_l := (f_l(g_1), \ldots, f_l(g_n))^T \sim \mathcal{N}_n(\mu_l \mathbf{1}_n, \mathbf{K}_l),$$

其中协方 ance $\mathbf{K}_l \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 与 $(\mathbf{K}_l)_{j,\ k} = K_l(g_j,\ g_k)$，且 $\mathbf{1}_n$ 是一个大小为 n 的全 1 向量。

记 $\mathbf{Y}_s = (\mathbf{y}^s(g_1) \ldots, \mathbf{y}^s(g_n)) \in \mathbb{R}^{m \times n}$，这意味着 $\mathbf{f}_l = \mathbf{Y}_s^T \mathbf{u}_l$。未知参数（包括 μ_l 以及与核函数相关的超参数，即式 (3) 中的 $\boldsymbol{\theta}_l$ 或式 (4) 中的 γ_l），可以通过最大化对数似然函数来估计：

$$\text{constant} - \frac{1}{2} \log |\mathbf{K}_l| - \frac{1}{2} (\mathbf{Y}_s^T \mathbf{u}_l - \mu_l \mathbf{1}_n)^T \mathbf{K}_l^{-1} (\mathbf{Y}_s^T \mathbf{u}_l - \mu_l \mathbf{1}_n).$$

核函数的选择取决于底层结构的复杂程度。为了在实践中找到能够平衡偏差-方差权衡的核函数，我们采用了 Sung 等人（2023）提出的留一交叉验证（LOOCV）方法。该方法通过最小化估计的预测误差，提供了一种高效的闭式表达式来选择核函数：

$$\text{LOOCV} = \frac{1}{n} \| \mathbf{\Lambda}_l^{-1} \mathbf{K}_l^{-1} (\mathbf{Y}_s^T \mathbf{u}_l - \mu_l \mathbf{1}_n) \|_2^2, \tag{8}$$

其中，$\mathbf{\Lambda}_l \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是一个对角矩阵，其元素为 $(\mathbf{\Lambda}_l)_{j,\,j} = (\mathbf{K}_l^{-1})_{j,\,j}$。

根据条件多元正态分布的性质，对于一个尚未尝试过的函数输入 $g \in V$，相应的输出 $f_l(g)$ 服从正态分布

$$f_l(g) | \mathbf{Y}_s \sim \mathcal{N}(m_l(g), v_l(g)) \tag{9}$$

with

$$m_l(g) = \mu_l + \mathbf{k}_l(g)^T \mathbf{K}_l^{-1} (\mathbf{Y}_s^T \mathbf{u}_l - \mu_l \mathbf{1}_n) \tag{10}$$

and

$$v_l(g) = K_l(g, g) - \mathbf{k}_l(g)^T \mathbf{K}_l^{-1} \mathbf{k}_l(g), \tag{11}$$

其中 $\mathbf{k}_l(g) = (K_l(g, g_1) \ldots, K_l(g, g_n))^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$。因此，由于 $\mathbf{y}^s(g_i) \approx \sum_{l=1}^{L} f_l(g_i) \mathbf{u}_l$，

代理模型 $\mathbf{y}^s(g)$ 服从多元正态分布：

$$\mathbf{y}^s(g) \sim \mathcal{N}_m \left(\sum_{l=1}^{L} m_l(g)\mathbf{u}_l, \sum_{l=1}^{L} v_l(g)\mathbf{u}_l\mathbf{u}_l^T \right). \tag{12}$$

2.2 函数逆问题的贝叶斯方法

给定模型（1）中的输出$\mathbf{y}^p$ ，我们假设未知的函数逆问题服从高斯过程先验。结合（1）、（12）以及先验信息，考虑如下贝叶斯框架：

$$\mathbf{y}^p|g, \sigma_e^2 \sim \mathcal{N}_m \left(\sum_{l=1}^{L} m_l(g)\mathbf{u}_l, \sigma_e^2\mathbf{I}_m + \sum_{l=1}^{L} v_l(g)\mathbf{u}_l\mathbf{u}_l^T \right), \tag{13}$$

$$g(\mathbf{x})|\boldsymbol{\eta}, \sigma_g^2 \sim \mathcal{GP}(0, \tau_g^2\Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')), \tag{14}$$

$$\sigma_e^2 \sim \text{InvGamma}(a_1, b_1), \tag{15}$$

$$\tau_g^2 \propto \text{InvGamma}(a_2, b_2), \tag{16}$$

$$\eta_j \propto \text{Gamma}(a_3, b_3) \quad \text{for} \quad j = 1, \ldots, d, \tag{17}$$

其中，InvGamma(a, b)表示形状参数为 a 、率参数为 b的逆伽马分布。在（14）中，我们假设函数输入 g 服从高斯过程先验，记为 $\mathcal{GP}$，其中 $\Phi_{\boldsymbol{\eta}}$ 是式（5）中的 Mat´ern 核，长度尺度参数为 $\boldsymbol{\eta}$。参数 σ_e^2、 τ_g^2和 $\boldsymbol{\eta}$的先验分布分别如式（15）、（16）和（17）所示。

请注意，在逆问题文献中，高斯过程先验也用于对表示为函数的参数或输入建模；然而，现有的大多数研究都采用截断的 Karhunen–Lo`eve (KL) 展开来降低高斯过程先验的维度 (Marzouk and Najm, 2009; Li and Tan, 2022; Yang等人, 2017)。相比之下，所提出的模型采用了包含长度尺度参数先验密度的高斯过程先验

如 (17) 所示，并避免了基展开和截断，这一点很重要，因为与基展开相关的有限截断可能会引入模型偏差。此外，基于所提出的仿真器 (12)，函数输入仿真器直接通过核函数建模，无需有限基展开。因此，与 Tan (2019) 和 Li and Tan (2022) 相比，输入信息得到了更好的保留；在这两项研究中，仿真器是基于函数型输入的有限基展开构建的。数值比较见第4节。

式 (13) 中似然函数所涉及的计算还可以进一步简化如下。根据 Woodbury矩阵恒等式（Harville，1998）以及对于任意 $l \neq l'$，$\mathbf{u}_l^T\mathbf{u}_l = 1$ 和 $\mathbf{u}_l^T\mathbf{u}_{l'} = 0$ 这一事实，式 (13) 的协方差逆矩阵可写为

$$\left(\sigma_e^2\mathbf{I}_m + \sum_{l=1}^{L} v_l(g)\mathbf{u}_l\mathbf{u}_l^T\right)^{-1} = \frac{1}{\sigma_e^2}\mathbf{I}_m - \frac{1}{\sigma_e^2}\mathbf{U}\left(\sigma_e^2\mathbf{V}_L(g)^{-1} + \mathbf{I}_L\right)^{-1}\mathbf{U}^T$$

其中，$\mathbf{V}_L(g) \in \mathbb{R}^{L\times L}$ 是一个对角矩阵，其每个元素为 $(\mathbf{V}_L(g))_l = v_l(g)$，且协方差的行列式可简化为

$$\det\left(\sigma_e^2\mathbf{I}_m + \sum_{l=1}^{L} v_l(g)\mathbf{u}_l\mathbf{u}_l^T\right) = (\sigma_e^2)^m\prod_{l=1}^{L}\left(1 + \frac{v_l(g)}{\sigma_e^2}\right).$$

因此，式（13）的似然函数可写为

$$\begin{aligned} L(\mathbf{y}^p|g,\sigma_e^2) \propto & (\sigma_e^2)^{-\frac{m}{2}}\prod_{l=1}^{L}\left(1 + \frac{v_l(g)}{\sigma_e^2}\right)^{-1/2} \times \\ & \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_e^2}\left(\left\|\mathbf{y}^p - \sum_{l=1}^{L} m_l(g)\mathbf{u}_l\right\|_2^2 - \sum_{l=1}^{L}\frac{(\mathbf{u}_l^T\mathbf{y}^p - m_l(g))^2}{\sigma_e^2/v_l(g) + 1}\right)\right\}. \end{aligned} \tag{18}$$

由于避免了与 m 维多元正态分布相关的 $m \times m$ 矩阵求逆，式（18）使得式（13）的似然函数能够轻松计算。

为评估似然函数 $L(\mathbf{y}_n^p|g, \sigma_e^2)$，函数 g 被其在低差异序列 $\mathbf{X}_N = \{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ 上的实现 $\mathbf{g}_N = (g(\mathbf{x}_1), \ldots, g(\mathbf{x}_N))^T$ 所替代，从而能够在似然函数中计算 $m_l(g)$ 和 $v_l(g)$；其中，式 (10) 和 (11) 中的核函数 $\mathbf{k}_l(g)$ 根据式 (7) 中的 $\mathbf{g}_N$ 进行近似。因此，给定观测值 $\mathbf{y}^p$ 后，函数输入 $g(\mathbf{x})$ 的后验分布可通过以下方式获得。

$$\pi(g(\mathbf{x}), \mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2|\mathbf{y}^p) \propto \pi(g(\mathbf{x})|\mathbf{g}_N, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2)\pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2|\mathbf{y}^p). \tag{19}$$

$g(\mathbf{x})$ 的联合后验分布可通过马尔可夫链蒙特卡洛（MCMC）迭代抽取 $\pi(g(\mathbf{x})|\mathbf{g}_N, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2)$ 和 $\pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2|\mathbf{Y}_n^p)$ 的样本来近似。对于后验分布 $\pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \sigma_g^2|\mathbf{y}^p)$，可得

$$\pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2|\mathbf{y}^p) \propto L(\mathbf{y}_n^p|\mathbf{g}_N, \sigma_e^2)\pi(\mathbf{g}_N|\boldsymbol{\eta}, \tau_g^2)\pi(\sigma_e^2)\pi(\boldsymbol{\eta})\pi(\tau_g^2) \tag{20}$$

其中，$L(\mathbf{y}_n^p|\mathbf{g}_N, \sigma_e^2)$ 是似然函数（18），其中实现为 $\mathbf{g}_N$；$\pi(\mathbf{g}_N|\boldsymbol{\eta}, \tau_g^2)$ 根据高斯过程先验（14）服从 $\mathcal{N}_N(\mathbf{0}_N, \tau_g^2\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\eta}})$，其中 $\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\eta}}$ 是一个 $N \times N$ 矩阵，其每个元素为 $(\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\eta}})_{i,j} = \Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$；$\pi(\sigma_e^2)$、$\pi(\boldsymbol{\eta})$ 和 $\pi(\tau_g^2)$ 是（15）、（16）和（17）中的先验分布。该后验分布的样本可通过结合 Metropolis-Hastings 算法的吉布斯抽样获得。详细内容见附录A。

后验分布 $\pi(g(\mathbf{x})|\mathbf{g}_N, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2)$ 可以根据条件多元正态分布的性质得到，即，

$$g(\mathbf{x})|\mathbf{g}_N, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2 \sim \mathcal{N}(\Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{X}_N)\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\eta}}^{-1}\mathbf{g}_N, \tau_g^2(1 - \Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{X}_N)\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\eta}}^{-1}\Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{X}_N, \mathbf{x}))),$$

其中 $\Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{X}_N) = (\Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \ldots, \Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_N))$，且 $\Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{X}_N, \mathbf{x}) = \Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{X}_N)^T$。类似地，给定$\mathbf{y}^p$ 和$\mathbf{Y}_s$ 时，$\mathbf{y}^s(g)$ 的后验分布可通过

$$\pi(\mathbf{y}^s(g), \mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2 | \mathbf{y}^p, \mathbf{Y}_s) \propto \pi(\mathbf{y}^s(g) | \mathbf{g}_N, \mathbf{Y}_s) \pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2 | \mathbf{y}^p), \tag{21}$$

其中，来自 $\pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2 | \mathbf{y}^p)$ 的样本可按式 (20) 抽取，而来自$\pi(\mathbf{y}^s(g) | \mathbf{g}_N, \mathbf{Y}_s)$ 的样本可从多元正态分布 (12) 中抽取，并结合实现$\mathbf{g}_N$ 来评估核函数。

3 面向函数型输入的多保真度求解器代理模型

第2节聚焦于逆散射问题中仅有一种求解器可用的情形。实际中，通常有多种精度和计算效率各不相同的求解器可供使用。精确的正问题求解器（亦称高保真度模拟器）涉及由有限元方法求解的非线性微分方程；若要充分探索函数型输入空间，获取足够的训练样本往往成本高得难以承受。另一方面，Born近似（Kazei and Alkhalifah，2018年；Muhumuza 等人，2018年）等线性化近似属于低保真度求解器，旨在作为速度更快的替代方案，但其精度不及高保真度模拟器。图3展示了基于Born近似模拟得到的远场模式；与图2所示的有限元方法模拟相比，这些模式计算速度更快，但精度较低。本文在第2节的基础上提出了一种新的贝叶斯框架，通过整合多保真度模拟来推断散射问题中的函数逆问题。我们将高保真度模拟器记为$\mathbf{y}^s(g)$，将低保真度模拟器记为 $\mathbf{y}^b(g)$。

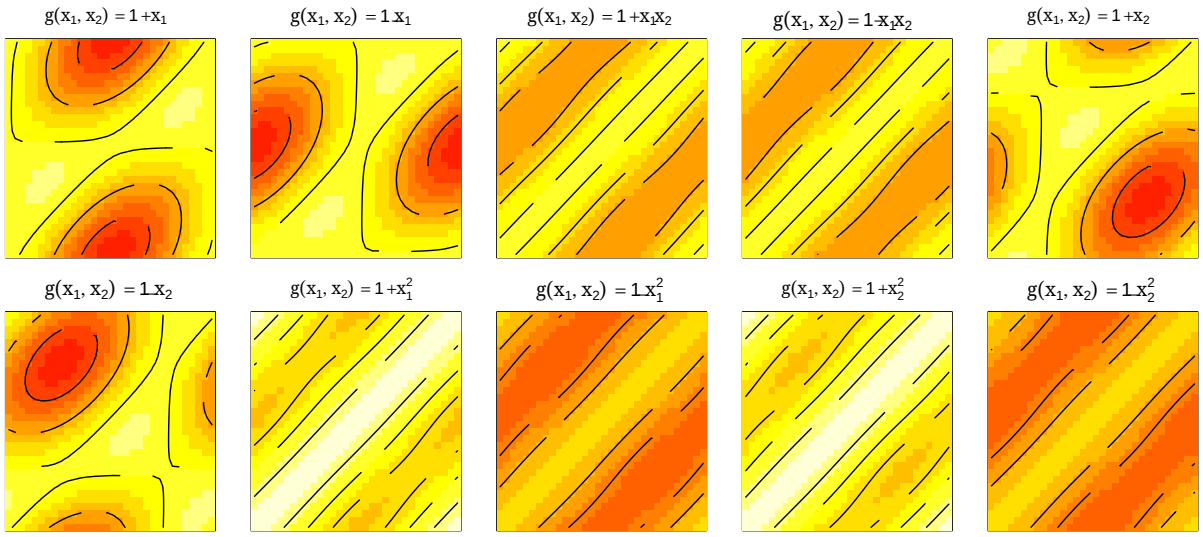

图3： *Born*近似模拟器的训练数据，其中函数型输入列于标题中，图像则是其对应的远场输出。

与第2节类似，我们对图像输出$\mathbf{y}^b(g)$应用主成分分析，其中主成分得分由 $h_l(g) = \mathbf{u}_l^T\mathbf{y}^b(g)$ 给出，式（2）中给出了主成分$\mathbf{u}_l$，其中 $l = 1, \ldots, L$。为模拟高保真度模拟器，我们假设采用一个整合多保真度求解器的自回归模型：

$$f_l(g) = \rho_l h_l(g) + \delta_l(g), \tag{22}$$

其中， ρ_l 是一个未知参数， $\delta_l(g)$是高保真度模拟器与低保真度模拟器之间未知的差异。该模型可以视为 Kennedy and O'Hagan (2000) 提出的自回归模型向函数输入的扩展。与第2节中的思路类似， $h_l(g)$和 $\delta_l(g)$被建模为函数输入高斯过程（Sung 等人，

2023年），即:

$$h_l(g) \sim \mathcal{FIGP}(\mu_{h_l}, K_{h_l}(g, g')) \quad \text{and} \quad \delta_l(g) \sim \mathcal{FIGP}(\mu_{\delta_l}, K_{\delta_l}(g, g')) \tag{23}$$

对于 $l = 1, \ldots, L$，并假设 $\{h_l(g)\}_{l=1}^L$ 和 $\{\delta_l(g)\}_{l=1}^L$ 相互独立。 $\mu_{h_l}, \mu_{\delta_l}, K_{h_l}$ 和 K_{δ_l} 的定义与第 2.1 节中的定义类似。因此可得

$$(h_l(g_1), \ldots, h_l(g_n))^T \sim \mathcal{N}_n(\mu_{h_l}\mathbf{1}_n, \mathbf{K}_{h_l}) \quad \text{and} \quad (\delta_l(g_1), \ldots, \delta_l(g_n))^T \sim \mathcal{N}_n(\mu_{\delta_l}\mathbf{1}_n, \mathbf{K}_{\delta_l}),$$

其中 $(\mathbf{K}^{h_l})_{j,k} = K_{h_l}(g_j, g_k)$ 和 $(\mathbf{K}^{\delta_l})_{j,k} = K_{\delta_l}(g_j, g_k)$。由于 $\delta_l(g_i) = f_l(g_i) - \rho_l h_l(g_i)$ $= \mathbf{u}_l^T($ $\mathbf{y}^s(g_i) - \rho_l \mathbf{y}^b(g_i))$，因此可以通过最大化对数似然函数来估计参数 ρ_l, μ_{δ_l} 以及与核 K_{δ_l} 相关的参数，

$$\text{constant} - \frac{1}{2}\log|\mathbf{K}_{\delta_l}| - \frac{1}{2}((\mathbf{Y}_s - \rho_l\mathbf{Y}_b)^T\mathbf{u}_l - \mu_{\delta_l}\mathbf{1}_n)^T\mathbf{K}_{\delta_l}^{-1}((\mathbf{Y}_s - \rho_l\mathbf{Y}_b)^T\mathbf{u}_l - \mu_{\delta_l}\mathbf{1}_n),$$

其中 $\mathbf{Y}_b = (\mathbf{y}^b(g_1) \ldots, \mathbf{y}^b(g_n)) \in \mathbb{R}^{m\times n}$。参数 μ_{h_l} 以及核 K_{h_l} 的参数可以通过最大化对数似然函数来估计，

$$\text{constant} - \frac{1}{2}\log|\mathbf{K}_{h_l}| - \frac{1}{2}(\mathbf{Y}_b^T\mathbf{u}_l - \mu_{h_l}\mathbf{1}_n)^T\mathbf{K}_{h_l}^{-1}(\mathbf{Y}_b^T\mathbf{u}_l - \mu_{h_l}\mathbf{1}_n).$$

根据条件多元正态分布的性质，未尝试输入 $g \in V$ 对应的输出 $f_l(g)$ 服从正态分布

$$f_l(g)|\mathbf{Y}_s, \mathbf{Y}_b \sim \mathcal{N}(m_l^{(b)}(g), v_l^{(b)}(g)) \tag{24}$$

with

$$m_l^{(b)}(g) = (\rho_l \mu_{h_l} + \mu_{\delta_l}) + \mathbf{t}_l(g)^T \mathbf{V}_l^{-1}(\mathbf{z}_l - \boldsymbol{\mu}_l)$$

and

$$v_l^{(b)}(g) = \rho_l^2 K_{h_l}(g,g) + K_{\delta_l}(g,g) - \mathbf{t}_l(g)^T \mathbf{V}_l^{-1} \mathbf{t}_l(g),$$

其中

$$\mathbf{z}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{Y}_b^T \mathbf{u}_l \\ \mathbf{Y}_s^T \mathbf{u}_l \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu}_l = \begin{pmatrix} \mu_{h_l} \mathbf{1}_n \\ (\rho_l \mu_{h_l} + \mu_{\delta_l}) \mathbf{1}_n \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{V}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{K}_{h_l} & \rho_l \mathbf{K}_{h_l} \\ \rho_l \mathbf{K}_{h_l} & \rho_l^2 \mathbf{K}_{h_l} + \mathbf{K}_{\delta_l} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{t}_l(g) = \begin{pmatrix} \rho_l \mathbf{k}_{h_l}(g) \\ \rho_l^2 \mathbf{k}_{h_l}(g) + \mathbf{k}_{\delta_l}(g) \end{pmatrix},$$

其中 $\mathbf{k}_{h_l}(g) = (K_{h_l}(g, g_1), \ldots, K_{h_l}(g, g_n))^T$ 以及 $\mathbf{k}_{\delta_l}(g) = (K_{\delta_l}(g, g_1), \ldots, K_{\delta_l}(g, g_n))^T$.

根据(24)，第2节中建立的贝叶斯框架可以通过将均值 $m_l(g)$ 和方差 $v_l(g)$ 分别替换为$m_l^{(b)}(g)$ 和 $v_l^{(b)}(g)$，轻松扩展为整合多保真模拟器。

4 逆散射问题的应用

采用所提出的贝叶斯框架，对第1节中介绍的逆散射问题进行重新研究和分析。基于由数学模型模拟生成的训练集，目标是在给定观测到的远场模式的情况下，推断函数输入。本研究中的函数输入 g 表示有界介质的折射率，如图1中部所示。采用所提出的贝叶斯方法确定折射率 g，并使用其后验分布衡量估计不确定性。第4.1节和第4.2节展示了两项分析结果：一项仅基于有限元法模拟器，另一项基于多保真度模拟

（有限元法和 Born近似）。

在本研究中，$\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$，并考虑来自 g 的10个函数型输入，包括1，$1+x_1$，$1-x_1$，$1+x_1x_2$，$1-x_1x_2$，$1+x_2$，$1+x_1^2$，$1-x_1^2$，$1+x_2^2$和 $1-x_2^2$，并将其纳入训练集；相应的有限元方法模拟见图2。首先进行主成分分析，得到三个主成分 $\mathbf{u}_l \in \mathbb{R}^{1024}$，$l=1$，2，3，解释了数据中超过99.99%的变异性，结果见图4。使用函数输入 $g(x_1, x_2) = 1 - \sin(x_2)$ 对所提方法进行测试，该输入显示在图5左图中，其对应的输出 $\mathbf{y}^s(g)$ 显示在中图中。根据模型(1)并结合 $\sigma_e^2 = 0.005^2$生成相应的远场模式 $\mathbf{y}^p$ ，如图5右图所示。

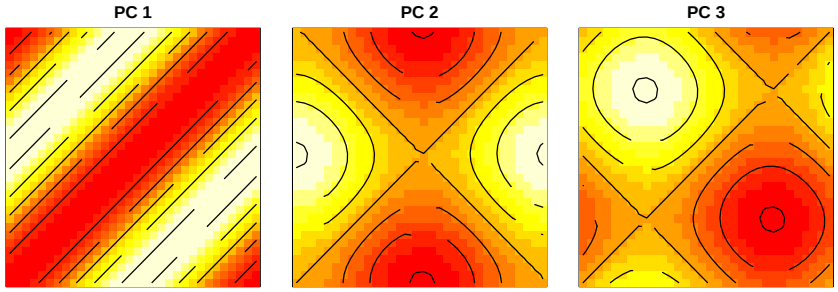

图4 ： 解释了数据中超过*99.99%*变异的主成分 *a.*

先验分布 (15)、(16) 和 (17) 中的超参数设置如下：$a_1 = a_2 = a_3 =$1 和 $b_1 = b_3 = 1$ 以及 $b_2 = 10^{-5}$。马尔可夫链蒙特卡罗抽样包含预热期内的 5000 次迭代，随后额外抽取 5000 个样本，并进行稀疏化以尽量减少自相关。本文考虑平滑度参数为 $\nu = 5/2$ 的 Mat´ern 核函数，由此得到 (6) 的简化形式：

$$\phi(r) = \left(1 + \sqrt{5}r + \frac{5}{3}r^2\right) \exp\left(-\sqrt{5}r\right). \tag{25}$$

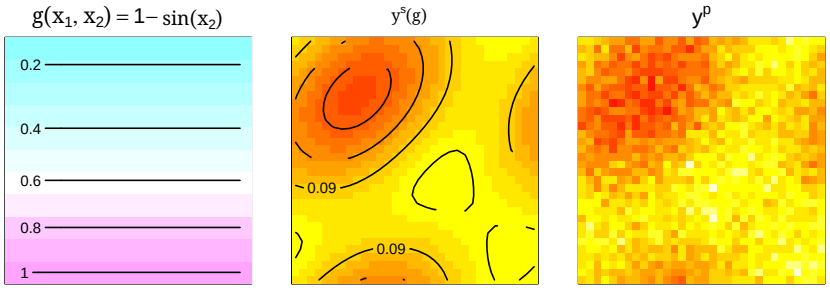

图5： 测试数据示意图。底层函数输入（左）、有限元方法输出（中）以及观测到的远场测量（右）。

	核	$f_1(g)$	$f_2(g)$	$f_3(g)$
留一交叉验证	线性	$\mathbf{7.5 \times 10^{-5}}$	$\mathbf{6.1 \times 10^{-16}}$	$\mathbf{7.6 \times 10^{-16}}$
	非线性	8.1×10^{-5}	2.2×10^{-6}	1.9×10^{-6}

表1： 基于有限元方法模拟，分别给出了每个函数输入高斯过程 $f_l(g)$ 的留一交叉验证误差。与最优核对应的误差以粗体显示。

采用大小为 $N = 100$ 的 Sobol序列（Sobol’，1967；Bratley 和 Fox，1988）来近似 (7) 中的核函数。

4.1 基于有限元模拟的反演结果

第 2.1 节介绍的函数输入高斯过程用于基于图2中展示的有限元模拟 $\{\mathbf{y}^s(g_i)\}_{i=1}^{10}$ 构建仿真器。使用线性核（3）和非线性核（4），分别计算函数输入高斯过程 $f_1(g)$ $f_2(g)$ 和 $f_3(g)$ 的式（8）中定义的留一交叉验证准则。结果汇总于表1，其中建议三个主成分均使用线性核。

基于构建的仿真器，随后应用第2.2节提出的贝叶斯方法

根据图5右侧面板所示的观测响应波，推断函数逆问题。图6展示了MCMC算法在评估函数逆问题的后验分布 g （如式（19）所示）及其对应的预测波$\mathbf{y}^s(g)$（如式（21）所示）时的演进过程。随着算法的推进，采样得到的 g 和对$\mathbf{y}^s(g)$的预测似乎都越来越接近真实值。图7第一和第三个面板展示的 g 和$\mathbf{y}^s(g)$的最终后验均值，似乎准确地恢复了真实函数 g 及其输出$\mathbf{y}^s(g)$；它们显示于图5中。图7第二和第四个面板所示的后验方差可用于量化逆问题恢复和预测相关的不确定性，这些不确定性似乎相当小。

为考察性能，本文将所提方法与基于KL展开并采用有限截断这一思路的现有替代方法进行比较；这是函数型数据分析中的常见方法。通过均方根误差（RMSE）和平均适当评分评估性能。平均适当评分是一种评分规则，通过同时考虑预测均值和方差来衡量总体准确性（Gneiting和Raftery，2007）。具体而言，适当评分定义为 $-\left(\frac{y-\mu_P}{\sigma_P}\right)^2 - \log\,\sigma_P^2$，其中 y为真实输出， μ_P 为预测均值， σ_P^2 为预测方差。得分越高，表示预测性能越好。 g的重建性能（包括均方根误差和适当评分）是根据真实函数$g(x_1,\ x_2) = 1 - \sin(x_2)$的实现值，以及 g 在空间 $\Omega = [0,1]^2$中一组大小为101的网格点上的后验分布计算得出的。

函数型输入不仅参与了第 2.1 节中讨论的仿真器构建，也参与了第2.2节中提出的函数逆问题。在构建具有函数型输入的仿真器时，函数型数据分析文献中广泛采用截断KL展开的思路（Ramsay和Silverman，2005；Reiss等人，2017；

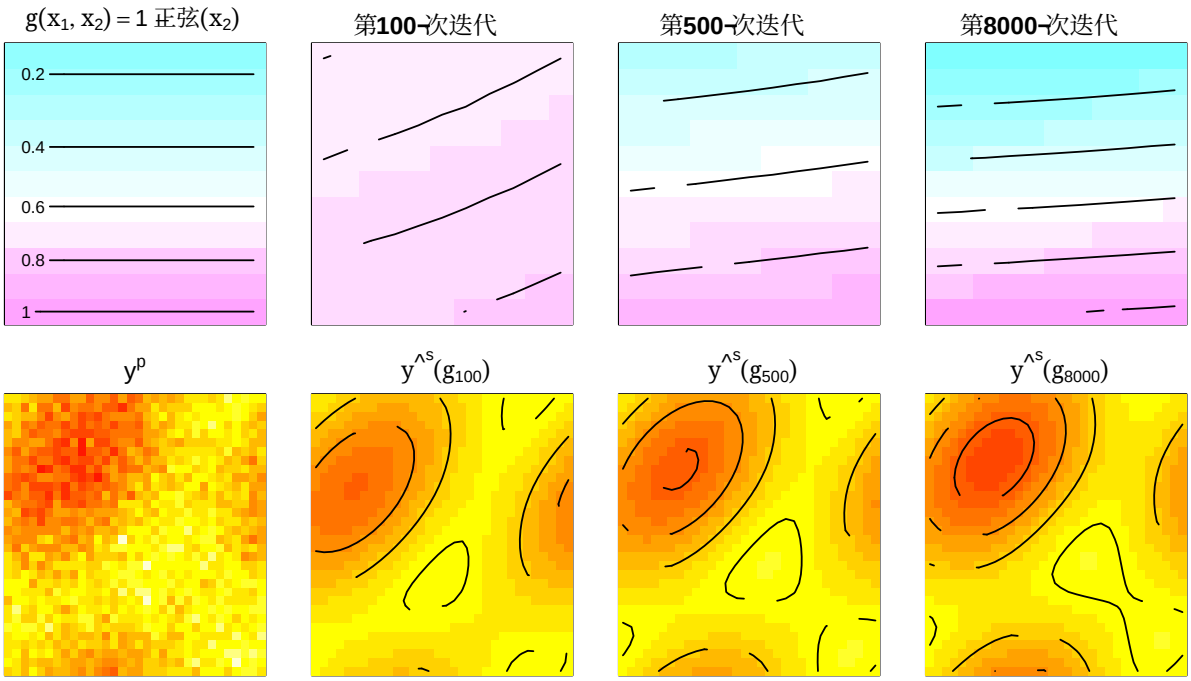

图6： *MCMC*算法的演示。上方各图从左至右分别展示真实函数 g，以及*MCMC*算法在第*100*次、第*500*次和第*8000*次迭代时采样得到的 g 。下方各图从左至右分别展示物理远场模式$\mathbf{y}^p$，以及基于采样得到的 g计算的$\mathbf{y}^s(g)$的相应预测均值。

Yao and M¨uller，2010；M¨uller 等，2013；Tan，2019）。为了求解函数逆问题，Li and Tan (2022) 提出用关于 $\boldsymbol{\eta}$ 的期望来近似高斯过程先验分布 (14) 中的相关函数，该方法可表示为

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \int \Phi_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\pi(\boldsymbol{\eta})\mathrm{d}\boldsymbol{\eta},$$

然后应用 KL 展开和截断，以获得 $C(\mathbf{x},\mathbf{x}')$ 的前几个主导特征函数。尽管这种近似能够加快计算速度，但无法灵活地捕捉不同程度的潜在光滑性。此外，它可能会引入

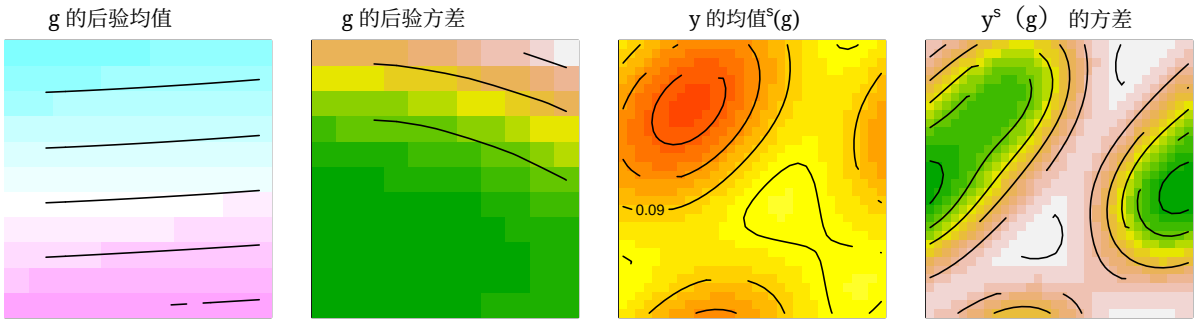

图7： 基于有限元法模拟器得到的逆问题结果。左侧两个面板显示函数 g 的马尔可夫链蒙特卡罗样本的均值和方差，右侧两个面板显示 $\mathbf{y}^s(g)$ 的后验均值和方差。

基展开截断导致的额外模型偏差。

表2展示了所提方法与两种采用 KL 展开思路的不同方案的数值比较。一种方案将 KL 展开用于仿真器构建和函数逆问题（表2第一行），另一种方案仅将其用于函数逆问题（表2第二行）。重建的逆问题结果及相应的远场预测如图8所示。当 KL 展开同时用于仿真器构建和逆问题恢复（第一行）时， g 的函数恢复和$\mathbf{y}^s(g)$的输出预测的均方根误差都较大。用所提 FIGP（第二行）替代 KL 展开来构建仿真器后，与第一行相比，均方根误差显著降低。这一观察结果与图8所示结果一致：第二行在逆问题恢复和远场预测两方面都优于第一行。这一发现表明，与 KL 展开因有限截断而给模型带来额外偏差相比，按照 FIGP 的做法通过核保留函数输入信息十分重要。第三行表示所提方法 FIGP+GP，其中 FIGP 用于仿真器构建，GP 用于估计函数逆问题。

			已恢复 g		$\mathbf{y}^s(g)$	
	仿真器	逆	RMSE	得分	RMSE	得分
FEM	KL	KL	0.815	-1.493	0.008572	8.73
	FIGP	KL	0.054	4.436	0.000571	6.67
	FIGP	GP	**0.028**	5.623	0.000456	14.31
有限元法 + Born	FIGP	GP	0.033	**5.782**	**0.000243**	**15.857**

表2： 通过单保真度模拟（有限元法）与多保真度模拟（有限元法 *+Born*）恢复的函数 g 和 $\mathbf{y}^s(g)$ 的性能。较好的性能以粗体标出。

结果表明，在均方根误差和适当评分方面，所提方法优于另外两种方案。

4.2 多保真度模拟的反演结果

在本小节中，我们应用第3节提出的多保真度代理建模贝叶斯框架，利用低保真度模拟（图3所示的Born近似）的计算效率，提升高保真度模拟（图2所示的有限元法）的预测效果。函数输入高斯过程按照式（23）应用，并针对采用线性核和非线性核的各个函数输入高斯过程计算留一交叉验证，其结果汇总于表3。结果表明，对于函数输入高斯过程 $\{h_l(g)\}_{l=1}^3$，线性核更为合适；而对于 $\{\delta_l(g)\}_{l=1}^3$，非线性核更为合适。估计得到的自回归参数为 $\hat{\rho}_1 = 0.62$，$\hat{\rho}_2 = 1.35$ 和 $\hat{\rho}_3 = 1.35$。

g 和$\mathbf{y}^s(g)$的后验均值和方差如图9所示。可以看出， g 和$\mathbf{y}^s(g)$都得到了较为准确的恢复，且不确定性较小。均方根误差和平均适当评分报告于表2最后一行。尽管其表现

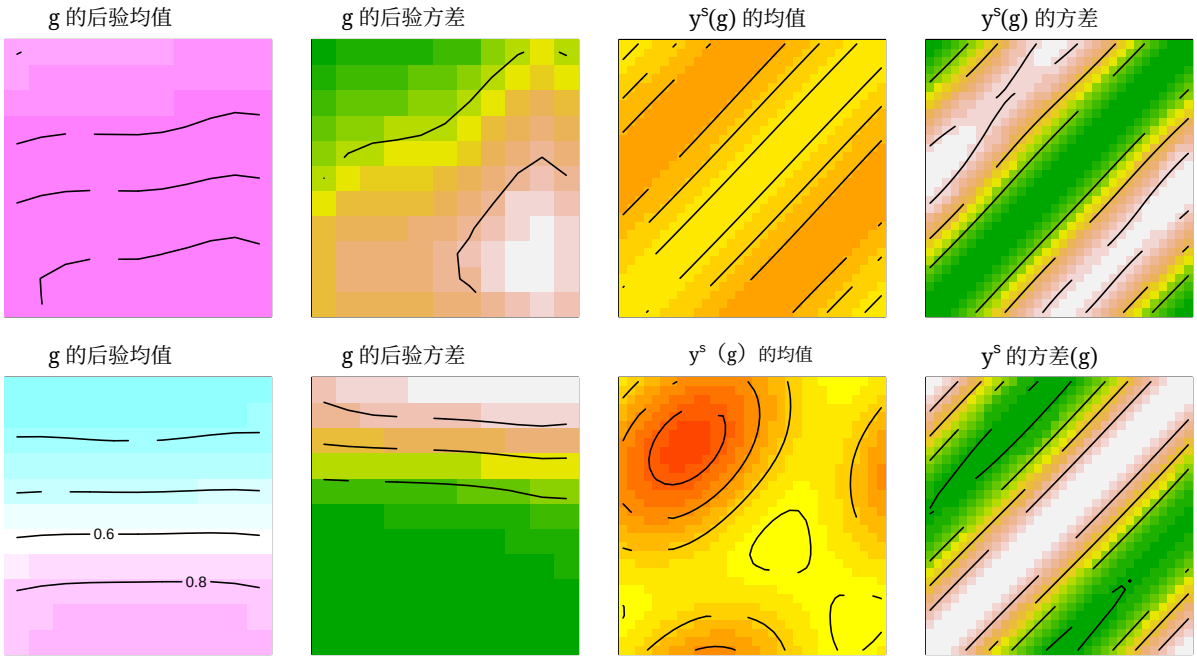

图8： 基于 *KL*展开的结果。第一行展示了将 *KL*展开应用于仿真器构建和函数逆问题时的结果，对应表*2*的第一行。第二行展示了将 *KL*展开应用于函数逆问题时的结果，对应表*2*的第二行。

在重建 g 方面，其均方根误差与单保真度模拟器相当，但采用低保真度（Born近似）模拟会提高适当评分，这表明逆重建中的变化幅度较小具有优势。此外，结合多保真度模拟提高了$\mathbf{y}^s(g)$的重建精度，从而降低了均方根误差并获得更好的适当评分。这一观察结果与计算机实验文献中的发现一致（Kennedy and O'Hagan，2000年；Sung 等人，2022年）。总之，所提出的贝叶斯逆方法能够通过单保真度和多保真度仿真器准确恢复函数输入 g 。

	核	$h_1(g)$	$h_2(g)$	$h_3(g)$
留一交叉验证	线性	$\mathbf{6.3 \times 10^{-16}}$	$\mathbf{4.1 \times 10^{-16}}$	$\mathbf{4.2 \times 10^{-16}}$
	非线性	6.6×10^{-7}	1.2×10^{-6}	1.1×10^{-6}
	核	$\delta_1(g)$	$\delta_2(g)$	$\delta_3(g)$
留一交叉验证	线性	7.5×10^{-5}	7.6×10^{-18}	9.5×10^{-20}
	非线性	$\mathbf{6.8 \times 10^{-5}}$	$\mathbf{7.3 \times 10^{-18}}$	$\mathbf{8.9 \times 10^{-20}}$

表3： 基于多保真度模拟的各函数输入高斯过程的留一交叉验证误差（*LOOCV*）。与最优核对应的误差以粗体显示。

5 结论

散射问题中的函数逆重建在科学与工程领域日益受到关注。本文提出了一种新的贝叶斯框架，其中包括一个代理模型，该模型通过核函数直接处理函数型输入；同时还包括一个层次贝叶斯程序，通过后验分布推断函数型输入。所提方法的主要贡献在于，通过采用定义于函数空间中的具有线性核和非线性核的高斯过程先验，避免了函数型数据分析中常用的有限基展开所造成的模型偏差。此外，所提贝叶斯方法还整合了多保真度模拟，以提高函数逆重建的准确性。

除了论文中讨论的马尔可夫链蒙特卡罗，我们还希望探索其他方法，包括变分贝叶斯推断（Jordanet al., 1999；Wainwright 和 Jordan，2008；Tran 等，2015；Hensman 等，2015；Blei 等，2017）。这类方法有望加快计算速度并提升可扩展性，尤其适用于大型数据集。另一项从所提方法延伸出的有趣研究方向是

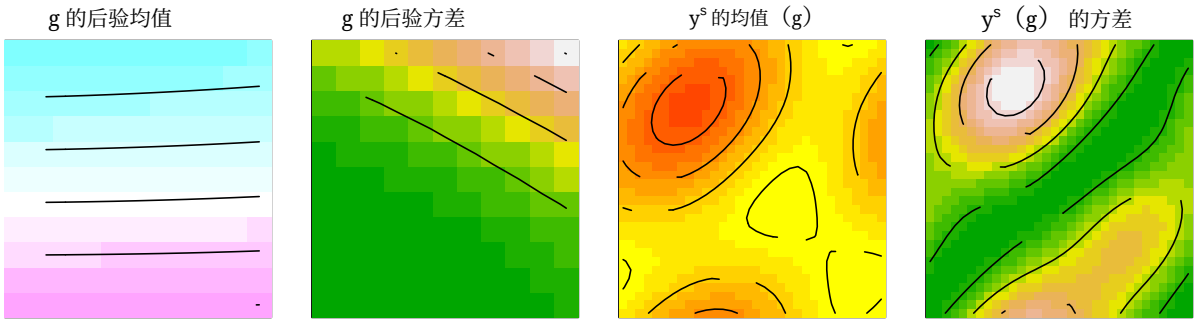

图9： 基于多保真模拟器（有限元法和 *Born* 近似）的逆问题结果。左侧两幅图显示函数 g 的马尔可夫链蒙特卡罗样本的均值和方差，右侧两幅图显示 $\mathbf{y}^s(g)$ 的后验均值和方差。

函数空间中的实验设计。尽管关于计算机实验最优设计的研究已有很多，但针对函数型输入的研究仍然很少。特别是，计算机实验中广泛使用的空间填充设计依赖于基于欧几里得空间定义的距离度量，因此无法直接应用于函数空间。此外，在实践中，开发适用于函数空间中多保真度模拟的高效实验设计也很有意义。

补充材料 复现第4节结果的代码见补充材料。

附录

采样器细节

我们通过吉布斯抽样介绍分布 $\pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2 | \mathbf{y}^p)$ 的采样器，该分布通过以下方式迭代抽取

$$\pi(\mathbf{g}_N | \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2, \mathbf{y}^p), \tag{26}$$

$$\pi(\sigma_e^2 | \mathbf{g}_N, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2, \mathbf{y}^p), \tag{27}$$

$$\pi(\boldsymbol{\eta} | \sigma_e^2, \mathbf{g}_N, \tau_g^2, \mathbf{y}^p), \tag{28}$$

$$\pi(\tau_g^2 | \sigma_e^2, \mathbf{g}_N, \boldsymbol{\eta}, \mathbf{y}^p). \tag{29}$$

条件分布 (26) 可通过 Metropolis-Hastings 算法抽样。我们使用多元正态分布作为提议分布，来抽取候选样本$\mathbf{g}'_N$ by

$$\mathbf{g}'_N = c_g \tau_g \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\eta}}^{1/2} \mathbf{Z}_N + \mathbf{g}_N,$$

其中，$\mathbf{Z}_N \sim \mathcal{N}_N(0, \mathbf{I}_N)$，$\mathbf{I}_N$是大小为 N 的单位矩阵，而 $c_g > 0$ 是一个小常数，可通过监测接受率自适应确定。我们以如下概率接受 $\mathbf{g}^{(k+1)} = \mathbf{g}'_N$。

$$\min \left\{ 1, \frac{\pi(\mathbf{g}_N^{(k+1)}, (\sigma_e^2)^{(k)}, \boldsymbol{\eta}^{(k)}, (\tau_g^2)^{(k)} | \mathbf{y}^p)}{\pi(\mathbf{g}_N^{(k)}, (\sigma_e^2)^{(k)}, \boldsymbol{\eta}^{(k)}, (\tau_g^2)^{(k)} | \mathbf{y}^p)} \right\}.$$

其中，$\pi(\mathbf{g}_N, \sigma_e^2, \boldsymbol{\eta}, \tau_g^2 | \mathbf{y}^p)$ 是式 (20) 中的分布，上标 $k+1$ 和 k 分别表示第 $k+1$ 次和第 k 次迭代。

条件分布 (27) 也可以通过 Metropolis-Hastings 算法抽样，

其中，提议分布的抽样方式为

$$\log((\sigma_e^2)') = c_s z + \log(\sigma_e^2),$$

其中， z 服从标准正态分布， c_s 是一个较小的常数。我们以如下概率接受 $(\sigma_e^2)^{(k+1)} = (\sigma_e^2)'$

$$\min\left\{1, \frac{\pi(\mathbf{g}_N^{(k)}, (\sigma_e^2)^{(k+1)}, \boldsymbol{\eta}^{(k)}, (\tau_g^2)^{(k)}|\mathbf{y}^p)}{\pi(\mathbf{g}_N^{(k)}, (\sigma_e^2)^{(k)}, \boldsymbol{\eta}^{(k)}, (\tau_g^2)^{(k)}|\mathbf{y}^p)}\right\}.$$

参数 $\boldsymbol{\eta}^{(k+1)}$ 可按照类似方式从（28）中抽取。样本 $(\tau_g^2)^{(k+1)}$也可根据其后验分布（29）抽取，该分布为逆伽马分布，其形状参数为 $a_2 + N/2$ ，率参数为

$$b_2 + \frac{1}{2}\left((\mathbf{g}_N^{(k)})^T \boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{\eta}^{(k)}}^{-1} \mathbf{g}_N^{(k)}\right).$$

参考文献

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

Bratley, P. and Fox, B. L.（1988）。算法659：实现Sobol准随机序列生成器。*ACM*数学软件汇刊（*TOMS*）， 14(1):88– 100。

Brown, D. A. and Atamturktur, S. (2018). 计算机模型的非参数函数校准。《中华统计学志》, 28(2):721–742.

Cakoni, F., Colton, D., and Haddar, H. (2016). 《逆散射理论与透射特征值, *CBMS-NSF* 应用数学区域会议系列》。费城：SIAM。Cakoni, F. and Colton, D. L. (2014). 逆散射理论的定性方法, 第188卷。施普林格。Colton, D. and Kress, R. (2006). 在逆散射中使用基本解。逆问题, 22(3):R49。Courdurier, M., Noo, F., Defrise, M., and Kudo, H. (2008). 利用先验知识求解计算机断层成像的内部问题。逆问题, 24(6):065001。Gneiting, T. and Raftery, A. E. (2007). 严格适当的评分规则、预测与估计。《美国统计学会杂志》, 102(477):359–378。Gramacy, R. B. (2020). 《代理模型：应用科学中的高斯过程建模、设计与优化》。CRC出版社。Harville, D. A. (1998). 统计学家视角下的矩阵代数。施普林格，纽约，NY。Hensman, J., Matthews, A., and Ghahramani, Z. (2015). 可扩展的变分高斯过程分类。载于人工智能与统计学，第351–360页。PMLR。Jordan, M. I., Ghahramani, Z., Jaakkola, T. S., and Saul, L. K. (1999). 图模型变分方法简介。《机器学习》, 37(2):183–233。Kaipio, J., Huttunen, T., Luostari, T., L¨ahivaara, T., and Monk, P. (2019). 一种利用高对比度材料改进逆散射Born近似的贝叶斯方法。逆问题, 35(8):084001.

Kaipio, J. 和 Somersalo, E. (2006). 统计与计算反问题，第 160 卷。Springer Science & Business Media。

Kazei, V. 和 Alkhalifah, T.（2018年）。利用P波进行正交各向异性波形反演：可行性与分辨率。《国际地球物理学杂志》，213(2):963–982。

Kennedy, M. C. and O'Hagan, A.（2000年）。当存在快速近似时，预测复杂计算机代码的输出。《生物统计学》，87(1):1–13。

Li, Y.、Li, K.、Zhang, C.、Montoya, J. 和 Chen, G.-H.（2019）。在各种数据采集条件下学习直接从正弦图数据重建计算机断层成像图像。《*IEEE*医学影像汇刊》，38(10):2469–2481。

Li, Z.和Tan, M.H.Y.（2022）。一种基于高斯过程仿真器的函数输入贝叶斯校准方法。《技术计量学》，64(3):299–311。

Marzouk, Y. M. 和 Najm, H. N.（2009）。逆问题中贝叶斯推断的降维与多项式混沌加速。《计算物理学杂志》，228(6):1862–1902。

Morokoff, W. J. 和 Caflisch, R. E.（1995）。准蒙特卡罗积分。《计算物理学杂志》，122(2):218–230。

Mueller, J. L. 和 Siltanen, S.（2020）。电阻抗断层成像的 D-bar方法——揭秘。逆问题，36(4):093001。

Muhumuza, K., Jakobsen, M., Teemu, L., and L¨ahivaara, T.（2018年）。在声学近似下使用畸变Born T矩阵方法进行二氧化碳注入的地震监测。《地震勘探杂志》，27(5):403–431。

M¨uller, H.-G., Wu, Y., and Yao, F.（2013）。用于非线性函数回归的连续可加模型。《生物统计学》，100(3):607–622。

Plumlee, M., Joseph, V. R., 和 Yang, H.（2016）。校准心脏细胞离子通道模型中的函数参数。《美国统计学会杂志》，111(514):500–509。

R 核心团队（2018年）。*R*：用于统计计算的语言和环境。R 统计计算基金会，维也纳，奥地利。

Ramsay, J. O. 和 Silverman, B. W.（2005）。函数型数据分析（第二版）。施普林格，纽约，纽约州。

Reiss, P. T., Goldsmith, J., Shang, H. L. 和 Ogden, R. T.（2017）。标量对函数回归的方法。《国际统计评论》，85(2):228–249。

Santner, T. J., Williams, B. J. 和 Notz, W. I.（2018年）。计算机实验的设计与分析（第二版）。施普林格，纽约。

Sobol’，I. M.（1967）。关于立方体中的点的分布与积分的近似求值。《style id='1'>《计算数学与数学物理杂志》，7(4)：784–802。

Stein, M. L.（1999）。空间数据插值：克里金法的一些理论。Springer Science & Business Media。

Sung, C.-L. (2022). 估计函数参数，以了解天气和政府干预对 COVID-19 暴发的影响。《应用统计年鉴》, 16(4):2505–2522.

Sung, C.-L., Ji, Y., Tang, T., and Mak, S.（2022）。堆叠设计：以置信度设计多保真计算机实验。*arXiv* 预印本 *arXiv:2211.00268*。

Sung, C.-L., Wang, W., Cakoni, F., Harris, I., 和 Hung, Y. (2023年). 函数输入高斯过程及其在逆散射问题中的应用. 《中华统计学志》, 即将发表。

Tan, M. H. (2019). 基于函数型输入的有限元模型高斯过程建模. 《*SIAM/ASA* 不确定性量化杂志》, 7(4):1133–1161.

Tran, D., Ranganath, R., 和 Blei, D. M. (2015). 变分高斯过程. *arXiv* 预印本 *arXiv:1511.06499*.

Tuo, R., He, S., Pourhabib, A., Ding, Y., 和 Huang, J. Z. (2021). 一种基于再生核希尔伯特空间的计算机模型函数校准方法. 《美国统计学会杂志》, 即将发表。

Wainwright, M. J. 和 Jordan, M. I. (2008). 图模型、指数族与变分推断. $Foundations\ and\ Trends$® *in* 《机器学习》, 1(1–2):1–305.

Yang, K., Guha, N., Efendiev, Y. 和 Mallick, B. K.（2017）。用于非均质随机介质中流动的贝叶斯方法和变分贝叶斯方法。《计算物理学杂志》, 345：275–293。

Yao, F. 和 M¨uller, H.-G.（2010）。函数型二次回归。《生物统计学》, 97(1)：49–64。