arXiv:2601.04557v1 [math.NA] 8 Jan 2026

显式约束力方法的最优实验设计

Conor Rowan

航空航天工程 科罗拉多大学博尔德分校 3775 Discovery Drive 博尔德，科罗拉多州 80309
conor.ro
wan@colorado.edu

摘要

显式约束力方法（ECFM）最近作为一种新颖的物理信息驱动的解重构问题表述被提出，随后又扩展到了逆问题。在解重构和逆问题中，模型参数都借助测量数据进行估计。实践中，实验人员希望设计实验，使所获取的数据能够在后续逆问题中最稳健地恢复缺失参数。虽然针对采用标准方法求解逆问题的实验设计已有成熟技术，但基于 ECFM 表述的最优实验设计（OED）尚未得到探索。本文研究了以约束力目标函数为基础的 OED。首先，我们回顾基于费 Fisher 信息矩阵的传统 OED 方法，并提出一种基于约束力的类似表述。接着，我们探讨标准逆问题与基于约束力的逆问题对目标函数的不同解释。随后，我们在若干示例问题上检验该方法。这些示例表明，以约束力为准则的最优实验倾向于将测量布置在系统最刚硬的区域。由于这些区域中的响应——因而测量值——较小，因此在存在测量噪声和／或测量精度有限的情况下，这种策略并不实用。因此，我们目前的结论是，ECFM 并非可行的 OED 方法。

关键词 显式　　约束力方法 · 逆问题 · 实验设计 · 费 Fisher 信息矩阵

1 引言

从牛顿万有引力定律到纳维-斯托克斯方程和麦克斯韦方程，所有科学模型都依赖于通过测量数据校准的经验参数。与基于大型神经网络的现代机器学习方法不同，工程学和物理学模型利用了丰富的先验知识，通常体现为守恒定律，这大幅减少了需要拟合的经验参数数量。实践中，人们通过求解“逆问题”来确定模型参数。哲学家兼物理学家 Mario Bunge 将此描述为识别“可观测效应的隐藏成因” [2]。值得注意的是，将问题视为数据拟合（通过回归）还是模型校准（通过逆问题），两者之间的差异在很大程度上取决于参数数量；不过，人们通常认为这两类模型具有不同的泛化特性 [1]。

逆问题在性质上可以是概率型的，也可以是确定性的。例如，贝叶斯逆问题方法利用数据为未知参数 [4] 构建概率分布。通过对参数设定先验分布来纳入领域知识，贝叶斯方法在测量数据稀缺时十分有用。此外，贝叶斯方法便于处理病态问题，因为多模态后验分布可以避免对非唯一参数作出过度自信的点估计 [21]。与贝叶斯方法不同，确定性逆问题旨在寻找一组参数，使模型的预测尽可能符合测量数据 [23]。近年来，这种方法在物理信息机器学习文献中尤为流行，因为它可以方便地融入物理信息神经网络训练的标准流程。例如，最初的物理信息神经网络论文利用流动数据从纳维–斯托克斯方程中恢复了缺失的黏度 [15]。

求解逆问题依赖于由实验生成的测量数据。正如关于可辨识性的文献所表明的，并非所有数据都能提供足够的信息来恢复感兴趣的参数 [13, 9, 5]。粗略而言，若给定数据集和参数化模型后，存在唯一一组参数设定，能够使误差相对于测量数据最小化，则这些参数是可辨识的。例如，如果两组参数在测量位置预测出相同的解，那么该问题就是不可辨识的。逆问题可能不可辨识，这意味着开展实验时必须考虑后续的逆问题。我们不仅可以选择测量位置，还可以选择实验试样的尺寸 [20], , 以及系统中源项的位置/强度 [7]。旨在设计信息量最大的实验的系统化方法属于最优实验设计（OED）领域。正如 [6], 所述，最优实验设计为以下问题提供了数学解答：

> 传感器应放在哪里？应施加什么实验条件？应观测什么量？测量需要非常精确吗，还是噪声较大的测量也足够？何时进行测量？又应收集多少数据？更广泛地说，怎样的观测值组合

最具信息量或最有用——而我们又该如何精确定义“信息量大”或“有用”这些概念?

在许多领域，最优实验设计策略已被成功用于提高输入数据的质量，从而获得更稳健的参数估计。在地震学中，研究表明，通过最优实验设计谨慎布置测量点，可以降低全波反演逆问题的计算成本 [12]。在固体力学中，为弹塑性试样选择最优加载路径，可以减小所恢复本构模型的不确定性 [16]。最后，最优实验设计技术已被用于设计农业领域的田间试验，从而实现更加可持续且更具盈利能力的农场经营 [10]。

尽管最优实验设计方法已在广泛的应用领域中得到研究，但它们都依赖于逆问题的传统表述。最近，显式约束力方法（ECFM）作为一种在存在设定错误的模型时进行解重构的新方法被提出 [19]。ECFM在系统中引入额外的源项，以强制参数化模型与测量数据保持一致。随后选择模型参数，使约束力的大小最小，而约束力在最小值处的数值则提供了参数化系统与数据之间一致性的度量。该方法旨在进行解重构，其中数据被视为真实基准，而参数化模型可能存在设定错误。当使用数字孪生体时，往往会出现这种情况，因为其底层物理机制通常未知或复杂到难以处理 [22]。鉴于解重构与逆问题在数学上的相似性，后续研究将ECFM扩展到了逆问题 [17]。在这里，与解重构的情况一样，所选择的参数应使确保与测量数据一致的约束力最小。这与标准的确定性表述形成对比，后者寻求使系统状态与数据之间不匹配程度最小的参数。

本文旨在探索如何运用该逆问题的约束力表述进行最优实验设计。第 2 节回顾一种基于 Fisher 信息矩阵及其特征值的传统实验设计方法，并指出 ECFM 最适用于确定性设定，进而提出一种不依赖概率推断的问题解释。随后，我们回顾由偏微分方程（PDEs）支配的系统中的逆问题。第 3 节介绍显式约束力方法，并提出将最优实验设计扩展至基于约束力的逆问题。第 4 节对比逆问题的两种视角，指出 ECFM 在“力”的意义上提供最优参数，而标准平方误差方法则在“位移”的意义上实现最优。本节提供的直觉将有助于理解后续示例的结果。第 5 节在一个理想化问题上检验该方法；对于这一问题，我们有解析解。我们研究的四种逆问题变体所得结果表明，基于约束力的最优实验设计倾向于选择系统中刚度最大的区域作为测量位置。第 6 节讨论这些结果，并最终得出结论：ECFM 并不适用于最优实验设计。

2 最优实验设计

2.1 研究现状

最常见的最优实验设计方法依赖于 Fisher 信息矩阵。为说明这一点，考虑以下非线性回归问题：

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\epsilon}) + \boldsymbol{\eta}, \tag{1}$$

其中，$\mathbf{y}$ 表示系统的观测响应，$\mathbf{f}$ 是由 $\boldsymbol{\epsilon}$ 参数化的模型，它接受输入 $\mathbf{x}$，而 $\boldsymbol{\eta}$ 是均值为零且分布已知的测量噪声。一般而言，这个回归问题是非线性的，即参数 $\boldsymbol{\epsilon}$ 并不构成基函数的线性组合。假设我们有 C 个观测值 $\{\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i\}_{i=1}^{C}$。利用测量噪声的分布，我们可以将对数似然写为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\epsilon}) = \sum_{i=1}^{C} \log p(\mathbf{y}_i | \mathbf{x}_i; \boldsymbol{\epsilon}), \tag{2}$$

其中， $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$ 是测量噪声的密度。费 Fisher 信息矩阵$\mathbf{I}$ 定义为负对数似然 [14] 的海森矩阵的期望：

$$\mathbf{I}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbb{E}\left(-\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^2} \mathcal{L}(\boldsymbol{\epsilon}) \right).$$

实验设计依赖于“实验控制量”的存在，通过这些控制量可以调整实验设置。它们通常对应测量位置，但并非必须如此。例如，实验人员可能希望在测量位置固定的情况下，确定测试样本的最佳尺寸。下文中，我们用一组参数 $\boldsymbol{\beta}$ 表示控制量。为便于说明，我们将控制量设为测量位置 $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{C}$。因此，最优实验设计的目标是根据参数化模型，确定信息量最大的测量位置。对于“信息量”有多种不同的定义，我们选择关注所谓的 E-准则 [6], , 它将最优实验设计问题定义为

$$\underset{\boldsymbol{\beta}}{\text{argmax}} \ \min(\text{eig}(\mathbf{I}(\boldsymbol{\epsilon}; \boldsymbol{\beta}))), \tag{3}$$

其中 eig(·) 表示特征值的集合。与最小特征值对应的特征向量给出了对数似然损失景观中曲率最小的方向。当这一曲率趋近于零时，参数可以沿对应的特征向量方向变化，而不改变损失函数，这表明存在不可辨识性。因此，E-准则旨在提高损失曲面上最不可辨识方向的可辨识性。就目前的形式而言，式 (3) 存在两个问题：首先，对数似然取决于观测响应 $\{\mathbf{y}_i\}_{i=1}^{C}$,

其次，我们只关心最优参数设置 $\boldsymbol{\epsilon}^* = \operatorname{argmin}\ \mathcal{L}(\boldsymbol{\epsilon})$ 处的损失曲率。参数之所以最优，是因为似然经过最大化；而 $\boldsymbol{\epsilon}^*$ 是另一个需要了解数据才能确定的量。如果我们将实验控制量 $\boldsymbol{\beta}$ 视为测量位置，这意味着要使用式 (3)，就需要知道 $\mathbf{y}(\boldsymbol{\beta})$。然而，如果系统在所有测量位置上的响应都已知，就没有必要通过最优实验设计（OED）策略性地布置一组离散测量。这是最优实验设计中的根本矛盾——要想**真正**设计出最优实验，就必须事先知道系统的响应。但如果满足了这一条件，就没有必要再设计实验。

为了说明如何解决这些矛盾，我们采用一个具体示例。我们取公式 (1) 中的回归问题，并假设测量噪声在系统响应的各个分量之间不相关，且在空间中的每个点上相互独立：

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{x}_i;\boldsymbol{\epsilon}) + \boldsymbol{\eta}_i, \quad \boldsymbol{\eta}_i \overset{i.i.d.}{\sim} N(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I}),$$

其中，σ^2 是每个坐标方向上的方差。鉴于噪声服从多元正态分布，我们写作

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x};\boldsymbol{\epsilon}) \propto \exp\!\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\|\mathbf{y}-\mathbf{f}(\mathbf{x};\boldsymbol{\epsilon})\|^2\right).$$

公式 (2) 的对数似然及其海森矩阵可以直接进行解析计算。它们为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\epsilon}) = -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{C}\|\mathbf{y}_i-\mathbf{f}(\mathbf{x}_i;\boldsymbol{\epsilon})\|^2, \quad \frac{\partial^2\mathcal{L}}{\partial\boldsymbol{\epsilon}^2} = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{C}\left(-\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}}\cdot\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}} + (\mathbf{y}_i-\mathbf{f}(\mathbf{x}_i;\boldsymbol{\epsilon}))\cdot\frac{\partial^2\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}^2}\right). \quad (4)$$

现在注意到，为了得到费 Fisher 信息矩阵，我们需要对公式 (4) 中的负海森矩阵取期望。利用测量噪声重写模型残差（$\mathbf{y}-\mathbf{f}$）后，费 Fisher 信息矩阵为

$$\mathbf{I}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbb{E}\left(\frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{C}\left(\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}}\cdot\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}} - \boldsymbol{\eta}_i\cdot\frac{\partial^2\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}^2}\right)\right) = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{C}\left(\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}}\cdot\frac{\partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial\boldsymbol{\epsilon}}\right), \quad (5)$$

这是回归模型的确定性结构和噪声的零均值性质所导致的结果。请注意，式（5）中没有出现数据，因此无需预先知道数据。注意，鉴于两个梯度项具有外积结构，费 Fisher 信息矩阵由 C 个秩一贡献构成。这意味着其秩至多为 C；若 $|\boldsymbol{\epsilon}| > C$，最小特征值将始终为零。不过，如果 $\partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)/\partial\boldsymbol{\epsilon} \parallel \partial\mathbf{f}(\mathbf{x}_j)/\partial\boldsymbol{\epsilon}$ 对于 $i \neq j$，费 Fisher 信息矩阵也可能变为秩亏。因此，式（5）具有一项实用特性：它会抑制测量点重合。

除非模型 $\mathbf{f}$ 关于 $\boldsymbol{\epsilon}$ 是线性的，否则模型参数会出现在费 Fisher 信息矩阵中。请回想，我们只关心最优参数设置处的损失曲率，但要确定最优参数，必须同时知道数据，而求得最优参数正是整个最优实验设计过程的目标。因此，我们仍未能解决费 Fisher 信息矩阵在参数空间中的评估点未知这一问题。一个直接的解决办法是为参数赋予先验分布 $\rho(\boldsymbol{\epsilon})$。此时，不再最大化解处费 Fisher 信息矩阵的最小特征值，而是将 E-准则修改为最大化期望费 Fisher 信息矩阵的最小特征值：

$$\underset{\boldsymbol{\beta}}{\operatorname{argmax}} \min\left(\operatorname{eig}\left(\int \mathbf{I}(\boldsymbol{\epsilon};\boldsymbol{\beta})\rho(\boldsymbol{\epsilon})d\boldsymbol{\epsilon}\right)\right). \tag{6}$$

这种针对参数呈非线性模型实施最优实验设计的策略通常称为贝叶斯费 Fisher 信息矩阵 [11]。例如，在噪声服从正态分布、参数具有给定先验且测量位置由参数化方式表示的情况下，采用贝叶斯费 Fisher 信息矩阵的 E-准则优化问题为

$$\underset{\boldsymbol{\beta}_1,\ldots,\boldsymbol{\beta}_N}{\operatorname{argmax}} \min\left(\operatorname{eig}\left(\int \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}\cdot\frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}\right)\rho(\boldsymbol{\epsilon})d\boldsymbol{\epsilon}\right)\right).$$

2.2 确定性视角

我们指出，无需借助概率推断即可得到式 (6)。理解这一点有助于制定一种依赖约束力的最优实验设计策略，因为约束力在确定性设定中更为自然。为此，我们使用标准的均方误差目标函数求解式 (1) 中的回归问题：

$$\mathcal{Z}(\boldsymbol{\epsilon}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{C}\|\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i;\boldsymbol{\epsilon})\|^2. \tag{7}$$

众所周知，当测量噪声为零均值高斯噪声时，最小化该目标函数等价于对参数$\boldsymbol{\epsilon}$ 进行最大似然估计。不过，为避免采用概率视角，我们不再深入讨论这种联系。和之前一样，假设实验由控制量 $\boldsymbol{\beta}$ 参数化。将 E-准则自然地推广到确定性回归，可得以下优化问题：

$$\begin{aligned}\underset{\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\epsilon}}{\operatorname{argmax}} \min&\left(\operatorname{eig}\left(\frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^2}\right)\right)\\ &\text{s.t. } \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} = \mathbf{0}.\end{aligned} \tag{8}$$

这个问题可解释如下：寻找实验配置 $\boldsymbol{\beta}$，使得相对于 $\boldsymbol{\epsilon}$ 将误差最小化时，最不可辨识方向尽可能具有可辨识性。有趣的是，从数学角度来看，式 (8) 等价于针对结构屈曲进行设计。如果 $\mathcal{Z}$ 是总势能， $\boldsymbol{\epsilon}$ 是位移

自由度， $\boldsymbol{\beta}$ 是设计参数，那么这个优化问题旨在避免对平衡构型施加不会产生应力 [8] 的扰动。遗憾的是，这种联系仅仅是个有趣之处，因为通常用于屈曲分析的策略无法应用于这个问题。与基于费 Fisher 信息矩阵的最优实验设计不同，在计算海森矩阵时，应该采用何种 $\boldsymbol{\epsilon}$ 设置并无歧义。这由一项约束来处理：对于给定的实验控制量，回归参数是最优的。然而，我们仍然无法得知测量值 $\{\mathbf{y}_i\}_{i=1}^{C}$ 与实验控制量 $\boldsymbol{\beta}$之间的关系。这是因为约束方程和海森矩阵都涉及数据：

$$\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} = -\sum_{i=1}^{C}(\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i;\boldsymbol{\epsilon}))\cdot\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}, \quad \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^2} = \sum_{i=1}^{C}\left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}\cdot\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} - (\mathbf{y}_i - \mathbf{f}(\mathbf{x}_i;\boldsymbol{\epsilon}))\cdot\frac{\partial^2 \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^2}\right). \tag{9}$$

不可回避的事实是，在进行实验之前，我们无法知道数据或最优参数设置。然而，我们可以再次通过先验 $\rho(\boldsymbol{\epsilon})$ 假定对参数有所了解。如果先验准确，那么在所有实验设置 $\boldsymbol{\beta}$下，模型与数据之间的差异都会很小。这意味着约束 $\partial\mathcal{Z}/\partial\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{0}$ 会得到近似满足。这也意味着式（9）目标函数海森矩阵中的第二项很小。忽略这一项，就得到海森矩阵的高斯-牛顿近似，这是非线性回归中常用的策略 [3]。我们再次计算模型参数先验下海森矩阵的期望。将实验参数视为测量位置后，这一推理便导出了上述概率推断问题中的贝叶斯费 Fisher 信息矩阵：

$$\underset{\boldsymbol{\beta}_1,\ldots,\boldsymbol{\beta}_N}{\operatorname{argmax}}\ \min\left(\operatorname{eig}\left(\int\sum_{i=1}^{C}\left(\frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}\cdot\frac{\partial \mathbf{f}(\boldsymbol{\beta}_i)}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}\right)\rho(\boldsymbol{\epsilon})d\boldsymbol{\epsilon}\right)\right).$$

费 Fisher 信息矩阵的推导通过取期望并假设噪声为零均值，从而消除了测量数据；而我们则认为，模型参数的合理先验足以证明采用标准平方误差回归目标函数海森矩阵的高斯-牛顿近似是合理的。这些论证颇为相似，不过，跳出最大似然估计的语境，为接下来讨论采用显式约束力方法的最优实验设计奠定了基础。我们指出，无论如何得到该矩阵，它都是半正定的，因此其特征值均为非负。这可以避免式（5）通过将负特征值推向零而在损失景观中产生不可辨识方向。现在，我们来讨论这一确定性推理思路如何应用于由偏微分方程所支配的系统。

2.3 偏微分方程系统的实验设计

之前关于实验设计的讨论仅限于非线性回归。现在，我们的目标是将讨论转向逆问题：这类问题利用测量数据推断由常微分方程或偏微分方程支配的物理系统的参数。尽管逆问题当然可以被视为非线性回归——模型参数通过偏微分方程求解定义了一个回归流形——但我们认为，这两类问题在实践中有足够大的差异，

值得分别讨论。在这项工作中，我们只关注静态偏微分方程。我们假设所关注的系统满足以下抽象边值问题:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\mathbf{u})(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ \mathcal{B}(\mathbf{u})(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \end{aligned} \tag{10}$$

其中，$\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{1,\ 2,\ 3}$ 是系统状态，$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{1,\ 2,\ 3}$ 是空间坐标，Ω 是定义状态的区域，$\mathcal{N}(\cdot)$ 是微分算子，而 $\mathcal{B}(\cdot)$ 是边界算子。系统状态 $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ 被假定遵循方程（10），并在 C 个不同点处进行观测。测量值表示为

$$\mathbf{v}_i = \mathbf{u}(\mathbf{x_i}) + \boldsymbol{\eta}_i, \tag{11}$$

其中，测量噪声同样具有已知分布，且在各观测值之间相互独立。我们将所有测量值收集成一个矩阵，其中包含 $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1、\ldots\ldots、\mathbf{v}_C]^T$。参数函数 $\mathbf{f}$的对应形式是一个参数化边值问题，其表示为

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{w};\boldsymbol{\epsilon})(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ \mathcal{Q}(\mathbf{w};\boldsymbol{\epsilon})(\mathbf{x}) &= \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \end{aligned} \tag{12}$$

其中，$\mathbf{w}$ 是状态，$\mathcal{G}(\cdot;\boldsymbol{\epsilon})$ 是参数化微分算子，$\mathcal{Q}(\cdot;\boldsymbol{\epsilon})$ 是参数化边界算子。为获得数值解，将状态场离散化为 $\mathbf{w}(\mathbf{x}) \approx \hat{\mathbf{w}}(\mathbf{x};\boldsymbol{\theta})$，其中 $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^N$ 是解参数。对解进行离散化后，方程（12）的数值解可通过最小化强形式误差、求解伽辽金弱形式方程组，或在存在变分能量的情况下将其最小化来获得。无论采用何种数值解法，该解都由一个方程组控制，我们将其记为

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{0}. \tag{13}$$

当离散化是线性的，即对于某组基函数 $\{\mathbf{f}j(\mathbf{x})\}_{j=1}^N$，有 $\hat{\mathbf{w}} = \sum_{j=1}^N \theta_j \mathbf{f}j(\mathbf{x})$ 时，我们可以将式（11）中测量操作的无噪声版本写为 $\hat{w}_k(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^N \theta_j f_{jk}(\mathbf{x}_i)$，其中 $f_{jk}(\mathbf{x}_i)$ 是在第 i 个测量位置处计算得到的第 j 个基函数的第 k 个分量。这使我们能够定义测量算子 $M_{kij} = f_{jk}(\mathbf{x}_i)$。类似于式（7）中的确定性回归目标，逆问题为

$$\mathcal{Z}(\boldsymbol{\epsilon}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{M}\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{\epsilon}) - \mathbf{V}\|^2, \quad \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\epsilon}} \mathcal{Z}(\boldsymbol{\epsilon}), \tag{14}$$

其中 $\|\cdot\|$ 表示向量值状态情况下的弗罗贝尼乌斯范数，因此数据为矩阵值数据 [23]。请注意，我们将解参数 $\boldsymbol{\theta}$ 视为通过式（13）的控制方程依赖于模型参数 $\boldsymbol{\epsilon}$ 的函数。进行最优实验设计时，我们引入实验参数 $\boldsymbol{\beta}$ 来构建实验。这些参数可能出现在测量算子 $\mathbf{M}$ 中，也可能出现在控制方程本身中。请参见表1，以了解我们在基于偏微分方程的实验设计问题中对各种参数类型所使用的术语。采用海森矩阵的高斯-牛顿近似、模型参数的先验以及 E-准则时，最优实验设计问题为

$$\underset{\boldsymbol{\beta}}{\operatorname{argmax}} \min\left(\operatorname{eig}\left(\int \mathbf{M}\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \cdot \mathbf{M}\frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial \boldsymbol{\epsilon}}\rho(\boldsymbol{\epsilon})d\boldsymbol{\epsilon}\right)\right) = \underset{\boldsymbol{\beta}}{\operatorname{argmax}} \min\left(\operatorname{eig}\left(\mathbf{J}^{\mathrm{INV}}(\boldsymbol{\beta})\right)\right). \tag{15}$$

使用“INV”这一记号表示该最优实验设计问题源自逆问题的标准表述。我们注意到，通过式（13）的控制方程进行灵敏度分析，可以得到导数$\partial\boldsymbol{\theta}/\partial\boldsymbol{\epsilon}$。这确保了解参数始终被视为模型参数的显式函数，即 $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{\epsilon})$。引入测量算子$\mathbf{M}$ ，以及必须通过潜在的非线性求解来计算 $\boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{\epsilon})$，是上一节的非线性回归与离散化偏微分方程系统中的逆问题之间的主要差异。为求解该优化问题，我们需要对称矩阵$\mathbf{J}^{\mathrm{INV}}$的最小特征值的梯度。可以使用特征值问题的标准灵敏度分析技术，从而避免对不连续的 $\min(\cdot)$函数进行微分。关于特征值灵敏度分析的介绍，请参见附录A。

表1：最优实验设计问题中三类参数的记号及含义。

符号	Name	描述
$\boldsymbol{\epsilon}$	模型参数	材料属性、源项、边界条件等
$\boldsymbol{\beta}$	实验参数/控制量	测量位置、样本大小、载荷施加点等
$\boldsymbol{\theta}$	解参数	离散化解中的系数

3 使用约束力设计实验

显式约束力方法向式（12）的参数化系统引入源项，以确保状态场与测量数据 [19] 一致。使用 ECFM 时，参数化边值问题为

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{w};\boldsymbol{\epsilon})(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{C} \boldsymbol{\lambda}_i \Gamma(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \\ \mathcal{Q}(\mathbf{w};\boldsymbol{\epsilon})(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \end{aligned} \tag{16}$$

其中， $\Gamma(\mathbf{x})$ 是用户指定的约束力形式， $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^{C}$ 是测量位置， $\{\boldsymbol{\lambda}_i\}_{i=1}^{C}$ 用于缩放约束力。方程 (16) 的离散形式为

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{\epsilon})+\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\lambda}=\mathbf{0},$$

其中， $\boldsymbol{\Gamma}$ 存储了各测量位置处与约束力相对应的力向量。如 [17], 所示，ECFM 逆问题方法为

$$\begin{aligned}&\underset{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\epsilon},\boldsymbol{\lambda}}{\operatorname{argmin}}\ \frac{1}{2}\|\boldsymbol{\lambda}\|^2\\ \text{s.t. }&\mathbf{R}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{\epsilon})+\boldsymbol{\Gamma}\boldsymbol{\lambda}=\mathbf{0},\quad \mathbf{M}\boldsymbol{\theta}-\mathbf{V}=\mathbf{0}.\end{aligned}\tag{17}$$

换言之，这个优化问题求出模型参数 $\boldsymbol{\epsilon}$，使得只需施加尽可能小的额外“外力”，就能让解参数 $\boldsymbol{\theta}$ 与测量数据 $\mathbf{V}$保持一致。当式（17）的解对应的约束力为 $\boldsymbol{\lambda}=\mathbf{0}$时，我们就称式（16）的参数化模型与真实系统“保持一致”。这意味着至少存在一组模型参数，能够精确复现数据。诚然，与式（14）的标准方法相比，ECFM表述下的逆问题看起来更加复杂。当参数化模型与测量数据保持一致时，这两种方法会得出相同的解估计值和模型参数估计值。然而，当参数化模型无法复现测量数据时，这两种方法便会产生差异。

与前文一样，为便于说明，我们假设实验控制量决定测量位置。这意味着 $\boldsymbol{\beta}$ 会出现在测量算子和约束力向量中。与式（8）对应的最优实验设计问题为

$$\begin{aligned}&\underset{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\epsilon},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\beta}}{\operatorname{argmax}}\ \min\left(\operatorname{eig}\left(\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\epsilon}^2}\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\lambda}\|^2\right)\right)\\ \text{s.t. }&\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\epsilon}}\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\lambda}\|^2=\mathbf{0},\quad \mathbf{R}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{\epsilon})+\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\lambda}=\mathbf{0},\quad \mathbf{M}(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\theta}-\mathbf{V}(\boldsymbol{\beta})=\mathbf{0}.\end{aligned}\tag{18}$$

这个优化问题可解释如下：寻找实验控制量，使得模型参数在最小变化方向上、围绕最小约束力解发生扰动时，能够使约束力大小产生尽可能大的变化。与标准逆问题一样，这一目标旨在最大限度地提高 $\boldsymbol{\epsilon}$ 空间中最不可辨识方向的可辨识性，不过这里的可辨识性概念有所不同。这是一个非常复杂的优化问题。而且，与标准逆问题中的最优实验设计一样，要真正求解该问题，我们需要知道数据对实验控制量的依赖关系。因此，我们需要设法修改式（18），以消除对数据的依赖。和之前一样，我们可以借助模型参数的先验来实现这一点。为简化说明，我们假设参数化控制方程的物理规律是线性的。ECFM 控制方程为

$$\mathbf{K}(\boldsymbol{\epsilon})\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\lambda}-\mathbf{F}(\boldsymbol{\epsilon})=\mathbf{0},$$

其中，$\mathbf{F}(\boldsymbol{\epsilon})$ 表示系统中与源项对应的力向量，$\mathbf{K}(\boldsymbol{\epsilon})$ 是离散微分算子。假设源项和微分算子均以某种未具体说明的方式依赖于模型参数 $\boldsymbol{\epsilon}$。现在，我们利用模型参数的先验，将数据生成过程近似定义为

$$\tilde{\mathbf{V}}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{M}(\boldsymbol{\beta}) \int \mathbf{K}(\boldsymbol{\epsilon})^{-1} \mathbf{F}(\boldsymbol{\epsilon}) \rho(\boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon}.$$

这是参数化系统在由 $\boldsymbol{\beta}$ 定义的测量位置处的平均响应。要使这一近似准确，参数化模型必须能够准确再现测量数据，并且模型参数的先验分布必须大致以其真实值为中心。借助数据生成过程的模型，我们现在可以通过最小化约束力大小，求出实验控制量的函数形式下的最优模型参数 $\boldsymbol{\epsilon}^*(\boldsymbol{\beta})$。然而，鉴于数据生成过程中所作的近似，似乎没有必要将计算式 (18) 中海森矩阵所围绕的点限定到如此精细的程度。因此，我们再次利用先验来消除最优实验设计优化问题中的一个约束，即约束力已最小化这一条件。这类似于上一节中消除平方误差达到最小这一约束。于是，式 (18) 的一个近似解为

$$\begin{aligned} &\underset{\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\lambda},\boldsymbol{\beta}}{\operatorname{argmax}} \min \left(\operatorname{eig} \left(\int \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^2} \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\lambda}\|^2 \rho(\boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon} \right) \right) \\ &\text{s.t.} \quad \mathbf{K}(\boldsymbol{\epsilon})\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\lambda} - \mathbf{F}(\boldsymbol{\epsilon}) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{M}(\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\theta} - \tilde{\mathbf{V}}(\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{0}. \end{aligned} \tag{19}$$

与基于标准逆问题的最优实验设计方法不同，目前没有明确的方法可以消除约束力目标函数对测量数据的依赖。我们可以如下消除这一优化问题的约束。约束力和解参数由下式决定

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}(\boldsymbol{\epsilon}) & \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\beta}) \\ \mathbf{M}(\boldsymbol{\beta}) & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\theta} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{F}(\boldsymbol{\epsilon}) \\ \tilde{\mathbf{V}}(\boldsymbol{\beta}) \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \tag{20}$$

这意味着，约束力可以写成模型参数和实验控制量的显式函数，形式如下：

$$\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{T} \begin{bmatrix} \mathbf{K}(\boldsymbol{\epsilon}) & \boldsymbol{\Gamma}(\boldsymbol{\beta}) \\ \mathbf{M}(\boldsymbol{\beta}) & \mathbf{0} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{F}(\boldsymbol{\epsilon}) \\ \tilde{\mathbf{V}}(\boldsymbol{\beta}) \end{bmatrix},$$

其中$\mathbf{T}$ 是一个截断算子，用于从解向量 $[\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}]^T$ 中提取约束力。含约束力的最优实验设计优化问题的最终形式为

$$\underset{\boldsymbol{\beta}}{\operatorname{argmax}} \min\left(\operatorname{eig}\left(\int \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^2} \frac{1}{2} \|\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\beta})\|^2 \rho(\boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon}\right)\right). \tag{21}$$

式 (21) 对灵敏度分析爱好者来说应该非常令人振奋。我们需要计算通过受约束偏微分方程求解得到的某个量的海森矩阵期望的最小特征值的梯度。如附录B所示，这需要控制方程关于约束力的三阶敏感性导数。在下一节中，我们将退一步，从物理角度解读所讨论的逆问题的两种表述。这种直觉将有助于理解示例问题的结果。

4 逆问题的两种理解

我们认为，式（14）给出的模型参数在位移意义上是最优的，而式（17）的 ECFM 目标函数则找到了在力意义上最优的模型参数。这是什么意思？抽象地说，我们认为，逆问题的解应被理解为使参数化系统与测量数据之间的差异最小化的模型参数。然而，衡量差异并非只有一种方式。对于式（14），选择模型参数 $\boldsymbol{\epsilon}$，使系统状态与测量数据之间的误差最小。借用弹性力学中的类比，我们将系统状态称为“位移”，但也认识到，一般而言，它也可以是温度、速度等其他量。作为一个思想实验，设想一位实验人员通过旋钮调节模型参数，直到弹性系统的平衡构型与测得的位移之间的距离最小。当找到一种设置，使得对每个旋钮进行微小调整都会增加与测量数据之间的平方误差和时，便得到了一个解。在模型参数的最优设置下，参数化系统能够准确再现数据，此时它与测量数据相一致。

ECFM 提供了参数化系统与数据之间差异的另一种度量方式。ECFM 不最小化位移误差，而是最小化使系统通过测量数据所需的力的大小。在这种情况下，实验人员调节模型参数旋钮，并在每种设定下不断向结构上叠加砝码，直到其与测量数据一致。当对旋钮进行微小调整不会改变为实现一致性所需的砝码总重量时，即得到一个解。如果参数化系统是一致的，则存在一个使约束力为零的参数设定，因为系统状态不存在需要修正的差异。只有当系统一致时，最小化这两种差异度量才会得到相同的模型参数。在不一致的情况下，约束力目标函数会优先考虑系统中较硬区域的差异，因为修正这些差异需要更大的约束力。标准逆问题对所有位移误差一视同仁，而不考虑其在区域中的位置。仔细想来，这种平均主义态度有些违反直觉：固支梁根部附近的位移偏差，与梁尖端附近的偏差会被赋予同等权重。在无噪声测量的情况下，根部处未能重现数据的轻微偏差，可能比尖端附近相对较大的误差更能表明模型设定错误。标准公式

的逆问题——其一致性概念围绕位移而非力展开——不会提供这类反馈。另一方面，ECFM 提供了更直接的模型设定错误度量，因为约束力目标函数的大小同时对位移偏差的大小及其位置敏感。关于这两种不同逆问题公式的可视化，请参见图1。在作者看来，标准逆问题与 ECFM 之间的差异在很大程度上是哲学层面的，因为没有充分的原则性理由相信，在模型设定错误的情况下，逆问题能够提供有意义的参数估计。当模型与数据一致时，这两种方法会通过不同路径得到相同的解。

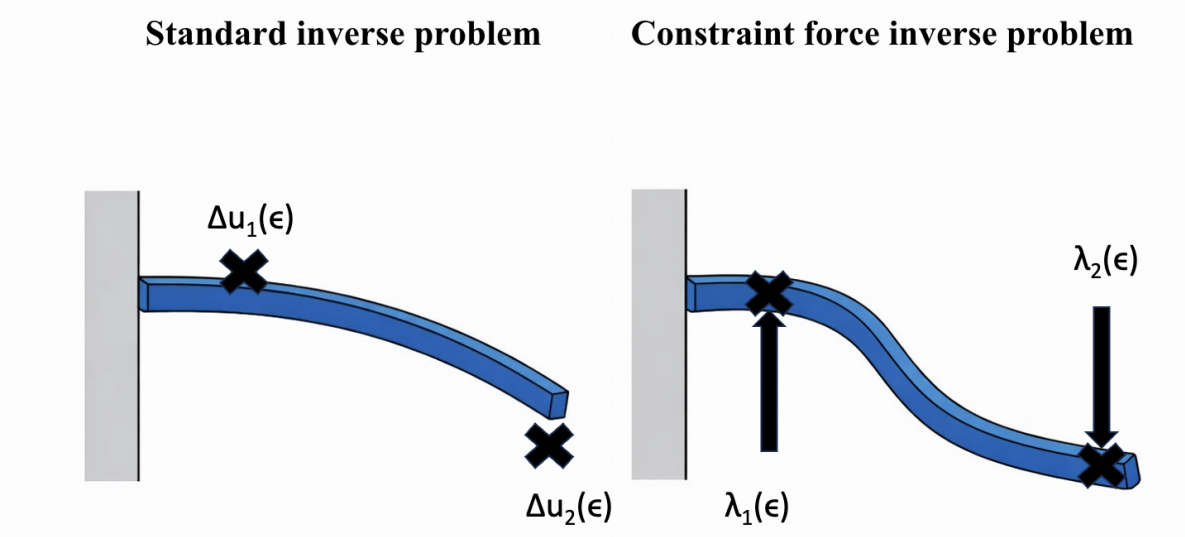


图1：对于标准逆问题，选择模型参数 ϵ 以最小化 $\sum_i \Delta u_i^2(\epsilon)$，即位移差异。使用 ECFM 时，模型参数则使约束力的大小最小化，其表达式为 $\sum_i \lambda_i^2(\epsilon)$。

5 测试该方法

我们采用一个简单的模型问题来测试所提出的基于约束力的实验设计方法。这样我们就可以完全使用解析解，从而清晰地了解约束力方法的行为。该模型问题定义如下：

$$k\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b = 0, \quad u(0) = 0, \quad k\frac{\partial u}{\partial x}(1) = p.$$

该边值问题的解为

$$u(x) = -\frac{b}{2k}x^2 + \frac{p+b}{k}x.$$

在这些示例中，我们假设可以完全获知数据生成过程。鉴于上述讨论的原因，这一假设并不现实。事实上，如果能够预先知道系统的测量结果，就没有理由优化实验设计。我们研究这个理想化问题，是为了揭示约束力方法的行为，而不是为了解决一个实际问题。此外，我们假设测量是在单个点 $\beta \in [0,1]$ 处进行的。因此，数据表示为

$$v(\beta) = u(\beta) = -\frac{b}{2k}\beta^2 + \frac{p+b}{k}\beta.$$

在以下问题中，我们假设只有一个待估计的模型参数。值得指出的是，当只有一次测量、一个模型参数，且位移存在解析解时，基于费 Fisher 信息矩阵的 E-准则可简化为

$$\underset{\beta}{\text{argmax}} \int \left(\frac{\partial w(\beta)}{\partial \epsilon}\right)^2 \rho(\epsilon) d\epsilon. \tag{22}$$

其中， $w(\beta)$ 是参数化模型的预测值， ϵ 是待估计的标量模型参数。这相当于将测量位置设在模型预测值平均而言对模型参数最敏感之处。现在，我们通过对模型问题的不同组成部分进行参数化，来研究最优实验设计问题的约束力表述。

5.1 参数化边界条件

在第一个测试案例中，我们将右侧边界条件作为逆问题中的关注量。按照 ECFM 的逆问题处理方法，我们在测量位置引入一个居中的约束力。控制方程为

$$k\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + b + \lambda\delta(x-\beta) = 0, \quad w(0) = 0, \quad k\frac{\partial w}{\partial x}(1) = \epsilon.$$

接下来，我们选择使用脉冲约束力。这是一种直接的方法，无需调整约束力的宽度，就能将测量位置设在区域内的任意位置。该控制方程的解析解为

$$w(x) = -\frac{b}{2k}x^2 + \frac{\lambda}{k}(x - \max(0, x-\beta)) + \frac{\epsilon+b}{k}x.$$

通过令 $w(\beta) = v(\beta)$，约束力 λ 被确定为 ϵ 和 β 的函数。在这种情况下，我们发现$\lambda = p - \epsilon$。对于单次测量和单个模型参数，式（21）变为

$$\underset{\beta}{\text{argmax}} \int \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial \epsilon^2}(p-\epsilon)^2 \rho(\epsilon) d\epsilon.$$

由于 β 未出现在约束力大小的表达式中，约束力方法对测量位置并不敏感。对于标准逆问题，我们有

$$\frac{\partial w(\beta)}{\partial \epsilon} = \frac{\beta}{k},$$

结合公式（22），当 $\beta = 1$ 时，即可定义最优实验。这里的最优位置正是模型预测随施加的牵引力变化最大的位置。相比之下，约束力目标函数表明，在系统中的所有点处，修正与数据之间差异所需的努力都相同。因此，约束力目标函数在所有测量位置处的曲率都相同。实际上，左侧零狄利克雷边界条件附近的测量与右端位移大得多处的测量同样具有信息量，这是违反直觉的。隐含地说，该结果依赖于测量设备具有任意高的精度，并假设噪声为零。显然，实践中无法满足这些条件。

5.2 参数化源项

在第二个示例中，我们假设边界条件已知，但在逆问题中需要估计分布载荷。控制方程为

$$k\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \epsilon + \lambda \delta(x-\beta) = 0, \quad w(0) = 0, \quad k\frac{\partial w}{\partial x}(1) = p.$$

精确解为

$$w(x) = -\frac{\epsilon}{2k}x^2 + \frac{\lambda}{k}(x - \max(0, x-\beta)) + \frac{p+\epsilon}{k}x.$$

通过令$w(\beta) = v(\beta)$，可将约束力确定为模型参数和测量位置的函数。约束力为

$$\lambda = \frac{\beta}{2}(\epsilon - b) + b - \epsilon.$$

基于约束力的最优实验设计问题为

$$\underset{\beta}{\text{argmax}} \int \left[\left(\frac{\partial \lambda}{\partial \epsilon}\right)^2 + \lambda \frac{\partial^2 \lambda}{\partial \epsilon^2}\right] \rho(\epsilon) d\epsilon = \underset{\beta}{\text{argmax}} \int \left(\frac{\beta}{2} - 1\right)^2 \rho(\epsilon) d\epsilon = \underset{\beta}{\text{argmax}} \left(\frac{\beta}{2} - 1\right)^2.$$

无论先验分布如何，优化问题的解均通过 $\beta = 0$ 得到。约束力方法认为，当测量与狄利克雷边界重合时，该实验是最优的。费 Fisher 信息矩阵则会再次将测量定位于区域的右端，因为此处的解对模型参数最为敏感。两种最优实验设计方法对最优性的判断截然相反。在实际中，在左边界进行测量并无意义，这表明约束力目标函数不适用于最优实验设计。

5.3 参数化材料

现在，我们将材料属性作为逆问题中的感兴趣参数。控制方程为

$$\epsilon \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + b + \lambda \delta(x - \beta) = 0, \quad w(0) = 0, \quad \epsilon \frac{\partial w}{\partial x}(1) = p.$$

精确解为

$$w(x) = -\frac{b}{2\epsilon} x^2 + \frac{\lambda}{\epsilon}(x - \max(0, x - \beta)) + \frac{p + b}{\epsilon} x.$$

通过令 $w(\beta) = v(\beta)$，可将约束力确定为模型参数和测量位置的函数:

$$\lambda = \left(\frac{b\beta}{2} - p - b \right) \left(1 - \frac{\epsilon}{k} \right).$$

鉴于约束力与模型参数呈线性相关，约束力最优实验设计目标函数为

$$\underset{\beta}{\operatorname{argmax}} \int \left(\frac{\partial \lambda}{\partial \epsilon} \right)^2 \rho(\epsilon) d\epsilon = \underset{\beta}{\operatorname{argmax}} \frac{1}{k^2} \left(p + b \left(1 - \frac{\beta}{2} \right) \right)^2.$$

现在无法再通过观察直接找出使这个二次表达式达到最大值的测量位置。注意，我们要求 $0 < \beta < 1$，这意味着这是一个约束优化问题。去掉不会影响最大值点的常数 $1/k^2$ 后，我们将多项式目标函数展开为

$$\left(p + b \left(1 - \frac{\beta}{2} \right) \right)^2 = \frac{b^2}{4} \beta^2 - (pb + b^2)\beta + (p + b)^2.$$

注意　在该函数关于 β 是凸函数，因为 $b^2/4 > 0$。求导后可得，最小值位于 at

$$\beta^* = 2 \left(\frac{p}{b} + 1 \right).$$

鉴于 $\beta \in [0,1]$，并利用凸性可知，若 $\beta^* > 1/2$，约束力曲率的最大值出现在 $\beta = 0$。若 $\beta < 1/2$，最大值出现在 $\beta = 1$。若不知道牵引力和源项的取值，就无法确定测量位置。请注意，最优测量位置并不随这些取值连续变化，而是在区域的左右两端之间突然跳变。

5.4 模型设定错误

在本例中，参数化模型与真实数据生成模型不一致。源项采用参数化形式，并且我们错误地假设右侧满足齐次诺伊曼边界条件。因此，控制方程为

$$k\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \epsilon + \lambda\delta(x-\beta) = 0, \quad w(0) = 0, \quad k\frac{\partial w}{\partial x}(1) = 0.$$

精确解为

$$w(x) = -\frac{\epsilon}{2k}x^2 + \frac{\lambda}{k}(x - \max(0, x-\beta)) + \frac{\epsilon}{k}x.$$

令 $w(\beta) = v(\beta)$，可得约束力为

$$\lambda = \frac{\beta}{2}(\epsilon - \beta) + p + b - \epsilon.$$

基于约束力的最优实验设计问题为

$$\underset{\beta}{\text{argmax}} \int \left[\left(\frac{\partial\lambda}{\partial\epsilon}\right)^2 + \lambda\frac{\partial^2\lambda}{\partial\epsilon^2}\right]\rho(\epsilon)d\epsilon = \underset{\beta}{\text{argmax}} \int \left(\frac{\beta}{2} - 1\right)^2 \rho(\epsilon)d\epsilon = \underset{\beta}{\text{argmax}} \left(\frac{\beta}{2} - 1\right)^2.$$

与模型设定正确时采用参数化源项的情况一样，最优测量位置为 $\beta = 0$。基于约束力的最优实验设计问题再次将测量位置推向区域中刚度最大的部分。

6 讨论

在回顾了使用费 Fisher 信息矩阵进行 OED 的标准方法后，我们展示了如何利用海森矩阵的高斯-牛顿近似，从一个确定性逆问题中推导出 E-准则。在确定性设定下，E-准则被理解为用于设计能够产生条件良好的逆问题的实验。确定性视角使我们能够将 E-准则扩展到逆问题的 ECFM表述。鉴于在 ECFM 中，一个关于最小约束力的优化问题支配着模型参数，我们提出了一个最优实验设计目标函数，使约束力大小的海森矩阵的最小特征值最大化

。我们讨论了如何利用模型参数的先验来消除最优实验设计问题对未知实验数据的依赖。在测试所提出的方法之前，我们阐明了这两种逆问题方法在衡量系统与数据之间的差异时所采用的指标有何不同。随后，我们在一个理想化问题上测试了 ECFM 方法进行 OED 的效果，在该问题中，我们假设数据生成过程在开展实验之前就已确定。尽管这一假设并不现实，但它使我们能够在不受近似影响的情况下研究该方法的基本行为。我们发现，从 ECFM 的意义上看，最优实验依赖于在系统最刚性的位置进行测量。在该示例问题中，这意味着将测量位置设在与狄利克雷边界重合的位置。这与基于费 Fisher 信息矩阵的标准 OED 方法形成对比，后者将测量位置设在系统状态对模型参数最敏感的地方。显然，在狄利克雷边界进行测量是毫无意义的——我们提出的方法之所以会得出这一结果，是因为在系统的这一超高刚性位置，约束力大小对模型参数最为敏感。我们方法的缺陷在于，约束力并不是实际测量的量，而是用于衡量参数化系统与数据一致性的一种构造量。然而，即使约束力能够被测量——也就是说，为了使系统符合测量数据而向系统引入真实的源项——在刚性区域进行测量仍需要任意高的精度，才能确定所需的约束力。考虑到这些因素，我们认为，我们所研究的理想化问题表明，ECFM 并不是设计最优实验的可行方法。

尽管 [17] 表明，ECFM可以成功用于求解逆问题，但我们担心，本文的结论将为逆问题的ECFM表述敲响丧钟。如果一种方法在“优化”后得出的却是荒谬结果，那它能有多好？更实际地说，ECFM逆问题中的测量究竟应该布置在哪里才合适？或许，E-准则虽然直观地衡量了优化问题的易解程度，却从一开始就把我们引入歧途。除了最热忱的ECFM信徒，未来的研究很可能就此止步。这些执拗而悲情的人，将把精力集中在设计更为奇特的方法上，以完善约束力最小化问题。而当我们其余的人在高墙之间哼着歌、受其围困却已不再看见它们时，约束力的未来正由这些天选之人书写。它究竟会带来一场革命，还是只是一线希望，转瞬便被时间无情的洪流冲散——仍有待观察。在此期间，我谨向我们当中那些仍敢于怀抱梦想的人祈祷：位移的暴虐统治终将结束。约束力万岁！

A 特征值灵敏度分析

本附录演示如何计算对称矩阵 $\mathbf{J}$的最小特征值相对于实验控制量 β的梯度。我们可以通过写出对应于最小特征值的特征方程并对其求导来实现这一点。将最小特征值记为 μ，将对应的特征向量记为$\mathbf{q}$，则有

$$\mathbf{0} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\beta}}(\mathbf{J}\mathbf{q} - \mu\mathbf{q}) = \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \boldsymbol{\beta}}\mathbf{q} + \mathbf{J}\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \boldsymbol{\beta}} - \frac{\partial \mu}{\partial \boldsymbol{\beta}}\mathbf{q} - \mu\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \boldsymbol{\beta}}.$$

在左侧乘以 $\mathbf{q}^T$，并利用特征向量的正交归一性，最小特征值的灵敏度导数为

$$\frac{\partial \mu}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \mathbf{q}^T \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \boldsymbol{\beta}}\mathbf{q}.$$

只要最小特征值不与相邻特征值重合或改变顺序，这一结果就成立。在此条件下， μ的灵敏度是定义良好的。

B ECFM灵敏度分析

以下示例取自 *Zen and the Art of Sensitivity Analysis* [18]。我们希望计算约束力大小的期望海森矩阵的最小特征值的梯度。请回想，约束力被视为模型参数 $\boldsymbol{\epsilon}$ 和实验控制量 $\boldsymbol{\beta}$的显式函数。我们感兴趣的矩阵为

$$\mathbf{J} = \int \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{\epsilon}^2}\frac{1}{2}\|\boldsymbol{\lambda}(\boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\beta})\|^2 \rho(\boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon}.$$

附录A表明，最小特征值灵敏度分析的关键在于求得 $\partial \mathbf{J}/\partial \boldsymbol{\beta}$。接下来会变得有些棘手——为了让内容稍微易读一些，我们引入如下约定。与模型参数对应的指标用希腊字母表示，与实验控制量对应的指标用大写拉丁字母表示，与解参数和约束力对应的指标用小写拉丁字母表示。期望约束力大小的梯度为

$$\begin{aligned}\frac{\partial J_{\alpha\gamma}}{\partial \beta_K} = \int \frac{\partial}{\partial \beta_K}\left(\frac{\partial \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\alpha}\frac{\partial \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\gamma} + \lambda_\ell \frac{\partial^2 \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\gamma}\right)\rho(\boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon} = \\ \int \left(\frac{\partial^2 \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\alpha \partial \beta_K}\frac{\partial \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\gamma} + \frac{\partial \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\alpha}\frac{\partial^2 \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\gamma \partial \beta_K} + \frac{\partial \lambda_\ell}{\partial \beta_K}\frac{\partial^2 \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\gamma} + \lambda_\ell \frac{\partial^3 \lambda_\ell}{\partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\gamma \partial \beta_K}\right)\rho(\boldsymbol{\epsilon}) d\boldsymbol{\epsilon}.\end{aligned} \tag{B1}$$

要计算式 (B1) 中的梯度，我们需要：(i) 约束力；(ii) 约束力相对于模型参数的一阶灵敏度导数；(iii) 约束力相对于实验控制量的一阶灵敏度导数；(iv) 约束力相对于模型参数的二阶灵敏度导数；(v) 约束力相对于模型参数和控制量的混合灵敏度导数；以及 (vi) 约束力的二阶灵敏度导数相对于实验控制量的灵敏度导数。假设将式中的控制方程写作

(20) 为 $D_{ij}(\boldsymbol{\epsilon},\ \boldsymbol{\beta})y_j - Q_i(\boldsymbol{\epsilon},\ \boldsymbol{\beta}) = 0$，其中解向量为 $\mathbf{y} = [\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}]^T$。约束参数和解参数由下式控制

$$D_{ij}y_j - Q_i = 0.$$

利用该解，可以通过以下公式计算灵敏度导数 (ii)

$$\frac{\partial D_{ij}}{\partial \epsilon_\alpha}y_j + D_{ij}\frac{\partial y_j}{\partial \epsilon_\alpha} - \frac{\partial Q_i}{\partial \epsilon_\alpha} = 0.$$

同样利用解向量，灵敏度导数 (iii) 由以下公式确定

$$\frac{\partial D_{ij}}{\partial \beta_K}y_j + D_{ij}\frac{\partial y_j}{\partial \beta_K} - \frac{\partial Q_i}{\partial \beta_K} = 0.$$

利用该解和灵敏度导数 ii)，导数 (iv) 可表示为

$$\frac{\partial^2 D_{ij}}{\partial \epsilon_\gamma \partial \epsilon_\alpha}y_j + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \epsilon_\alpha}\frac{\partial y_j}{\partial \epsilon_\gamma} + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \epsilon_\gamma}\frac{\partial y_j}{\partial \epsilon_\alpha} + D_{ij}\frac{\partial^2 y_j}{\partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\gamma} - \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\gamma} = 0.$$

混合灵敏度导数 (v) 按以下公式计算

$$\frac{\partial^2 D_{ij}}{\partial \beta_K \partial \epsilon_\alpha}y_j + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \beta_K}\frac{\partial y_j}{\partial \epsilon_\alpha} + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \epsilon_\alpha}\frac{\partial y_j}{\partial \beta_K} + D_{ij}\frac{\partial^2 y_j}{\partial \epsilon_\alpha \partial \beta_K} - \frac{\partial^2 Q_i}{\partial \epsilon_\alpha \partial \beta_K} = 0.$$

最后，关于模型参数的二阶混合灵敏度导数 (vi) 可表示为

$$\begin{aligned}\frac{\partial^3 D_{ij}}{\partial \epsilon_\gamma \partial \epsilon_\alpha \partial \beta_K}y_j + \frac{\partial^2 D_{ij}}{\partial \epsilon_\gamma \partial \epsilon_\alpha}\frac{\partial y_j}{\partial \beta_K} + \frac{\partial^2 D_{ij}}{\partial \epsilon_\alpha \partial \beta_K}\frac{\partial y_j}{\partial \epsilon_\gamma} + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \epsilon_\alpha}\frac{\partial^2 y_j}{\partial \epsilon_\gamma \partial \beta_K} + \frac{\partial^2 D_{ij}}{\partial \epsilon_\gamma \partial \beta_K}\frac{\partial y_j}{\partial \epsilon_\alpha} + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \epsilon_\gamma}\frac{\partial^2 y_j}{\partial \epsilon_\alpha \partial \beta_K} \\ + \frac{\partial D_{ij}}{\partial \beta_K}\frac{\partial^2 y_j}{\partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\gamma} + D_{ij}\frac{\partial^3 y_j}{\partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\gamma \partial \beta_K} = 0.\end{aligned}$$

参考文献

[1] Steven L. Brunton、Joshua L. Proctor 和 J. Nathan Kutz。通过非线性动力系统的稀疏辨识从数据中发现控制方程。美国国家科学院院刊，113(15):3932–3937，2016 年 4 月。出版商：美国国家科学院院刊。

[2] Mario Bunge。逆问题。科学基础，24(3):483–525，201 年 9 月 9.

[3] Pei Chen。海森矩阵与高斯–牛顿海森矩阵。《*SIAM* 数值分析杂志》，49(4):1417– 1435，2011年1月。出版方：工业与应用数学学会。

[4]Masoumeh Dashti 和 Andrew M. Stuart。《贝叶斯逆问题方法》，2015年7月。arXiv:1302.6989 [数学].[5]Hoon Hong、Alexey Ovchinnikov、Gleb Pogudin 和 Chee Yap。微分模型的全局可辨识性。《纯粹与应用数学通讯》，73(9):1831–1879，2020年。_电子版：https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cpa.21921.[6] Xun Huan、Jayanth Jagalur 和 Youssef Marzouk。最优实验设计：公式与计算。《数值学报》，33:715–840，2024年7月。arXiv:2407.16212 [统计].[7] Valérie Krampe、Pascal Edme 和 Hansruedi Maurer。地震全波形反演的优化试验设计：一种计算高效的方法，包含灵活的采集成本实现。《地球物理勘探》，69(1):152–166，2021年。_电子版：https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1111/1365-2478.13040.[8] Tianyi Liu、Xiao Xiao 和 Fehmi Cirak。针对具有几何不确定性的结构进行贝叶斯屈曲载荷优化。《国际工程数值方法杂志》，126(20):e70111，2025年10月。arXiv:2501.04553 [数学].[9] Oliver J. Maclaren 和 Ruanui Nicholson。什么可以估计？可辨识性、可估计性、因果推断与不适定逆问题，2020年7月。arXiv:1904.02826 [数学].[10] Custódio Efraim Matavel、Andreas Meyer-Aurich 和 Hans-Peter Piepho。用于估计经济最优氮肥施用量的贝叶斯优化试验设计：一种模型平均方法。《农学杂志》，117(3):e70087，2025年。_电子版：https://acsess.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/agj2.70087.[11] France Mentré、Pascale Burtin、Yann Merlé、Joost van Bree、Alain Mallet 和 Jean-Louis Steimer。药代动力学与毒代动力学中的稀疏采样最优设计*。《药物信息杂志》，29(3):997–1019，1995年7月。出版方：SAGE 出版社。[12] Arnaud Mercier、Christian Boehm 和 Hansruedi Maurer。全波形逆问题设计：一种结合数据与模型的方法。《国际地球物理学杂志》，241(3):1479–1494，2025年6月。[13] Hongyu Miao、Xiaohua Xia、Alan S. Perelson 和 Hulin Wu。非线性常微分方程模型的可辨识性及其在病毒动力学中的应用。《*SIAM*评论》，53(1):3–39，2011年1月。出版方：工业与应用数学学会。[14] Friedrich Pukelsheim。《试验最优设计》。SIAM 出版社，1993年。[15] M. Raissi、P. Perdikaris 和 G.E. Karniadakis。物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和逆问题的深度学习框架。《计算物理学杂志》，378:686–707，2019年2月。[16] Denielle Ricciardi、Tom Seidl、Brian Lester、Amanda Jones 和 Elizabeth Jones。用于本构模型校准的贝叶斯最优试验设计，2023年10月。arXiv:2308.10702 [计算机科学]。

[17]Conor Rowan。《将显式约束力方法扩展至逆问题》，2025年12月。arXiv:2512.14877 [math].[18] Conor Rowan。好吧，这一条是虚构的。2025年。[19] Conor Rowan、Kurt Maute 和 Alireza Doostan。《使用显式约束力方法进行弹性力学与热传递中的物理信息解重构》，2025年5月。arXiv:2505.04875 [cs].[20] James Davis A. Senig 和 John F. Maddox。《纤维绝热材料有效气体热导率的研究》。载于 *AIAA*航空论坛与*ASCEND 2024*。美国航空航天学会，2025年。_电子版链接：https://arc.aiaa.org/doi/pdf/10.2514/6.2024-4030。[21] Jiguang Sun。《具有非唯一解的局部估计量与贝叶斯逆问题》。《应用数学快报》，132:108149，2022年10月。[22] Fei Tao、He Zhang、Ang Liu 和 A. Y. C. Nee。《工业数字孪生：最新进展》。*IEEE*《工业信息学汇刊》，15(4):2405–2415，2019年4月。会议名称：IEEE《工业信息学汇刊》。[23] Curtis R. Vogel。《逆问题的计算方法》。应用数学前沿。工业与应用数学学会，2002年1月。