arXiv:2602.04537v1 [cs.CE] 4 Feb 2026

基于优化与反演的逆问题贝叶斯框架：代理建模、参数推断与不确定性量化

Mihaela Chiappetta[a]、Massimo Carraturo[a]、Alexander Raßloff[b]、Markus Kästner[b, c]、Ferdinando Auricchio[a, d]

[a]帕维亚大学土木工程与建筑系，*Via Ferrata 3，27100*，意大利帕维亚[b]德累斯顿工业大学计算与实验固体力学教席，*Helmholtzstr 10，01069*，德国德累斯顿[c]德累斯顿工业大学德累斯顿计算材料科学中心（*DCMS*），德国德累斯顿[d]意大利国家研究委员会应用数学与信息技术研究所*“E. Magenes”，Via Ferrata，5/A，27100*，意大利帕维亚

摘要

本文提出了一种用于逆问题的贝叶斯框架，将优化与反演无缝结合，从而实现快速代理建模、准确的参数推断和严谨的不确定性量化。本文采用贝叶斯优化，以尽可能少的高保真模型评估，自适应地构建准确的高斯过程代理模型，并有策略地将采样集中在预测不确定性较高的区域。随后，在贝叶斯反演方案中利用训练好的代理模型，通过结合先验知识与观测到的感兴趣量推断最优参数值，从而得到能够严谨表征认知不确定性的后验分布。该框架具有坚实的理论基础和较高的计算效率，尤其适用于高保真模型（无论来自数值模拟还是物理实验）计算成本高昂、难以解析求解或难以复现，且数据可用性有限的工程应用。此外，联合使用贝叶斯优化与反演的效果优于单独使用二者，凸显了统一这两种方法所带来的协同效益。本文通过一系列一维和二维解析基准问题展示了所提出贝叶斯框架的性能，包括混合高斯周期函数、Lévy、Griewank、Forrester 和 Rosenbrock函数，为评估代理建模精度、参数推断稳健性和不确定性量化提供了可控环境。结果表明，该框架能够高效求解逆问题，同时提供有参考价值的不确定性量化，并以较低的计算成本支持可靠的工程决策。

关键词：逆问题、贝叶斯优化、贝叶斯反演、代理建模、参数推断、不确定性量化

1. 引言

逆问题 [1–6] 在众多工程和科学领域中发挥着基础性作用，为从观测数据中推断未知或不确定的模型参数提供了严谨的数学框架。与正问题不同，正问题根据已知输入参数预测系统响应——即关注量；逆问题则旨在识别能够最佳复现观测输出关注量的参数 [1, 6]。这类问题常见于结构健康监测、材料表征、地球物理学和流体力学等应用领域 [7–14], ，在这些领域中，直接测量控制参数往往难以实现或成本高昂。然而，逆问题通常适定性不良，这意味着输入参数的微小扰动可能导致推断参数发生显著变化，进而使预测的关注量也产生较大变化。因此，需要稳健的数学和计算策略，以确保获得可靠且易于解释的解 [15, 16]。

不确定性量化 [15–21]是逆问题中的基础组成部分，它提供了评估推断参数可靠性所需的理论和计算工具，并将测量噪声、模型近似、数据有限以及先验知识不完整等各种不确定性来源纳入考量。

逆问题的一大挑战在于评估高保真模型的计算成本高昂，或进行物理实验的成本过高。高保真模型旨在准确捕捉复杂系统的物理特性，但往往计算开销巨大，或缺乏闭式解析表达。另一方面，物理实验可能成本高昂、耗时漫长，或在某些条件下无法实施。为应对上述挑战，人们通常采用代理模型，以大幅降低计算成本来近似高保真行为 [22]。代理模型可以是确定性的，例如多项式近似、样条或神经网络 [23–28] ；也可以是随机性的，其中高斯过程（GP）是应用最广泛、效果最好的方法之一 [22, 29–32]。

随机代理模型在逆问题中具有独特优势，因为它们不仅能近似高保真模型，还能量化与模型近似相关的预测不确定性。在这一背景下，贝叶斯方法 [33, 34]尤为适用，它提供了一个概率框架，将先验知识（以参数分布的形式表示）与观测的关注量相结合，并生成后验分布，从而严格刻画推断所得参数和关注量中的认知不确定性 [5, 35–38]。

在贝叶斯技术中，有两种方法与逆问题尤为相关：贝叶斯优化（BO）和贝叶斯反演（BI）。BO [39–42] 是一种全局优化策略，它利用代理模型高效地探索参数

电子邮箱地址：mihaela.chiappetta@unipv.it (Mihaela Chiappetta), massimo.carraturo@unipv.it (Massimo Carraturo),alexander.rassloff@tu-dresden.de (Alexander Raßloff), markus.kaestner@tu-dresden.de (Markus Kästner), ferdinando.auricchio@unipv.it (Ferdinando Auricchio)

空间，并通过不确定性感知采样平衡探索与利用。相比之下，BI [5, 37, 43–46], 将逆问题置于概率框架中进行建模，从而得到后验分布，为稳健且考虑不确定性的参数推断提供支持。

越来越多的研究成功地将贝叶斯技术应用于逆问题。Kennedy 等人 [47] 提出了一个基础性的贝叶斯校准框架，用于处理应用于核辐射数据和模拟核事故的复杂数学模型。Higdon 等人 [48] 将这一方法扩展至热问题。Kugler 等人 [49] 提出了适用于行星遥感高维逆问题的可扩展贝叶斯优化技术。Alexanderian 等人 [50] 采用贝叶斯反演，在偏微分方程约束系统中进行最优实验设计。Raßloff 等人 [51] 提出了一种针对小数据场景的贝叶斯优化逆向设计策略，用于表征 Spinodoid架构材料。Zheng 等人 [52] 提出并验证了一种用于增材制造逆问题的高斯—贝叶斯方法。Lartaud 等人 [53]提出了一种用于基于代理模型的逆向设计建模的序贯贝叶斯设计策略。Chiappetta 等人 [54, 55] 采用贝叶斯反演，降低增材制造 Inconel 625 悬臂梁残余应变预测的不确定性。

基于这些互补的贝叶斯技术，我们提出了一种用于逆问题的贝叶斯框架，以计算高效的方式整合贝叶斯优化和贝叶斯反演。贝叶斯优化通过有限次数的高保真模型评估，加速构建精确的高斯过程代理模型；而贝叶斯反演则基于先验知识和观测的关注量，实现对模型参数的稳健概率推断。与以往方法不同，例如 [47, 50], 我们的贝叶斯反演实现采用最小二乘公式，提供了一种计算高效且理论上稳健的推断过程[5, 56, 57]。贝叶斯优化与贝叶斯反演的结合提升了计算效率，系统地量化了不确定性，并改善了参数推断，同时不牺牲预测精度，彰显了整合这两种方法所带来的协同优势。因此，该框架尤其适用于数据可用性有限且高保真计算成本高昂的情形，在效率、精度和不确定性感知之间实现了实用的权衡。

我们通过一系列广为认可的一维和二维解析基准问题，展示了所提出框架的能力。这些基准问题包括混合高斯—周期函数、Lévy函数、Griewank函数、Forrester函数和Rosenbrock函数，可用于在逆问题情境中对非线性、多峰性和非凸性进行可控且易于解释的评估。

数值结果证实，在这些低维设置下，所提出的方法能够实现高效的代理建模、准确的参数推断和全面的不确定性量化。

本文其余部分的组织如下。第2节介绍BO和贝叶斯反演的理论背景。第3节描述针对逆问题提出的贝叶斯框架。第4节讨论数值结果和解析基准验证。最后，第5节总结主要研究发现，并概述未来的研究方向。

2. 贝叶斯方法的理论背景

本节概述作为所提出框架基础的两种贝叶斯技术，即BO和贝叶斯反演 [5, 37, 39–46], 。

第2.1节介绍贝叶斯优化，重点说明其依赖高斯过程代理模型 [22, 29–32] 和不确定性感知采集策略，以高效探索参数空间 [58–60]。第2.2节介绍贝叶斯反演，它在概率框架下表述逆问题，并通过计算后验分布实现参数推断。

2.1. 贝叶斯优化

贝叶斯优化 [39–42] 是一种样本高效的策略，用于对通过计算模型或物理实验隐式定义的目标函数进行全局优化。在逆问题中，目标函数评估通常需要高保真数值模拟或成本高昂的实验流程，因此，贝叶斯优化尤其适用于只能进行有限次目标函数评估的情形。

贝叶斯优化框架依赖概率代理模型，通常采用高斯过程 [22, 29–32],来近似目标函数 $f\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$。训练数据集 $\mathcal{D}_n = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$中，$\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ 表示输入参数，$y_i = f(\mathbf{x}_i) + \epsilon_i$ 表示相应的函数评估值（即关注量），并带有加性噪声 $\epsilon_i \sim \mathcal{N}(0, \sigma_n^2)$，该数据集用于拟合代理模型。高斯过程定义了如下形式的函数先验分布：

$$f(\mathbf{x}) \sim f_{\mathcal{GP}}(\mathbf{x}) = \mathcal{GP}(\mu(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \tag{1}$$

其中，$\mu(\mathbf{x})$ 是均值函数，通常假设其为零而不失一般性；$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ 是协方差核，用于描述输入参数域上的空间相关性。

Comm常见的核包括径向基函数（RBF）核 [61]:

$$k_{\mathrm{RBF}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma^2 \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2}{2\ell^2}\right) \tag{2}$$

其中，$\ell > 0$ 是长度尺度参数，σ^2 是信号方差。另一种广泛使用的核是 Matérn核 [62]:

$$k_{\mathrm{Matérn}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma^2 \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{\sqrt{2\nu}\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|}{\ell}\right)^{\nu} K_\nu \left(\frac{\sqrt{2\nu}\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|}{\ell}\right) \tag{3}$$

其中，$\nu > 0$ 控制样本函数的光滑性，K_ν 是第二类修正贝塞尔函数。RBF核与Matérn核的选择通常取决于对底层函数光滑性的预期。常采用 $\nu = 5/2$ 对应的Matérn核，因为它在光滑性和灵活性之间实现了良好的折中。

高斯过程代理模型训练完成后，会通过采集函数$\alpha(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$进行查询，以确定下一组输入参数 $\mathbf{x}_{\mathrm{next}}$，从而改进

代理模型近似。采集函数将对不确定区域的探索与对可能包含最优值区域的利用之间的权衡形式化。两种广泛采用的采集函数是期望改进（EI）和上置信界（UCB） [58–60]。

期望改进采集函数定义为：

$$\alpha_{\mathrm{EI}}(\mathbf{x}) = \mathbb{E}\left[\max(f_{\mathcal{GP}}(\mathbf{x}) - y^*, 0)\right] \tag{4}$$

其中 y^* 表示观测到的最佳关注量。该准则倾向于采样预期能改进最佳观测的点，尽管它可能对高不确定性区域探索不足。

或者，置信上界采集函数显式地纳入预测不确定性：

$$\alpha_{\mathrm{UCB}}(\mathbf{x}) = \mu(\mathbf{x}) + \kappa\sigma(\mathbf{x}) \tag{5}$$

其中 $\mu(\mathbf{x})$和 $\sigma(\mathbf{x})$分别表示以训练数据集为条件的高斯过程后验预测均值和标准差，$\kappa > 0$ 是控制探索与利用之间平衡的用户定义参数。具体而言，期望改进与UCB之间的选择取决于具体的逆问题场景：期望改进更适合改进搜索，而UCB则促进对参数空间更均衡的探索。

在每次迭代中，下一个输入参数按如下方式选取：

$$\mathbf{x}_{\mathrm{next}} = \arg\max_{\mathbf{x}} \alpha(\mathbf{x}) \tag{6}$$

并在该位置评估目标函数。随后更新数据集，并重新训练高斯过程代理模型。该过程持续迭代，直至满足收敛准则，例如达到最大评估次数、采集函数趋于稳定，或达到期望的代理模型精度。

2.2. 贝叶斯反演

贝叶斯反演 [5, 37, 43–46] 通过运用贝叶斯定理 [63–67]，为求解逆问题提供了严谨的概率框架。这种方法在病态情形下尤为有效；在这类情形中，数据噪声、模型不准确性或有限观测可能导致经典确定性方法得出不稳定或不唯一的解 [16]。

设 $\bar{y} \in \mathbb{R}^m$ 表示观测感兴趣量，$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ 表示待推断的参数。贝叶斯定理定义了在给定数据 $\bar{y}$的条件下，$\mathbf{x}$的后验分布：

$$p(\mathbf{x} \mid \bar{y}) = \frac{p(\bar{y} \mid \mathbf{x})\, p(\mathbf{x})}{p(\bar{y})} \propto p(\bar{y} \mid \mathbf{x})\, p(\mathbf{x}) \tag{7}$$

其中 $p(\bar{y} \mid \mathbf{x})$ 为似然函数， $p(\mathbf{x})$ 为编码参数先验知识的先验分布， $p(\bar{y})$ 为边际似然，亦称证据。由于证据不依赖于 $\mathbf{x}$ 且通常难以计算， [68], 贝叶斯反演通常在未归一化的后验分布上进行。

假设存在加性高斯噪声，观测的关注量可表示为:

$$\bar{y} = f(\mathbf{x}_{\text{true}}) + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I_m) \tag{8}$$

其中， $f(\cdot)$ 表示高保真模型，$\mathbf{x}_{\text{true}}$ 为未知的真实参数值， ε为均值为零、方差已知为 σ^2 的高斯噪声，而 $I_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 表示维度为 m的单位矩阵。在此假设下，似然函数的形式为:

$$p(\bar{y} \mid \mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{m/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \left\|\bar{y} - f(\mathbf{x})\right\|^2\right) \tag{9}$$

先验分布 $p(\mathbf{x})$ 起正则化项的作用，在观测到关注量之前纳入对 $\mathbf{x}$ 的先验假设。一种常见且便于解析处理的选择是多元高斯先验分布:

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}|\Gamma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_{\mathbf{x}})^\top \Gamma^{-1}(\mathbf{x} - \mu_{\mathbf{x}})\right) \tag{10}$$

其中， $\mu_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^d$ 和 $\Gamma \in \mathbb{R}^{d\times d}$ 分别为先验均值和协方差矩阵。

贝叶斯反演中广泛采用的一种点估计量是最大后验概率估计（MAP） [69,70]，其定义如下:

$$\mathbf{x}_{\text{MAP}} = \arg\max_{\mathbf{x}} \, p(\mathbf{x} \mid \bar{y}) \tag{11}$$

这等价于最小化负对数后验分布:

$$\mathbf{x}_{\text{MAP}} = \arg\min_{\mathbf{x}} \left[-\log p(\mathbf{x} \mid \bar{y})\right] \tag{12}$$

在高斯似然和先验分布假设下，可得到以下优化问题:

$$\mathbf{x}_{\text{MAP}} = \arg\min_{\mathbf{x}} \left[\frac{1}{2\sigma^2} \left\|\bar{y} - f(\mathbf{x})\right\|^2 + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_{\mathbf{x}})^\top \Gamma^{-1}(\mathbf{x} - \mu_{\mathbf{x}})\right] \tag{13}$$

这一表述明确揭示了对观测关注量的忠实度与对先验知识的遵循之间的平衡，而这正是贝叶斯反演在逆问题中应用的核心。

3. 基于优化与反演的逆问题贝叶斯框架

基于第2节确立的概率基础，本节介绍所提出的逆问题贝叶斯框架，该框架协同整合了贝叶斯优化和贝叶斯反演 [5, 37, 39–46]。

总体目标是通过贝叶斯反演，识别最有可能生成给定观测感兴趣量的输入参数，同时严格刻画推断参数相关的认知不确定性。为减轻重复进行高保真模型评估所带来的计算负担，该框架利用贝叶斯优化自适应地构建

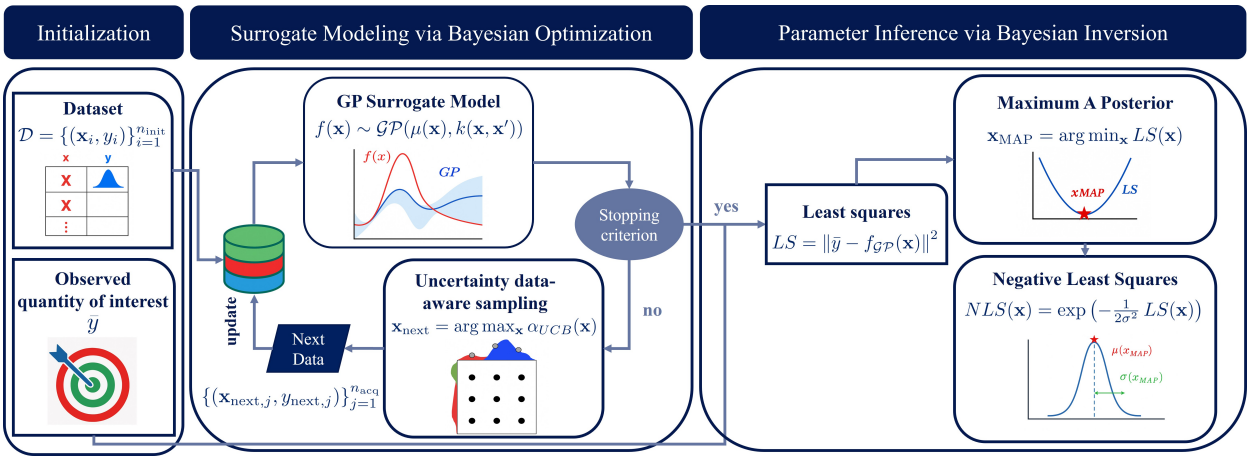


图1：所提出的用于逆问题的贝叶斯框架示意图，该框架融合了贝叶斯优化和贝叶斯反演。流程始于初始化阶段（左侧），在此阶段定义初始训练数据集和观测感兴趣量。随后，通过贝叶斯优化，利用UCB采集策略引导的不确定性感知采样，迭代改进高斯过程代理模型（中间）。达到收敛后，给定观测感兴趣量，便使用该代理模型执行贝叶斯反演程序，通过最小二乘最小化进行参数推断，并通过负最小二乘形式得到最大后验估计和后验分布（右侧）。

高斯过程代理模型 [22, 29–32]。图 1 概述了所提出的框架。

本节其余部分安排如下。第3.1节详细介绍通过贝叶斯优化构建代理模型。第3.2节说明如何基于第3.1节构建的代理模型，通过贝叶斯反演执行参数推断过程。最后，第3.3节展示所提出的贝叶斯框架的计算效率。

3.1. 基于贝叶斯优化的代理建模

如图1所示，所提出框架的第一阶段是构建一个代理模型，用于近似从输入参数到关注量的高保真映射。该过程从一个初始训练数据集开始：

$$D = \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^{n_{\text{init}}} \tag{14}$$

其中，$\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$ 为输入参数，$y_i \in \mathbb{R}^m$ 为相应的关注量，n_{init} 为初始样本数。基于 D，训练高斯过程代理模型$f_{\mathcal{GP}}(\mathbf{x})$，使其根据公式（1）近似高保真模型 $f(\mathbf{x})$。

为迭代改进代理模型，采用 UCB 采集函数（公式（5））来指导新输入参数的选择。在本框架中，代理模型构建阶段不假设对观测感兴趣量有任何先验知识；而是如第3.2节所述，在参数推断步骤中纳入此类信息。为体现这一假设，探索参数 κ （见公式（5））设为足够大的值，从而有效地促进纯探索性采样策略，优先采样预测不确定性较高的区域。这一选择使得

能够在本研究所考虑的参数空间内构建全局准确的代理模型，随后可在相同设置下支持多个逆推断任务，而无需重新训练。

在每次迭代中，通过最大化采集函数（公式 (6)）来选取一批 n_{acq} 新增采集样本数 $\{\mathbf{x}_{\mathrm{next},\ j}\}_{j=1}^{n_{\mathrm{acq}}}$。这一策略将采样引导至预测不确定性较高的区域，从而提高代理模型的准确性。

数据集更新如下：

$$D \leftarrow D \cup \{(\mathbf{x}_{\mathrm{next},j}, y_{\mathrm{next},j})\}_{j=1}^{n_{\mathrm{acq}}} \tag{15}$$

其中，$y_{\mathrm{next},\ j} = f(\mathbf{x}_{\mathrm{next},\ j})$ 是对高保真模型的新评估结果。使用更新后的数据集重新训练高斯过程代理模型，从而逐步提高代理模型保真度并降低预测不确定性。

代理模型的迭代改进过程持续进行，直至满足收敛准则。本研究根据高保真模型输出与代理模型预测在包含 n_{val} 个样本的独立验证集上的均方误差（MSE）来评估收敛情况：

$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{n_{\mathrm{val}}} \sum_{i=1}^{n_{\mathrm{val}}} \left(y_i - y_{\mathcal{GP},i}\right)^2 \tag{16}$$

其中，$y_i = f(\mathbf{x}_i)$ 是高保真输出，$y_{\mathcal{GP},\ i} = f_{\mathcal{GP}}(\mathbf{x}_i)$ 是代理模型预测。

在受控的基准问题场景中，采用均方误差作为收敛准则是合理的，因为可以访问真实的高保真模型，从而在独立验证样本集上定量验证代理模型的准确性，本研究即属此类情况。然而，在实际应用中，这种方法通常并不可行，因为高保真模型评估的计算成本高昂，或在实验上难以实现。在此类情况下，需要采用其他收敛准则，以确保样本效率，而不依赖外部验证样本。替代策略包括监测采集函数 [41], 的稳定情况、高斯过程后验预测方差 [71], 的衰减情况，或连续迭代过程中代理模型预测的边际改进 [72]。对这些策略及其对代理模型准确性和下游推断的影响进行系统比较，超出了本研究的范围，将留待未来工作开展。

3.2. 贝叶斯反演参数推断

代理模型达到所需精度后，即如图1所示，通过贝叶斯反演进行参数推断。给定观测感兴趣量 $\bar{y} \in \mathbb{R}^m$，目标是推断最有可能重现该观测感兴趣量的输入参数$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$，同时量化相关的认知不确定性。

根据贝叶斯定理（公式（7））, 输入参数的后验分布结合了似然和先验分布。最大后验估计通过

最大化后验分布获得；等价地，也可以按照公式（12）最小化其负对数。

假设采用均匀先验分布（反映缺乏有信息量的先验知识）和高斯观测噪声（公式（8））, 后验分布可简化为最小二乘最小化:

$$\mathbf{x}_{\mathrm{MAP}} = \arg\min_{\mathbf{x}} \|\bar{y} - f_{\mathcal{GP}}(\mathbf{x})\|^2 = \arg\min_{\mathbf{x}} LS(\mathbf{x}) \tag{17}$$

其中， $LS(\mathbf{x})$ 表示最小二乘泛函，即代理模型预测与观测感兴趣量之间的平方失配。

除了最大后验估计，还可以通过分析完整的后验分布来实现不确定性量化。在加性高斯噪声和均匀先验分布的假设下，后验分布具有由最小二乘泛函 [57] 的未归一化指数函数构成的形式:

$$p(\mathbf{x} \mid \bar{y}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} LS(\mathbf{x})\right) =: NLS(\mathbf{x}) \tag{18}$$

其中， $NLS(\mathbf{x})$ 表示所谓的负最小二乘泛函，在此用于近似未归一化后验分布。

这一表述强调，后验分布不仅通过最大后验估计确定最可能的参数，还以概率方式编码了相关的认知不确定性。当 $NLS(\mathbf{x})$ 近似为单峰且局部呈高斯分布时，可采用以最大后验点为中心的拉普拉斯近似 [54]:

$$p(\mathbf{x} \mid \bar{y}) \approx \mathcal{N}(\mathbf{x}_{\mathrm{MAP}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{MAP}}), \quad \text{with} \quad \boldsymbol{\Sigma}_{\mathrm{MAP}}^{-1} = \nabla_{\mathbf{x}}^2 \left[-\log NLS(\mathbf{x})\right]\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\mathrm{MAP}}} \tag{19}$$

局部高斯近似具有计算高效的特点，能够深入揭示参数不确定性，从而构建置信区域并生成考虑不确定性的预测。

3.3. 所提出贝叶斯框架的效率

基于第3.1节和第3.2节，本节定性比较所提出贝叶斯框架与分别使用贝叶斯优化和贝叶斯反演（表1）的计算效率。

表1第一行中，由期望改进采集函数（基于期望改进的贝叶斯优化，公式（4））引导的贝叶斯优化会将评估集中在当前最优点附近。这种行为有利于参数推断中的局部利用，但通常只能在迄今为止的最优点邻域内生成准确的代理模型；此外，单独使用贝叶斯优化不会返回参数的后验分布，因此无法量化参数不确定性。

在第二行中，由置信上界采集函数驱动的贝叶斯优化（基于置信上界的贝叶斯优化，公式（5））通过不确定性感知采样强调探索，并且通常能在有限的高保真模型评估预算下，得到一个在已探索参数域内精度较高的代理模型。这里所说的全局代理模型精度，是指

本研究所考虑的基准设置，并不意味着该方法能够普遍扩展到多维参数空间。尽管如此，单独使用贝叶斯优化仍无法提供参数不确定性的后验分布。

在第三行中，采用最大后验估计量的贝叶斯反演（基于最大后验估计的贝叶斯推断，见公式（13））直接处理逆问题，并得到一个用于量化认知不确定性的后验分布。然而，该方法不构建代理模型，因此无法降低后续预测的成本。

在所提出的框架中（表1第四行），采用较大探索参数的贝叶斯优化（BO(UCB, $\kappa \gg 0$)）可在可行参数域内快速构建高斯过程代理模型，随后通过最小二乘 formulation 在该代理模型上进行贝叶斯反演，即基于最大后验估计的贝叶斯推断（最大后验最小二乘，见公式（17））。这种结合以极低的预测成本，既获得了准确的最大后验估计量，也得到了参数的后验分布。所报告的效率提升是相对于本研究考察的低维基准问题评估的。采用可行边界上的均匀先验，是为了避免将参数推断偏向参数空间中的特定区域，并赋予所有可行取值相同的可能性；这有意反映了比信息性高斯先验分布更广泛的认知不确定性。

总体而言，统一的 BO（UCB，$\kappa \gg 0$）+BI（最大后验最小二乘）策略将快速代理模型构建与参数推断和不确定性量化相结合，对于本研究考察的这类逆问题，其效率高于单独使用 BO 或 BI。

4. 解析基准的数值验证

本节通过一系列一维和二维解析基准函数，对第3节提出的逆问题贝叶斯框架进行验证。这些解析基准提供了一个受控环境，可用于定量评估该框架在代理建模精度、参数推断的稳健性、计算效率和不确定性量化方面的表现。

本节安排如下。第4.1节介绍一维基准的验证结果，分别分析代理模型的构建（第4.1.1节）、参数推断（第 4.1.2 节），并在最后讨论结果（第4.1.3节）。第4.2节将验证扩展至二维基准，并遵循相同的结构，以确保代理建模（第4.2.1节）、参数推断（第4.2.2节）和结果总结讨论（第4.2.3节）之间的一致性。每种情形均包含对不确定性量化和计算成本的评估，这些都是现实世界反问题场景中的关键方面。

所有数值实验均使用开源库 UQforPy 完成。该库提供了一个模块化且可扩展的平台，用于不确定性量化和逆向设计。更多实现细节见附录 A。

4.1 一维基准

本节使用图2所示的一维解析基准函数验证所提出的贝叶斯框架（第3节）。所选基准问题

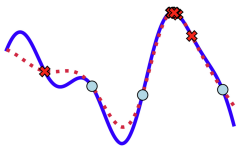
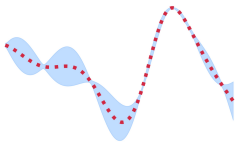
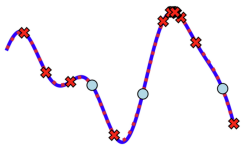
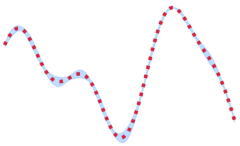
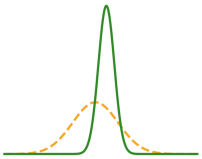
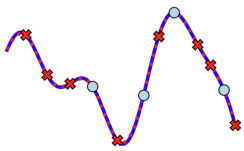
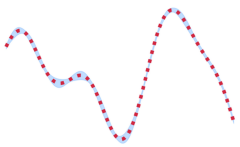
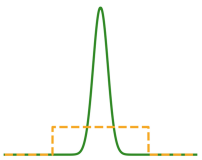
Legend High-fidelity Model Surrogate Model Model Uncertainty Initial Samples Next Samples Prior Distribution Posterior Distribution	代理模型	模型不确定性	参数 推断	参数 不确定性
基于期望改进的贝叶斯优化				*None*
基于置信上界的贝叶斯优化				*None*
基于最大后验估计的贝叶斯推断	*None*	*None*		
我们的方法 基于置信上界的贝叶斯优化 $\kappa \gg 0$ + 贝叶斯反演(最大后验最小二乘)				

表1：单独使用 BO 和 BI 与所提出的统一框架 BO(UCB，$\kappa \gg 0$)+BI(MAP–LS) 的定性比较。BO(EI) 将样本聚集在当前最优点附近，从而得到局部精确的代理模型，但不提供后验分布；BO(UCB) 构建全局精确的代理模型，但仍不提供后验分布；BI(MAP) 执行参数推断并返回后验分布，但不提供代理模型；所提出的方法（BO(UCB，$\kappa \gg 0$)+BI(MAP–LS)）将快速代理模型构建与基于 MAP-LS 的参数推断及后验分布量化相结合，从而提高整体效率。

涵盖了不同层次的函数复杂度，包括强非线性、多模态性和高频振荡，并被广泛用于评估逆问题中代理建模策略与参数推断的性能 [5, 35–38]。

基准测试套件包含四个代表性函数：

- 混合高斯-周期函数：

$$y = \exp\left(-\frac{(x-2)^2}{2}\right) + 0.9\exp\left(-\frac{(x+5)^2}{20}\right) - 0.1\cos(2x) \quad \text{with} \quad x \in [-10, 10] \tag{20}$$

将局部高斯峰与周期性振荡相结合，从而同时产生全局平滑性和局部高频变化（图2a）。

- *Lévy* 函数：

$$y = (\sin(\pi w))^2 + (w-1)^2\left[1 + 10\,(\sin(\pi w + 1))^2\right] + (w-1)^4\,(\sin(2\pi w))^2 \tag{21}$$

其中 $w = 1 + \frac{x-1}{4}$和 $x \in [-6, 6]$。Lévy函数呈现出崎岖的多峰景观，包含许多局部极小值（图2b），这给全局探索和代理模型保真度都带来了挑战。

- *Griewank* 函数：

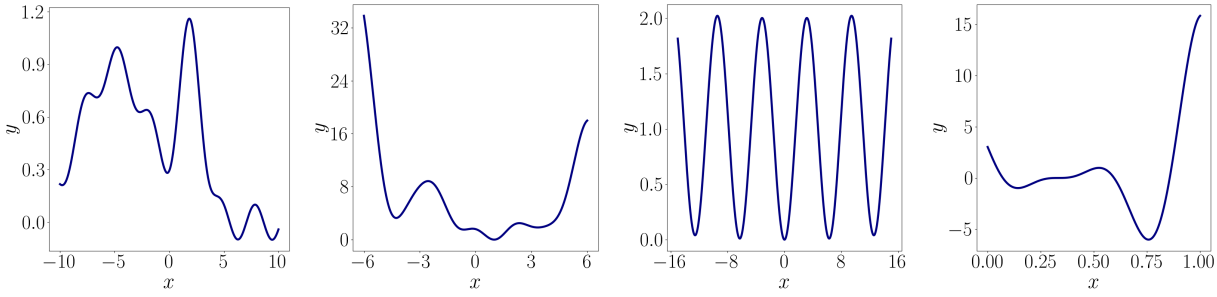
$$y = \frac{x^2}{4000} - \cos(x) + 1 \quad \text{with} \quad x \in [-15, 15] \tag{22}$$

结合缓慢变化的二次趋势与细尺度的周期调制（图2c）。

- *Forrester* 函数：

$$y = (6x-2)^2 \sin(12x-4) \quad \text{with} \quad x \in [0, 1] \tag{23}$$

其特点是整体平滑，同时存在明显的局部非线性（图2d）。



(a) 混合高斯周期函数。 (b) Lévy。 (c) Griewank。 (d) Forrester。

图2：用于验证所提出的逆问题贝叶斯框架的一维解析基准函数。该组函数涵盖了平滑非线性、多模态结构和细尺度变异等代表性挑战，可用于系统评估代理建模和参数推断能力。

4.1.1. 基于贝叶斯优化的代理建模

本节评估所提出的贝叶斯框架（第3节）通过贝叶斯优化实现代理建模的能力，测试对象为图2中介绍的一维解析基准函数，重点关注混合高斯–周期案例（图2a）。由于其他基准函数（图2b–d）的代理建模流程相同，分析仅限于混合高斯–周期基准函数，其他结果见附录 B。所有基准函数的最终代理模型将在本节末尾汇总。

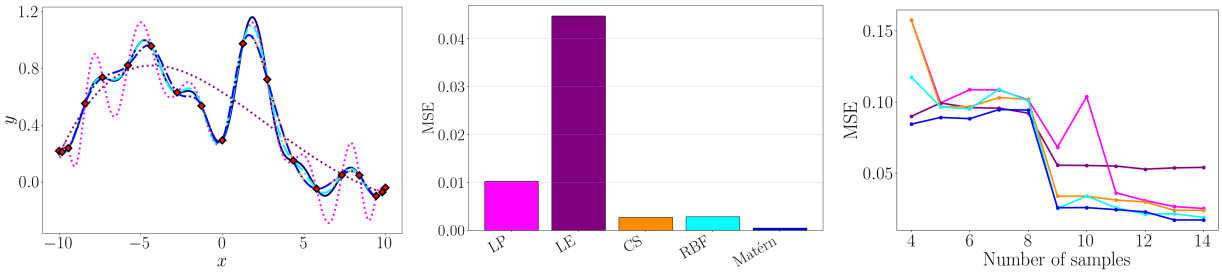
使用高斯过程通过贝叶斯优化构建代理模型，并由置信上界采集函数（公式（5））引导进行不确定性感知采样。采用探索参数 $\kappa = 200$来实施强探索性的采样策略，促进在认知不确定性较高的区域进行探索，详见第 3.1 节和第 3.3 节。

从预测精度和采样效率两方面评估代理模型的性能。将所提出的基于高斯过程的方法与经典的确定性替代方法进行比较：拉格朗日多项式（LP）插值、勒让德展开（LE）和三次样条（CS）插值 [23–27]。针对高斯过程代理模型测试了两种协方差核：长度尺度为 $\ell = 1.0$ 的径向基函数核（公式（2）），以及平滑度参数为 $\nu = 5/2$ 且长度尺度相同的 Matérn核（公式（3））。所有代理模型均使用源自高保真模型的数据集进行训练，并通过在包含 $n_{\mathrm{val}} = 1000$ 个样本的独立验证集上计算均方误差（公式（16））来量化其精度，从而确保所报告指标的收敛。

图3展示了代理模型的性能对比。如图3a所示，基于高斯过程的代理模型成功捕捉了混合高斯–周期基准函数的多模态细尺度结构；得益于灵活的协方差结构，Matérn核在高度振荡区域表现出更强的鲁棒性。在确定性替代方法中，CS插值在平滑区域表现尚可，但无法解析局部非线性。LP插值在边界处会出现龙格型不稳定性 [73], ，而LE虽能保持数值稳定，但表征能力有限。通过均方误差（MSE）进行的定量比较（图3b）证实，基于高斯过程的代理模型精度更高，其中Matérn核始终取得最低的预测误差。比较代理模型的收敛行为随样本数量增加的变化（图3c），也得出了相同结论。

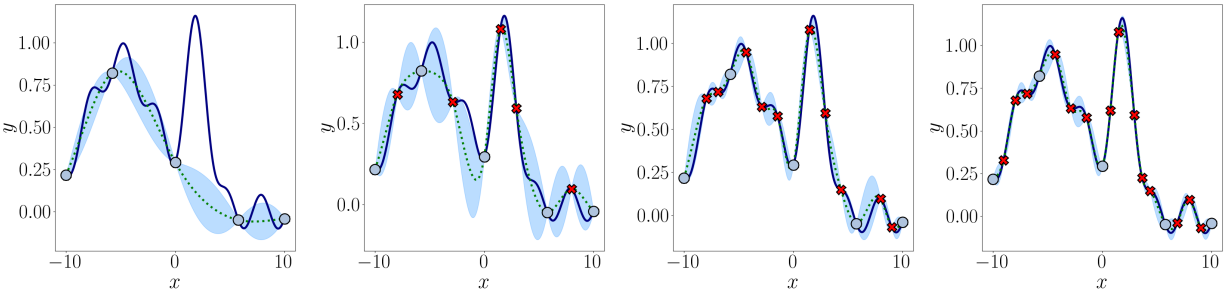
高斯过程的一项关键特性是能够在提供均值预测的同时，给出预测不确定性估计。这使得我们可以依据式（15）所形式化的更新规则，采用自适应采样策略，重点关注认知不确定性较高的区域。

图4展示了混合高斯–周期基准函数的高斯过程代理模型逐步细化的过程。从仅包含5个样本的稀疏初始数据集出发，通过在不确定区域获取新样本，迭代改进代理模型。这使不确定性迅速降低，预测精度得到提升，尤其是在存在局部变化的区域。该结果清楚地展现了在样本数量有限的情况下，不确定性感知采样在代理建模中的优势。



（a）代理模型预测。　　（b）均方误差比较。　　（c）均方误差演化。

图3：混合高斯–周期基准问题中代理模型的性能比较。（a）使用不同代理模型获得的预测响应。实线黑线表示高保真模型；虚线分别对应 LP（品红色）、LE（紫色）和 CS（橙色）确定性替代模型；青色和蓝色分别表示采用 Matérn 核和径向基函数核的基于高斯过程的代理模型。红色菱形表示样本数量。（b）14个样本下的均方误差值。（c）随着样本数量增加的均方误差演化。



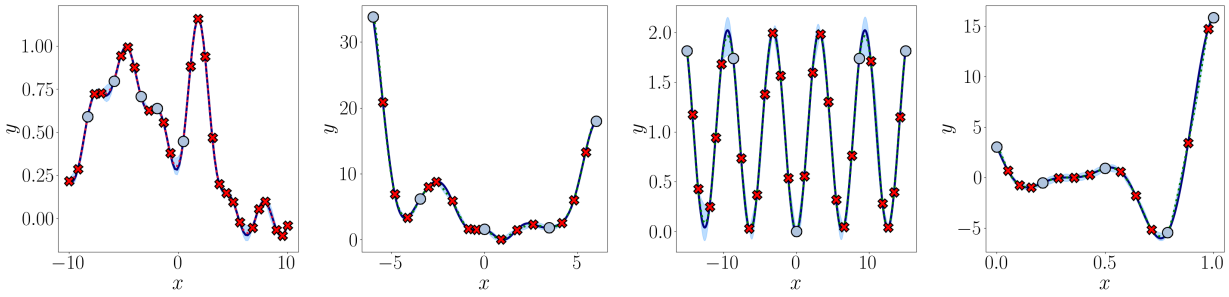
（a）5个样本。　　（b）10个样本。　　(c) 15 个样本。　　(d) 19 个样本。

图 4：使用 UCB 采集函数对混合高斯–周期基准函数的高斯过程代理模型进行渐进式细化。蓝色实线：高保真模型；绿色虚线：高斯过程均值（Matérn）；浅蓝色带：95%置信区间。灰色圆圈：初始样本数；红色叉号：新增采集样本数。

所有基准函数得到的最终代理模型如图5所示。所有基准函数所采用的配置设置见表2。尽管函数复杂度各异——从多模态行为（混合高斯–周期、Lévy）到振荡模式（Griewank），再到局部非线性（Forrester）——在所考虑的一维基准测试设置中，所提出的框架始终能够利用有限数量的样本实现准确近似。

结果证实了所提出的代理建模策略在准确性、稳健性和样本效率方面的优势，为低维基准问题范围内后续的参数推断任务奠定了可靠基础。正如预期，基于高斯过程的代理模型始终优于经典确定性替代方法，尤其是在数据量较少，以及存在尖锐非线性或振荡结构的情况下。这些结果与理论预期一致，并在此呈现，以说明开发所提出贝叶斯框架时所采用的方法选择具有合理性。

总之，值得注意的是，本文采用的置信上界采集函数



(a) 混合高斯–周期。 (b) Lévy。 (c) Griewank。 (d) Forrester。

图5：所有基准函数的最终代理模型。蓝色实线：高保真；红色虚线：高斯过程（Matérn）；浅蓝色带：预测不确定性。灰色圆圈：初始样本数；红色叉号：新增采集样本数。

表2：基准函数代理建模的配置设置。

参数	**值**
初始样本（n_{init}）	5
新增采集样本（n_{acq}）	15–20
代理模型	高斯过程（GP）
协方差核	Matérn $\nu = 5/2$
均值函数	零均值先验
噪声模型	高斯噪声（$\sigma^2 = 10^{-6}$）
超参数优化	对数边际似然最大化
采集函数	上置信界（UCB）
UCB探索参数	$\kappa = 200$
停止准则	验证均方误差 $< 10^{-3}$
验证集（n_{val}）	1000 个样本

主要用于全局探索，旨在降低整个输入参数空间中的认知不确定性。虽然这一策略有助于构建准确且校准良好的代理模型，以支持不确定性感知推断，但它可能会将样本分配到与逆问题并不直接相关的区域。相比之下，期望改进（公式（4））等采集函数专为局部利用而设计；当关注量事先已知时，通常更倾向于采用这类函数。然而，在本文的背景下——主要目标是构建全局准确的代理模型，使其能够在整个参数空间中忠实复现高保真响应——采用 UCB 体现了对全局模型保真度以及不确定性量化稳健性的重视。

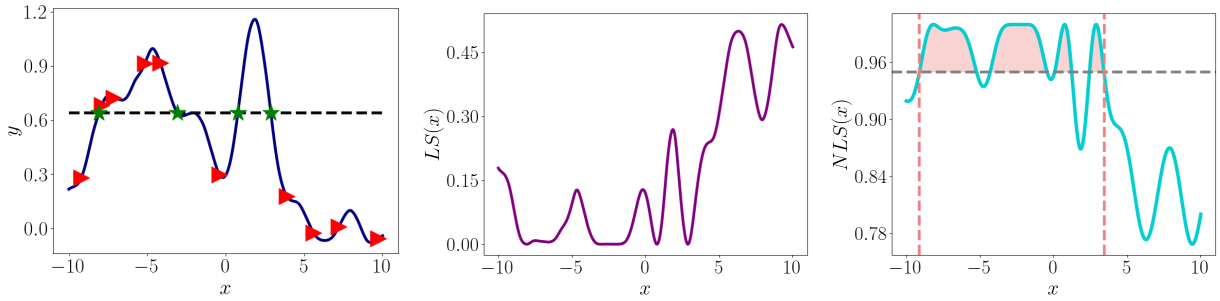
4.1.2. 贝叶斯反演参数推断

本节评估所提出的贝叶斯框架（第 3 节）通过贝叶斯反演（BI）对图2所示的一维解析基准函数进行参数推断并量化认知不确定性的能力。如第 3.2 节所述，目标是识别最有可能复现

给定观测感兴趣量 $\bar{y} \in \mathbb{R}^m$ 的输入参数，最大后验估计定义见公式（11）。假设存在高斯噪声且先验分布为均匀先验分布，该任务可归结为最小化最小二乘泛函（公式（17））；该泛函通过公式（1）中引入并在图5中构建的代理模型$f_{\mathcal{GP}}(\mathbf{x})$进行计算。代理模型作为高保真模型的计算高效替代方案，从而能够在受控的低维基准测试环境中，对推断过程进行系统且可复现的验证。

我们首先展示混合高斯–周期基准函数（图2a）和 Forrester 基准函数（图2d）的详细结果，这些结果共同呈现了所提方法的主要特征。其余基准函数的补充结果见附录 C。

图6总结了混合高斯–周期基准函数（图2a）的贝叶斯反演参数推断结果。图6a展示了优化过程：多个初始猜测值（红色三角形）随机分布在输入参数空间中，以确保对参数景观进行充分探索。优化采用带盒约束的有限内存 BFGS 算法（L-BFGS-B），每次运行最多允许 400 次迭代。观测感兴趣量 $\bar{y} = 0.63$由黑色水平虚线表示，而绿色星号表示通过最小化最小二乘泛函确定的最优解$\mathbf{x}_{\mathrm{MAP}}$。



(a) 最大后验估计　(b) 最小二乘剖面　(c) 非线性最小二乘剖面

图 6：混合高斯-周期基准函数的贝叶斯反演结果所示的参数推断。(a) 多次优化运行得到的最大后验估计。红色三角形表示多个初始猜测；观测感兴趣量以黑色水平虚线表示，绿色星形表示最优解（最大后验估计）。(b) 参数空间上的最小二乘剖面。(c) 表示后验分布的非线性最小二乘剖面，其中高概率区域以灰色水平虚线标出，该虚线表示 0.95 阈值；该区域还以珊瑚色部分突出显示，其范围由垂直虚线界定。

图 6a 所示结果突出显示了四种不同的参数配置，它们均使最小二乘泛函达到最小值，且各自对应一个独立的最大后验估计。这些最大后验估计是通过多次优化运行得出的，每次运行均以参数空间内随机分布的初始猜测值为起点；总体而言，这些结果表明，存在多种可接受的配置，能够重现所关注的观测量。最大后验估计的这种多重性反映了该逆问题适定性不良的特征，并凸显了最小二乘剖面（图 6b）固有的多峰性，

这种多峰性由混合高斯-周期基准函数高度非线性且振荡的行为所导致。

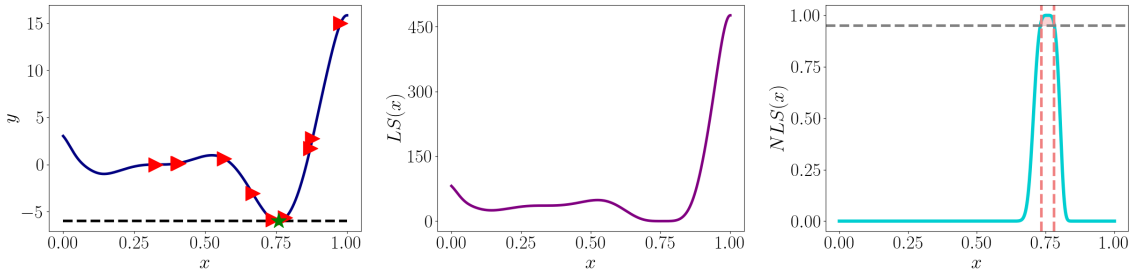
通过考察后验分布的近似形式（由图6c中的NLS剖面表示），可以进一步阐明该逆问题的多模态特性。存在多个局部极大值，这证实后验分布集中在参数空间的不同区域，每个区域都对应一个具有不同高似然度的模态。因此，由于强烈的非凸性以及存在多个解 [54]，无法像基于拉普拉斯的方法通常所假设的那样，使用单个高斯模态可靠地近似后验分布（见公式（19））。任何试图强行采用单峰高斯近似的方法，都不可避免地会严重低估认知不确定性，并错误表征参数景观。

尽管存在这些挑战，NLS泛函仍可用于有效近似后验分布的结构。具体而言，NLS剖面的衰减行为表明参数空间中存在高概率区域。如图6c所示，引入阈值水平NLS(x) $= 0.95$（对应于顶部5%的概率水平集），即可识别出一个缩减后的子域；该子域保留了最可信的参数估计值，这些估计值由两条竖直虚线所界定的珊瑚色区域标出。原问题定义在整个参数区间 $[-10, 10]$ 上（图2a），而高概率区域位于 $[-7.5, 5]$内，因此在这一维逆问题场景中，可容许参数空间得以显著缩减。

图 7 展示了通过 BI程序对图 2d 中介绍的 Forrester 基准函数进行参数推断的结果。图 7a 显示了在观测感兴趣量为 $\bar{y} = -6.02$ 时通过 LS 最小化得到的最大后验估计，而图 7b 和图 7c 则显示了参数空间中对应的 LS 和 NLS 剖面。

Forrester 函数的 LS 剖面呈现出一个清晰明确的全局最小值，如图 7b 所示。优化程序始终得到相同的最大后验估计，表明该逆问题适定且具有唯一可辨识性。相应的 NLS 剖面（图 7c）在 ≈ 0.76 处呈现尖锐的单峰，标准差约为 ≈ 0.02，较小的标准差证实后验分布高度集中于推断得到的解附近。

表示后验分布近似的非线性最小二乘剖面呈类高斯形状，且不存在次级模态，这表明推断参数相关的认知不确定性极小，也说明非线性最小二乘剖面能够为输入参数提供稳健且可信的最大后验估计。与混合高斯-周期情形（图6c）类似，高概率区域由黑色水平点线标示，并以垂直点线界定的珊瑚色部分突出显示，如图 7c 所示。该图展示了对于 Forrester 函数，可容许参数空间如何大幅缩小：从初始区间 $[0, 1]$ 到推断得到的高概率区域 $[0.735, 0.78]$，这证明了基于贝叶斯反演的参数空间缩减在低维逆问题中的有效性。



（a）最大后验估计　（b）最小二乘剖面　（c）非线性最小二乘剖面

图7：通过 Forrester 基准函数的 BI 结果进行参数推断。（a）通过多次优化运行获得的最大后验估计。红色三角形表示多个初始猜测；观测感兴趣量以黑色点划水平线表示，绿色星形表示最优（最大后验估计）解。（b）参数空间上的最小二乘剖面。（c）表示后验分布近似的非线性最小二乘剖面，其中高概率区域由灰色点划水平线标示，该水平线表示 0.95 阈值；该区域以珊瑚色部分突出显示，并由竖直点划线界定。

4.1.3. 讨论

第4.1.1节和第4.1.2节所展示的数值验证结果凸显了所提出的贝叶斯框架在计算和推断方面的优势。该框架将一维基准测试设置中的贝叶斯优化代理建模与贝叶斯反演参数推断相结合。附录 D 进一步提供了补充讨论，阐释所采用参数推断策略的依据。

使用不确定性感知采样策略构建的代理模型，能够准确再现所有一维解析基准的关键特征——包括多峰性（混合高斯–周期、Lévy）、高频振荡（Griewank）和尖锐的局部非线性（Forrester）——同时仅需有限次数的高保真模型评估。例如，在混合高斯–周期基准函数中，基于 Matérn核的高斯过程代理模型仅使用少于 20 个样本便成功捕捉了复杂的高保真模型（图5a）。同样，Forrester 基准函数的代理模型仅使用 15 个样本便实现了较高的预测精度（图5d）。

训练完成后，代理模型可实现贝叶斯反演的高效应用。用于最大后验估计的最小二乘最小化可直接在高斯过程代理模型上进行，从而无需反复进行高保真模型评估。对于混合高斯—周期基准函数（图 6a），最小二乘最小化通过独立优化运行恢复出多个最大后验估计，揭示了该逆问题的多模态结构。尽管多个局部极小值使得无法确定唯一的最优参数配置，但非线性最小二乘剖面（图 6c）仍能通过分离参数空间中的高概率区域，为后验分布分析提供有价值的信息。即使不存在唯一的最大后验估计，这也能将可接受的参数空间限制在一个范围更小、定义明确的子区域内，从而有效降低认知不确定性。

相比之下，Forrester 基准函数展示了一个适定逆问题，其最大后验参数配置可被唯一识别（图7a）。最小二乘剖面呈现出一个占主导地位的极小值（图7b），相应的非线性最小二乘剖面呈现出尖锐的单峰形态，后验分布高度集中于最大后验估计附近（图7c），证实了参数推断分析的可靠性。

在这两种情况下，通过贝叶斯优化进行代理模型构建与通过贝叶斯反演进行参数推断之间的解耦，带来了相对于传统反演策略的显著计算优势，正如表1所预期的那样。直接在高保真模型上应用贝叶斯反演，每次优化运行将需要数百次高保真评估，尤其是在多峰设置中。相比之下，在代理模型上操作可将每次 LS 最小化的成本降至可忽略的水平，从而能够快速探索参数空间，并对本节所考虑的低维基准函数进行高效的不确定性量化。

4.2. 二维基准函数

第3节提出的面向逆问题的贝叶斯框架，通过图 8 所示的二维解析基准函数得到进一步验证。这些基准问题用于研究该框架在存在耦合参数、相对于二维情形问题复杂度提高以及非平凡函数景观时的行为，同时能够在不确定性条件下对代理建模和参数推断进行可控且可解释的评估。

所选基准函数如下：

- 混合　高斯–周期函数，定义在区域 $x \in [-1, 2]$, $y \in [0, 3]$ 上，如下

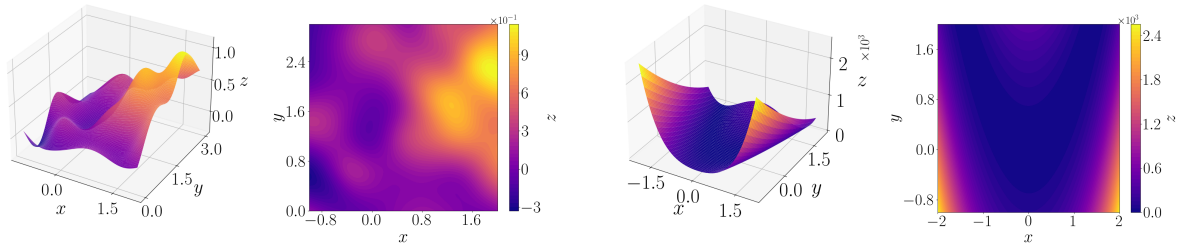
$$f(x, y) = \exp\left(-\frac{(x-2)^2 + (y-2)^2}{2}\right) + 0.2\cos(3x)\sin(3y) + 0.1\sin(5x + 5y) \quad (24)$$

  该函数结合了平滑的高斯峰与周期扰动。这种配置同时引入了多峰行为和局部非线性，给代理模型构建和参数推断准确性带来了挑战。高保真模型如图 8a 和图 8b 所示。

- *Rosenbrock*函数，定义在区域 $x \in [-2, 2]$, $y \in [-1, 2]$ 上，如下

$$f(x, y) = (1 - x)^2 + 100(y - x^2)^2 \quad (25)$$

  其特征是具有狭窄的弯曲谷地和陡峭梯度。该基准函数代表具有强各向异性和非线性的病态反问题，对代理建模阶段和参数推断分析都构成了挑战。相应的高保真响应见图 8c 和图 8d。



(a) (b) (c) (d)

图 8：用于验证所提出的逆问题贝叶斯框架的二维解析基准函数。(a)–(b)：混合高斯-周期函数——高保真模型曲面及等高线图。(c)–(d)：Rosenbrock函数——高保真模型曲面及等高线图。

4.2.1. 基于贝叶斯优化的代理建模

本节报告通过贝叶斯优化（BO）对图 8 中介绍的二维基准函数进行代理建模所获得的结果。本文考虑二维情形，是为了分析与一维情形相比耦合参数和函数复杂度增加所带来的影响，而非评估其向多维参数空间扩展的可扩展性。

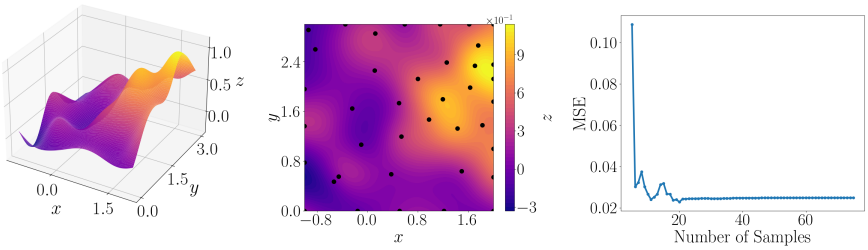
如一维情形（第4.1.1节）中所详细讨论的，这里采用的代理建模策略基于采用 Matérn $5/2$ 协方差核（公式（3））的高斯过程（GP），并使用探索参数 $\kappa = 200$。假设观测噪声服从方差为 $\sigma^2 = 10^{-6}$ 的高斯分布。代理模型构建通过考虑不确定性的自适应采样来完成，其中根据由 UCB（公式（5））定义的采集函数以及公式（15）中的更新规则，迭代更新训练数据集。

我们首先分析混合高斯–周期基准函数（图 8a–b）得到的结果，随后分析Rosenbrock基准函数（图 8c–d ）得到的结果。

图 9 报告了针对混合高斯–周期基准函数的代理建模过程结果。图 9a 中的高斯过程代理模型准确重构了高保真模型的响应面（图 8a 和图 8b），同时捕捉到了平滑的全局峰值和叠加其上的周期特征。图 9b 中对应的等高线图展示了在贝叶斯优化迭代过程中获取的训练样本分布（黑色标记）。从包含 5 个样本的初始设计开始，在认知不确定性较高的区域选择附加样本。自适应策略逐步将样本集中于主要的非线性特征周围，尤其是中心高斯峰附近，从而使模型能够有效解析全局和局部变化。

图 9c 量化了收敛行为，其中在包含 $n_{\mathrm{val}} = 1000$ 的独立验证集上评估的均方误差（公式（16））根据样本数量绘制。可以观察到误差迅速降低，在约 21 次高保真评估（即样本数量）后基本实现收敛。这证明了所提出方法的样本效率。

图 10 展示了通过贝叶斯优化获得的 Rosenbrock基准函数最终结果。

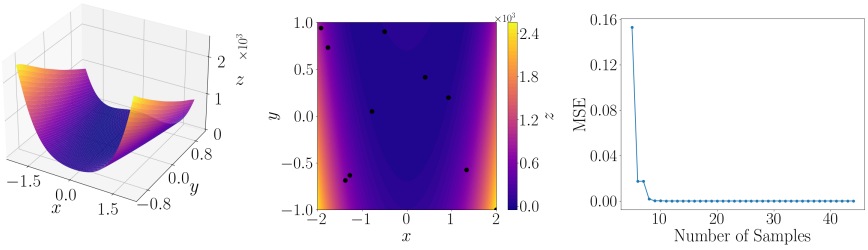


(a) (b) (c)

图9：混合高斯–周期基准函数的代理建模结果。(a) 经过21次高保真评估（即样本数）后的最终代理模型曲面。(b) 等高线图，黑色标记表示样本的位置。(c) 独立验证集上的均方误差（MSE）随样本数的变化。

图 10a 中的高斯过程代理模型成功再现了高保真模型（图 8c 和图 8d）的关键几何特征，包括谷地的曲率以及边界附近的陡峭上升。图 10b 中样本数量的空间分布证实了采样过程具有自适应性：从 5 个初始样本开始，后续评估会集中于认知不确定性较高的区域，而这些区域主要沿着谷地路径分布。因此，各向异性响应得到了高效刻画。

图10c报告了均方误差的演化过程，显示代理模型精度先急剧下降，随后很快收敛。在经过9次高保真评估后，满足停止准则，证实了所提出的框架即使在强各向异性和数据可用性有限的情况下，也能够构建精确的代理模型。



(a) (b) (c)

图10：Rosenbrock基准函数的代理建模结果。(a) 经过9次高保真评估（即样本数）后的最终代理模型曲面。(b) 等高线图，黑色标记表示样本的位置。(c) 独立验证集上的均方误差（MSE）随样本数的变化。

4.2.2. 贝叶斯反演参数推断

本节采用第3.2节所述的贝叶斯反演策略，报告了第4.2节介绍的二维解析基准问题的参数推断结果。分析仅限于二维设置，旨在评估推断过程在参数耦合和非凸响应景观下的表现，而不是对其扩展到多维参数空间的可扩展性作出结论。

通过利用第4.2.1节中借助贝叶斯优化构建的高斯过程代理模型（见图9和图10），求解这些逆问题。对于每个基准函数，分析包括计算最大后验估计、评估最小二乘剖面及相应的非线性最小二乘剖面。这有助于系统地刻画可容许参数空间及其相关的认知不确定性。针对混合高斯–周期函数（公式（24））和 Rosenbrock函数（公式（25）），分别讨论这两种情况。

图11展示了混合高斯–周期基准函数的贝叶斯反演参数推断结果。图11a所示的最小二乘曲面呈现出非凸景观，并具有一个占主导地位的吸引域；相应的图11b等高线图则突出显示了一个界限清晰的低最小二乘值区域，其周围分布着近乎同心的等值线。为充分探索参数空间，最小二乘最小化从多个相互独立的初始猜测值（红色三角形）开始。尽管最小二乘景观存在轻微的不规则性，大多数优化运行仍收敛至观测感兴趣量（黑色方块）附近的一个紧凑区域 $\bar{y} = 0.63$，并在同一吸引域内得到多个彼此聚集的最大后验估计（绿色星形）。

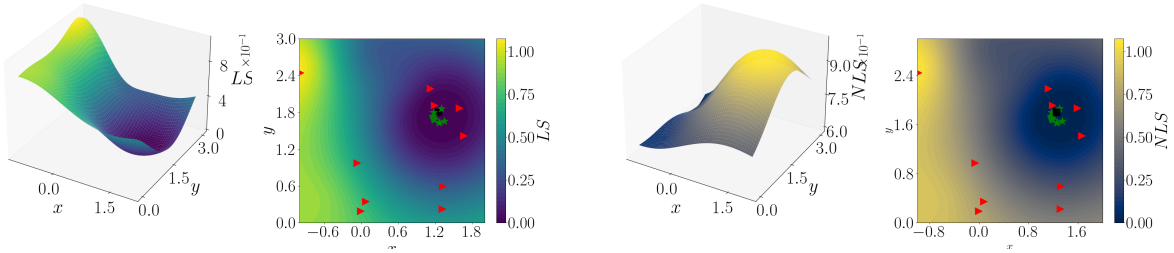
推断得到的最大后验解集中在参数向量$\mathbf{x}_{\mathrm{MAP}} = [1.248,\ 1.812]$附近，该向量使最小二乘泛函达到最小，残差值约为 LS ≈ 0.03，表明代理模型预测与目标观测值高度吻合。由公式（18）中的最小二乘泛函计算得到的非线性最小二乘曲面及其等高线图（图11c、图11d）显示，后验分布以$\mathbf{x}_{\mathrm{MAP}}$为中心呈现尖锐峰值。非线性最小二乘曲面的最大值约为0.90，远离最大后验区域后迅速衰减。尽管最小二乘曲面具有非凸特征，近似表示后验分布的非线性最小二乘曲面仍基本呈单峰且高度局部化，表明认知不确定性较低，局部参数可辨识性较强。

通过对最大后验估计附近的后验分布进行局部高斯近似，利用边际可信区间量化各参数的不确定性。根据协方差矩阵 $\mathbf{\Sigma}_{\mathrm{MAP}}$ 的对角元素计算区间界限；该协方差矩阵定义为在最大后验点处计算的 NLS 泛函海森矩阵的逆，如公式（19）所示。由此得到与坐标轴对齐的置信区域，用以近似后验分布的高概率区域，并为各参数提供易于解释的不确定性界限。所得最大后验估计和边际可信区间汇总于表3。

图12展示了 Rosenbrock基准函数的贝叶斯反演结果。图12a中的最小二乘曲面捕捉到了 Rosenbrock 景观中典型的狭窄弯曲谷地，图12b中的等高线图则证实存在一个占主导地位的极小值。

表 3：混合高斯–周期基准函数的最大后验估计和边际可信区间。目标值为 $\bar{y} = 0.63$，最大后验点处的最小二乘残差约为 0。03，后验峰值达到 $\mathrm{NLS}_{\max} \approx 0.90$。

参数	最大后验估计	可信区间
x	1.248	[1.158, 1.638]
y	1.812	[1.323, 2.221]

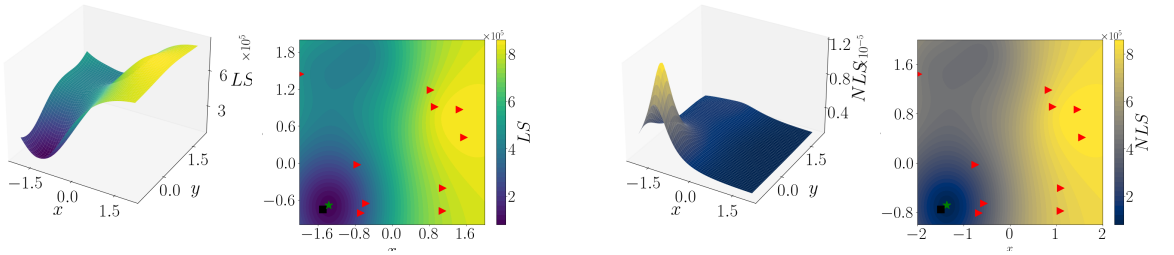


(a) 最小二乘曲面　(b) 最小二乘等高线　(c) 非线性最小二乘曲面　(d) 非线性最小二乘等高线

图11：混合高斯–周期基准函数的贝叶斯反演结果所进行的参数推断。红色三角形：初始猜测值；黑色方块：观测感兴趣量；绿色星形：最大后验估计。

从多个起始点（红色三角形）初始化的独立优化运行均稳定地收敛到该极小值，从而得到一个唯一的最大后验估计（绿色星形），其位置接近$\mathbf{x}_{\mathrm{MAP}} = [-1.5,\ -0.6]$，且与观测感兴趣量（黑色方块）非常接近。

相应的非线性最小二乘曲面（图12c、图12d）呈现尖锐的单峰特征，后验分布高度集中于最大后验估计附近。未检测到次级模态，这表明参数可辨识性极佳，且认知不确定性可以忽略不计。



（a）最小二乘曲面　（b）最小二乘等高线　（c）非线性最小二乘曲面　（d）非线性最小二乘等高线

图12：Rosenbrock基准函数的贝叶斯反演结果所进行的参数推断。红色三角形：初始猜测值；黑色方块：观测感兴趣量；绿色星形：最大后验估计。

4.2.3. 讨论

第4.2.1节和第4.2.2节所展示的数值验证结果，证明了所提出的贝叶斯框架在求解具有耦合参数、非凸响应面和显著各向异性的反问题时，具有稳健性和有效性。

与一维情形（第4.1节）一样，结合 BO 与贝叶斯反演在样本效率和不确定性量化方面具有优势。通过高斯过程回归和基于 UCB 的不确定性感知采样构建的代理模型，能够利用有限次数的评估准确近似高保真响应，即使存在狭窄谷地、陡峭梯度和多峰结构也是如此。反过来，可靠代理模型的可用性使贝叶斯反演能够高效实施，从而以可忽略不计的计算成本完成最大后验估计和后验分析。

混合高斯–周期基准凸显了该框架处理具有中度不规则地形的非凸逆问题的能力；在这类问题中，需要采用多个初始值以确保对参数空间进行充分探索。相比之下，Rosenbrock 基准展示了一个适定逆问题，其各向异性显著且解唯一可识别，因此后验分布会在最大后验估计附近高度集中。在这两种情况下，代理模型辅助的贝叶斯反演过程都能一致地捕捉后验结构，从而对认知不确定性作出有意义的表征。

总体而言，二维结果补充了一维分析，证明所提出的贝叶斯框架适用于结构复杂性和参数耦合程度更高的逆问题，同时保持了方法上的清晰性和计算效率。

5. 结论

本研究提出了一种统一的贝叶斯框架，将高斯过程（GP）代理建模与贝叶斯反演（BI）相结合，以高效求解存在不确定性的逆问题。该框架面向高保真模型计算成本高昂且数据可用性有限的情形，并提供一致的概率表述，以实现稳健且可解释的参数推断。

在代理建模阶段，通过贝叶斯优化（BO）构建并自适应地细化高斯过程模型，从而在考虑预测不确定性的同时，高效探索参数空间。这种自适应策略显著减少了获得准确代理表示所需的高保真模型评估次数，从而在不牺牲可靠性的前提下提高了计算效率。

建立代理模型后，在贝叶斯反演框架下求解逆问题，得到最大后验概率估计以及输入参数的后验分布。这种概率表征能够严格评估认知不确定性，并深入揭示逆问题中参数的可辨识性和敏感性。

所提出的框架通过一系列成熟的一维和二维解析基准问题进行验证，这些问题具有非线性、多模态和非凸响应面。这些基准问题提供了可控且易于解释的测试环境，用于评估集成的贝叶斯优化与贝叶斯反演方法的表现，并分离其关键方法特性。数值结果表明，在这些低维问题中，统一框架能够高效构建代理模型、准确进行参数推断，并提供有价值的不确定性量化结果。

结果凸显了在统一框架中结合贝叶斯优化与贝叶斯反演的协同效益，使感知不确定性的代理建模与概率推断能够以相互促进的方式开展。这种整合有助于实现可靠的反演分析，同时兼顾计算效率、准确性与不确定性量化。

未来研究的可能方向包括：将所提出的方法应用于涉及多维参数空间的逆问题，纳入多保真度和物理信息代理模型，以及开发适用于大规模计算场景的可扩展推断策略。这些拓展将进一步提升该框架在复杂工程问题中的适用性，同时保持其方法论的透明度与概率推断的严谨性。

通过在单一概率工作流程中统一贝叶斯优化与贝叶斯反演，所提出的方法为计算力学及相关领域的逆问题提供了一种结构化且样本高效的求解策略。

致谢

本研究部分得到意大利大学与研究部（MUR）通过DORIAN项目（“可持续、韧性、安全的环境”）的资助，该项目属于帕维亚大学土木工程与建筑系博士项目的一部分。Mihaela Chiappetta、Massimo Carraturo 和 Ferdinando Auricchio 谨此致谢。

本研究也获得了德国研究基金会（DFG）研究生院GRK 2868 D3的资助——项目编号493401063。Mihaela Chiap- petta、Markus Kästner和Alexander Raßloff谨此致谢。

利益冲突

作者声明，他们不存在已知的可能影响本文所报告工作的利益冲突或个人关系。

参考文献

[1] Albert Tarantola。《反问题理论与模型参数估计方法》。SIAM，2005年。[2] Charles W Groetsch 和 CW Groetsch。《数学科学中的反问题》，第52卷。施普林格，1993年。doi：10.1007/978-3-322-99202-4。URL https://doi.org/10.1007/978-3-322-99202-4。[3] Richard C Aster、Brian Borchers 和 Clifford H Thurber。《参数估计与反问题》。爱思唯尔，2018年。[4] Francisco Duarte Moura Neto 和 Antônio José da Silva Neto。《反问题及其应用导论》。爱思唯尔，2018年。doi：10.1007/978-3-642-32557-1。URL https://doi.org/10.1007/978-3-642-32557-1。[5] Andrew M Stuart。反问题：贝叶斯视角。《数值数学年刊》，19：451–559，2010年。doi：10.1017/S0962492910000061。URL https://doi.org/10.1017/ S0962492910000061。[6] Andreas Kirsch 等。《反问题数学理论导论》，第120卷。施普林格，2011年。doi：10.1007/978-3-030-63343-1。URL https://doi.org/ 10.1007/978-3-030-63343-1。[7] Zhiguang Liu、Minkun Cai、Shenda Hong、Junli Shi、Sai Xie、Chang Liu、Huifeng Du、James D Morin、Gang Li、Liu Wang 等。柔性压力传感器的数据驱动逆向设计。《美国国家科学院院刊》，121(28)：e2320222121，2024年。doi：10.1073/pnas.2320222121。URL https://doi.org/10.1073/pnas.2320222121。[8] Sujin Bureerat 和 Nantiwat Pholdee。基于逆问题的差分进化算法，用于桁架的高效结构健康监测。《Applied Soft Computing》，66：462–472，2018年。doi：10.1016/j.asoc.2018.02.046。URL https://doi.org/10.1016/j.asoc. 2018.02.046。[9] Jia Wang、Yingxue Wang 和 Yanan Chen。利用机器学习进行材料逆向设计。《Materials》，15(5)：1811，2022年。doi：10.3390/ma15051811。URL https://doi. org/10.3390/ma15051811。[10] Alex Zunger。为寻找具有目标功能的材料而进行的逆向设计。《Nature Reviews Chemistry》，2(4)：0121，2018年。doi：10.1038/s41570-018-0121。URL https://doi.org/10.1038/s41570-018-0121。[11] Michael S Zhdanov。《地球物理学中的反演理论与应用》，第36卷。爱思唯尔，2015年。

[12] Wei Liu、Ruoyu You、Jie Zhang 和 Qingyan Chen。面向室内环境逆向设计的快速流体动力学伴随方法的开发。建筑性能模拟期刊，10(3):326–343，2017年。doi: 10.1080/19401493.2016. 1257654。URL https://doi.org/10.1080/19401493.2016.1257654.[13] Kelsey Allen、Tatiana Lopez-Guevara、Kimberly L Stachenfeld、Alvaro Sanchez Gonzalez、Peter Battaglia、Jessica B Hamrick 和 Tobias Pfaff。使用图网络模拟器进行流固耦合逆向设计。神经信息处理系统进展，35:13759–13774，2022年。URL https://proceedings.neurips.cc/paper_files/paper/2022/file/59593615e358d52295578e0d8e94ec4a-Paper-Conference.pdf.[14] Sean Molesky、Zin Lin、Alexander Y Piggott、Weiliang Jin、Jelena Vucković 和 Alejandro W Rodriguez。纳米光子学中的逆向设计。《自然·光子学》，12(11): 659–670，2018年。doi: 10.1038/s41566-018-0246-9。URL https://doi.org/10.1038/ s41566-018-0246-9.[15] Timothy John Sullivan。不确定性量化导论，第63卷。施普林格，2015年。[16] Roger Ghanem、David Higdon、Houman Owhadi 等。不确定性量化手册，第6卷。施普林格纽约，2017年。doi: 10.1007/978-3-319-12385-1。URL https://doi.org/10.1007/978-3-319-12385-1.[17] Christian Soize。不确定性量化，第22卷。施普林格，2017年。doi: 10.1007/ 978-3-319-54339-0。URL https://doi.org/10.1007/978-3-319-54339-0.[18] Moloud Abdar、Farhad Pourpanah、Sadiq Hussain、Dana Rezazadegan、Li Liu、Mohammad Ghavamzadeh、Paul Fieguth、Xiaochun Cao、Abbas Khosravi、U Rajendra Acharya 等。深度学习中的不确定性量化综述：技术、应用与挑战。信息融合，76:243–297，2021年。doi: 10.1016/j.inffus. 2021.05.008。URL https://doi.org/10.1016/j.inffus.2021.05.008.[19] Andrew D Richardson、Marc Aubinet、Alan G Barr、David Y Hollinger、Andreas Ibrom、Gitta Lasslop 和 Markus Reichstein。不确定性量化。涡度协方差：测量与数据分析实用指南，第173–209页，2012年。doi: 10.1007/ 978-94-007-2351-1_7。URL https://doi.org/10.1007/978-94-007-2351-1_7.[20] Juan Zhang、Junping Yin 和 Ruili Wang。不确定性量化的基本框架与主要方法。《工程数学问题》，2020:1–18，2020年。doi: 10.1155/2020/6068203。URL https://doi.org/10.1155/2020/6068203.[21] Zhen Hu 和 Sankaran Mahadevan。增材制造中的不确定性量化与管理：现状、需求与机遇。《国际先进制造技术杂志》，93:2855–2874，2017年。doi: 10.1007/s00170-017-0703-5。URL https://doi.org/10.1007/s00170-017-0703-5。

[22] Bruno Sudret、Stefano Marelli 和 Joe Wiart。用于不确定性量化的代理模型：概述。载于*2017*年第*11*届欧洲天线与传播会议（*EUCAP*），第793–797页。IEEE，2017年。doi: 10.23919/EuCAP.2017.7928679。URL https://doi.org/10.23919/EuCAP.2017.7928679.[23] Wilhelm Werner。多项式插值：拉格朗日与牛顿。计算数学，第205–217页，1984年。doi: 2007406。URL https://www.jstor.org/ stable/2007406.[24] Bradley K Alpert 和 Vladimir Rokhlin。计算勒让德展开的一种快速算法。*SIAM*科学与统计计算期刊，12(1):158–179，1991年。doi: 10.1137/0912009。URL https://doi.org/10.1137/0912009.[25] Sky McKinley 和 Megan Levine。三次样条插值。红杉学院，45(1):1049–1060，1998年。[26] Gary D Knott。三次样条插值，第18卷。施普林格科学与商业媒体，1999年。[27] Habib N Najm。计算流体力学中的不确定性量化与多项式混沌技术。《流体力学年度评论》，41(1):35–52，2009年。doi: 10.1146/annurev.fluid.010908.165248。URL https://doi.org/10.1146/annurev. fluid.010908.165248.[28] Sun-Chong Wang。人工神经网络。载于*Java*编程中的跨学科计算，第81–100页。施普林格，2003年。doi: 10.1007/978-1-4615-0377-4_5。URL https://doi.org/10.1007/978-1-4615-0377-4_5.[29] David JC MacKay 等。高斯过程导论。北约高级研究所系列：计算机与系统科学，168:133–166，1998年。[30] Christopher Williams 和 Carl Rasmussen。用于回归的高斯过程。神经信息处理系统进展，8，1995年。[31] Andrew Gordon Wilson、David A Knowles 和 Zoubin Ghahramani。高斯过程回归网络。*arXiv*预印本 *arXiv:1110.4411*，2011年。doi: 10.48550/arXiv.1110. 4411。URL https://doi.org/10.48550/arXiv.1110.4411.[32] Klaus Mosegaard 和 Albert Tarantola。逆问题的概率方法。载于《国际地球物理学》，第81卷，第237–265页。爱思唯尔，2002年。doi: 10.1016/ S0074-6142(02)80219-4。URL https://doi.org/10.1016/S0074-6142(02)80219-4.[33] Bradley P Carlin 和 Thomas A Louis。数据分析的贝叶斯方法。CRC Press，2008年。

[34] Marco Ramoni 和 Paola Sebastiani。贝叶斯方法。载于智能数据分析：导论，第129–166页。施普林格，1999年。doi: 10.1016/S1570-8659(05)80036-5。URL https://doi.org/10.1016/S1570-8659(05)80036-5.[35] Jérôme Idier。逆问题的贝叶斯方法。约翰·威立父子公司，2013年。[36] Masoumeh Dashti 和 Andrew M Stuart。逆问题的贝叶斯方法。*arXiv*预印本 *arXiv:1302.6989*，2013年。[37] Simon L Cotter、Massoumeh Dashti、James Cooper Robinson 和 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年。doi: 10.1088/0266-5611/25/11/115008。URL https: // doi.org/10.1088/0266-5611/25/11/115008.[38] Ben G Fitzpatrick。逆问题中的贝叶斯分析。逆问题，7(5):675，1991年。doi: 10.1088/0266-5611/7/5/003。URL https://doi.org/10.1088/0266-5611/ 7/5/003.[39] Peter I Frazier。贝叶斯优化。载于优化与当代问题建模的最新进展，第255–278页。INFORMS，2018年。[40] Roman Garnett。贝叶斯优化。剑桥大学出版社，2023年。[41] Peter I Frazier。贝叶斯优化教程。*arXiv*预印本 *arXiv:1807.02811*，2018年。doi: 10.48550/arXiv.1807.0281。URL https://doi.org/10.48550/arXiv.1807. 0281.[42] Xilu Wang、Yaochu Jin、Sebastian Schmitt 和 Markus Olhofer。贝叶斯优化的最新进展。《*ACM*计算调查》，55(13s):1–36，2023年。doi: 10.1145/ 358207。URL https://doi.org/10.1145/358207.[43]Jonas Adler 和 Ozan Öktem。深度贝叶斯反演。*arXiv*预印本 *arXiv:1811.05910*，1(2):7，2018年。doi: 10.1515/9783111251233-011。URL https: // doi.org/10.1515/9783111251233-011.[44]Daniela Calvetti 和 Erkki Somersalo。逆问题：从正则化到贝叶斯推断。《威立跨学科评论：计算统计学》，10(3): e1427，2018年。doi: 10.1002/wics.1427。URL https://doi.org/10.1002/wics.1427.[45] Sivaram Ambikasaran、Arvind K Saibaba、Eric F Darve 和 Peter K Kitanidis。贝叶斯反演的快速算法。载于地球科学中的计算挑战，第101–142页。施普林格，2013年。doi: 10.1007/978-1-4614-7434-0_5。URL https:// doi.org/10.1007/978-1-4614-7434-0_5.[46] Simon L Cotter、Masoumeh Dashti 和 Andrew M Stuart。偏微分方程贝叶斯逆问题的近似。《*SIAM*数值分析杂志》，48(1):322–345，2010年。doi: 10.1137/09077073。URL https://doi.org/10.1137/09077073。

[47]Marc C Kennedy 和 Anthony O'Hagan。计算机模型的贝叶斯校准。英国皇家统计学会期刊：*B*辑（统计方法论），63 (3):425–464，2001年。doi: 10.1111/1467-9868.00294。URL https://doi.org/10.1111/ 1467-9868.00294.[48] Dave Higdon、James Gattiker、Brian Williams 和 Maria Rightley。利用高维输出进行计算机模型校准。《美国统计学会杂志》，103(482):570–583，2008年。doi: 10.1198/016214507000000888。URL https: // doi.org/10.1198/016214507000000888.[49] Benoit Kugler、Florence Forbes 和 Sylvain Douté。高维逆问题的快速贝叶斯反演。*Statistics and Computing*，32(2):31，2022年。doi: 10.1007/ s11222-021-10019-5。URL https://doi.org/10.1007/s11222-021-10019-5.[50] Alen Alexanderian、Ruanui Nicholson 和 Noemi Petra。模型不确定性下大规模非线性贝叶斯逆问题的最优设计。逆问题，40 (9):095001，2024年。doi: 10.1088/1361-6420/ad602e。URL https://doi.org/10.1088/ 1361-6420/ad602e.[51] Alexander Raßloff、Paul Seibert、Karl A Kalina 和 Markus Kästner。使用贝叶斯优化对spinodoid结构进行逆向设计。计算力学，第1–22页，2025年。doi: 10.1007/s00466-024-02587-w。[52] Bin Zheng、Jing Yang、Bin Liang 和 Jian-chun Cheng。基于机器学习和高斯–贝叶斯模型的声学超材料逆向设计。《应用物理学杂志》，128(13)，2020年。doi: 10.1063/5.0012392。URL https://doi.org/10. 1063/5.0012392.[53] Paul Lartaud、Philippe Humbert 和 Josselin Garnier。贝叶斯逆问题中代理建模的序贯设计。*arXiv*预印本 *arXiv:2402.16520*，2024年。doi: 10.48550/arXiv.2402.16520。URL https://doi.org/10.48550/arXiv.2402.16520.[54] Mihaela Chiappetta、Chiara Piazzola、Massimo Carraturo、Lorenzo Tamellini、Alessandro Reali 和 Ferdinando Auricchio。增材制造过程部件尺度的稀疏网格不确定性量化。《国际机械科学杂志》，256:108476，2023年。doi: 10.1016/j.ijmecsci.2023.108476。URL https://doi.org/10. 1016/j.ijmecsci.2023.108476.[55] Mihaela Chiappetta、Chiara Piazzola、Lorenzo Tamellini、Alessandro Reali、Ferdinando Auricchio 和 Massimo Carraturo。用于激光粉末床熔融增材制造的数据驱动不确定性量化。《国际工程数值方法杂志》，125(17):e7542，2024年。doi: 10.1002/nme.7542。URL https: // doi.org/10.1002/nme.7542.[56] Åke Bjö

rck. 最小二乘法。《数值分析手册》，1:465–652，1990年 .

[57] Steven J Miller. 最小二乘法。《数学系布朗大学》，8(1):5–11，2006年。[58] Weiao Gan、Ziyuan Ji 和 Yongqing Liang。贝叶斯优化中的采集函数。载于*2021*年第二届国际大数据、人工智能与软件工程会议（*ICBASE*），第129–135页。IEEE，2021年。[59]Francesco Archetti、Antonio Candelieri、Francesco Archetti 和 Antonio Candelieri。采集函数。《贝叶斯优化与数据科学》，第57–72页，2019年。doi: 10.1007/978-3-030-24494-1_4。网址：https://doi.org/10.1007/ 978-3-030-24494-1_4。[60] James Wilson、Frank Hutter 和 Marc Deisenroth。最大化贝叶斯优化的采集函数。《神经信息处理系统进展》，31，2018年。[61] Martin Dietrich Buhmann。径向基函数。《数值数学年刊》，9:1–38，2000年。doi: 10.1017/S0962492900000015。网址：https://doi.org/10.1017/S0962492900000015。[62]Arman Melkumyan 和 Fabio Ramos。多核高斯过程。载于*IJCAI*论文集——国际人工智能联合会议，第22卷，第1408页，2011年。[63] José M Bernardo 和 Adrian FM Smith。《贝叶斯理论》，第405卷。约翰·威立父子公司，2009年。[64] Karl-Rudolf Koch 和 Karl-Rudolf Koch。贝叶斯定理。《贝叶斯推断及其大地测量应用》，第4–8页，1990年。doi: 10.1007/BFb0048702。网址：https:// doi.org/10.1007/BFb0048702。[65] Richard Swinburne。贝叶斯定理。《法国哲学评论》，194(2)，2004年。doi: 10.1093/mind/113.451.591。网址：https://doi.org/10.1093/mind/113. 451.591。[66] Paul Damien、Petros Dellaportas、Nicholas G Polson 和 David A Stephens。《贝叶斯理论与应用》。牛津大学出版社，2013年。[67] Jayanta K Ghosh、Mohan Delampady 和 Tapas Samanta。《贝叶斯分析导论：理论与方法》。施普林格科学与商业媒体，2007年。[68] Sanae Lotfi、Pavel Izmailov、Gregory Benton、Micah Goldblum 和 Andrew Gordon Wilson。贝叶斯模型选择、边际似然与泛化。载于国际机器学习会议，第14223–14247页。PMLR，2022年。[69] J-L Gauvain 和 Chin-Hui Lee。针对马尔可夫链多元高斯混合观测的最大后验估计。《IEEE语音与音频处理汇刊》，2(2):291–298，1994年。

[70]Robert Bassett 和 Julio Deride. 最大后验估计量作为贝叶斯估计量的极限. *Mathematical Programming*, 174:129–144, 2019. doi: 10.1007/ s10107-018-1241-0. URL https://doi.org/10.1007/s10107-018-1241-0.[71] Mohammadreza Shahriari. 使用非支配排序遗传算法优化项目网络中的离散时间—成本权衡问题. *Jour-nal of Industrial EngineeringInternational*, 12(2):159–169, 2016. doi: 10.1007/ s40092-016-0148-8. URL https://doi.org/10.1007/s40092-016-0148-8.[72] Alexander Forrester, Andras Sobester 和 Andy Keane. 通过代理建模进行工程设计：实用指南. 约翰·威立父子公司, 2008.[73] Bengt Fornberg 和 Julia Zuev. 龙格现象与径向基函数插值中的空间变化形状参数. *Computers & Mathematics with Applications*, 54(3): 379–398, 2007.[74] Graham Glen 和 Kristin Isaacs. 使用相关性估计 Sobol敏感性指数.*Environmental Modelling& Software*, 37:157–166, 2012. doi: 10.1016/j.envsoft.2012. 03.014. URL https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2012.03.014.[75] Steve Brooks, Andrew Gelman, Galin Jones 和 Xiao-Li Meng. 马尔可夫链蒙特卡罗手册. CRC Press, 2011.[76] Christophe Andrieu 和 Johannes Thoms. 自适应马尔可夫链蒙特卡罗教程. *Statistics andcomputing*, 18(4):343–373, 2008.

附录 A. 实现细节：`UQforPy` 仓库

本研究开发的所有计算组件均使用开源 UQforPy 仓库实现，地址为 https://bitbucket.org/uqpython/uqforpython/ src/main/。UQforPy 提供了一个模块化且可扩展的平台，用于不确定性量化和逆问题，支持计算科学与工程领域中广泛的数据驱动建模任务。该代码库使用 Python 实现，并利用 NumPy、SciPy 和 scikit-learn 等标准科学计算库。

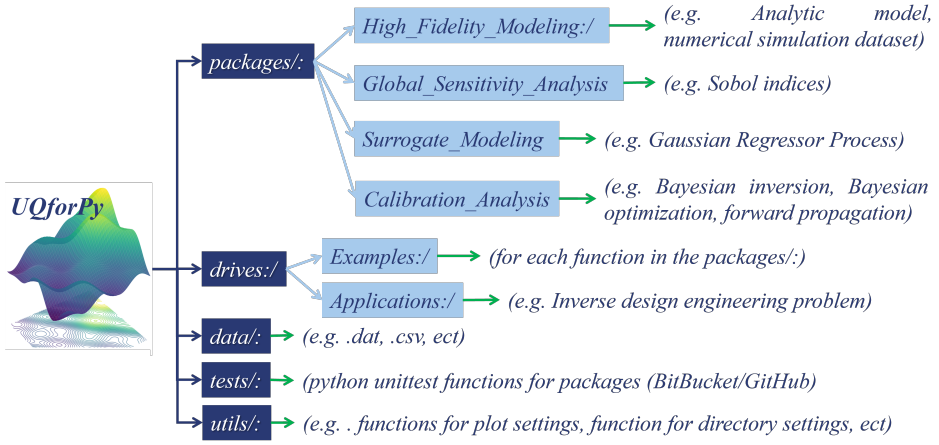


图 A.13：UQforPy 仓库的模块化架构。该框架由相互独立的组件构成，支持高保真建模、代理模型构建、敏感性分析和参数推断。其设计能够为工程应用中的不确定性感知型逆问题提供可扩展、可复现且可定制的工作流程。

如图 A.13 所示，该仓库划分为多个专用目录，每个目录都封装了一个特定的方法模块：

- packages/：用于建模和推断的核心模块，包括：

  – 高保真建模/：解析基准函数和仿真程序。– 全局敏感性分析/：基于方差的敏感性分析工具，包括 Sobol 指数 [74]。– 代理建模/：用于基于高斯过程的代理模型构建与评估的程序。– 校准分析/：用于贝叶斯优化、贝叶斯反演和正向不确定性传播的模块。

- drives/：与 packages/ 交互的驱动脚本，包括：

  – 示例/：各个组件的独立演示。

– 应用/：集成贝叶斯优化和贝叶斯反演的完整逆问题流程。

- data/：用于确保基准测试可复现性和验证的标准化数据集（.dat、.csv）。

- tests/：用于数值验证和集成检查的单元测试套件（例如，通过 Bitbucket Pipelines 或 GitHub Actions 运行）。
- utils/：用于绘图、文件输入输出和工作流编排的辅助实用工具。

UQforPy 平台旨在兼顾计算效率与用户灵活性。它既支持探索性研究，也适用于生产级分析，因此特别适合处理涉及高成本高保真评估、认知不确定性和有限数据的问题。

虽然本文着重于将 BO 和 BI 应用于逆问题，但该代码库也可扩展至更广泛的不确定性量化技术，包括蒙特卡罗模拟、多项式混沌展开和随机配置。

UQforPy 致力于提升可复现性、可扩展性和易用性，以支持将不确定性感知建模融入计算力学和工程工作流。目前正在开发的功能包括先进的贝叶斯神经网络模型、自适应实验设计策略和不确定性感知优化工具。这些改进有望进一步增强 UQforPy 在真实工程场景中解决复杂逆问题的能力。

附录 B. 通过贝叶斯优化结果进行一维基准测试的代理建模

本附录对第4.1.1节讨论的结果进行了补充，提供了更多验证研究，以考察本研究采用的代理建模策略。

具体而言，本文针对 Lévy 和 Griewank 基准函数（图 2b–d）进行了系统测试，旨在评估第3.1节所述贝叶斯优化框架中不同代理模型、采集函数和采样策略的预测性能。

这些测试进一步支持采用基于 Matérn 协方差核的高斯过程（GP）代理模型，并结合通过置信上限（UCB）采集函数进行的不确定性感知采样，作为所提出贝叶斯框架中的默认代理建模配置。

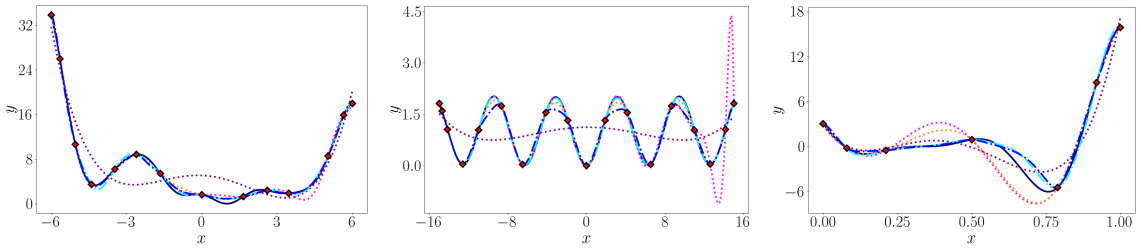
图B.14报告了采用不同代理建模策略得到的预测响应。这些结果证实并拓展了从混合高斯-周期情形（第4.1.1节）得出的结论。

对于 Lévy 函数（图B.14a），其景观高度非凸且存在多个局部极小值，采用 Matérn 核和径向基函数核的高斯过程模型均能成功复现高保真模型的复杂结构特征。基于Matérn核的代理模型在解析局部不规则性方面表现出更强的稳健性，而确定性模型——例如拉格朗日多项式（LP）、勒让德展开（LE）和三次样条（CS）

——则无法捕捉细尺度行为，或在剧烈变化区域缺乏足够的灵活性。

Griewank 函数（图B.14b）结合了缓慢变化的全局趋势与快速的周期性波动，能够通过高斯过程代理模型实现准确建模。相比之下，LP 模型表现出明显的边界振荡（龙格现象 [73]），而 LE 模型无法捕捉该基准函数中的高频成分。

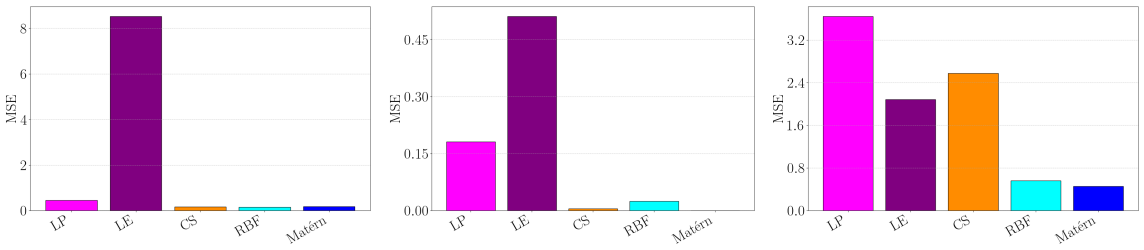
对于 Forrester 函数（图B.14c），其特点是平滑的全局结构与尖锐的局部非线性，高斯过程 Matérn 代理模型再次给出了最准确的结果。确定性模型往往会过度平滑局部复杂性，或无法准确表示这种复杂性。



(a) Lévy　(b) Griewank　(c) Forrester

图B.14：图2b–d中不同代理模型对基准函数的预测响应。黑色实线表示高保真模型；洋红色、紫色和橙色点线分别对应 LP、LE 和 CS 模型；青色和蓝色线分别表示采用 Matérn 和径向基函数核的高斯过程代理模型。红色菱形表示训练样本点。

独立验证集上的均方误差（MSE）值（见图 B.15）定量证实了这些观察结果。高斯过程代理模型（尤其是采用 Matérn核的模型）的表现始终优于确定性替代方案。



(a) Lévy　(b) Griewank　(c) Forrester

图 B.15：图2b–d 中基准函数的代理模型均方误差（MSE）比较。

附录 C. 一维基准测试的贝叶斯反演结果参数推断

本附录通过对所提出的贝叶斯框架进行更多验证，补充了第 4.1.2 节中的分析。具体而言，报告了通过贝叶斯反演（BI）获得的 Lévy 和 Griewank 基准

基准函数的参数推断结果（图 2b–c）。这些函数用于考察该框架在存在局部非线性和强多模态景观时的能力。

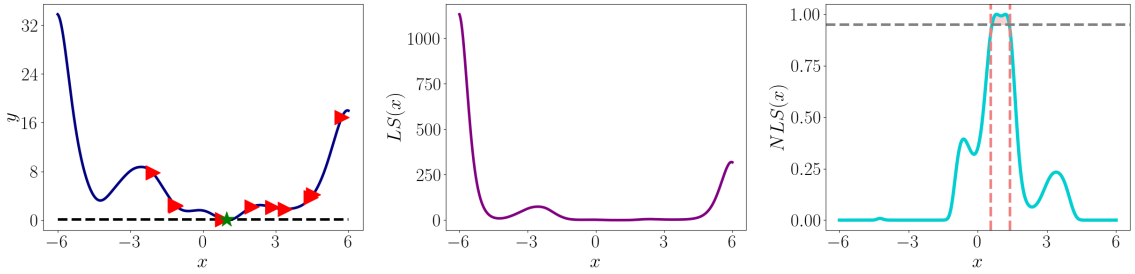
对于每个基准问题，分析最大后验估计、最小二乘（LS）泛函以及相应的负最小二乘（NLS）剖面，以刻画逆问题的结构及其相关的认知不确定性。

图 C.16 报告了 Lévy 基准问题的结果。图 C.16a 展示了由多次独立优化运行得到的推断最大后验估计，每次运行均从参数空间中不同的猜测点初始化。所有运行均基于通过贝叶斯优化构建的高斯过程代理模型（图5b），并一致收敛到同一区域。

最小二乘剖面（图 C.16b）呈现出尖锐且分离良好的极小值，表明具有较强的局部可辨识性。相应的非线性最小二乘剖面（图 C.16c）按公式（18）计算，呈尖锐的单峰形态，并集中在最大后验估计 $\mu = 0.76$ 附近，标准差为 $\sigma \approx 0.02$。这种集中的后验分布反映了在该代理模型下存在一个适定逆问题。

非线性最小二乘剖面中可见轻微的次级峰，但与主模态相比，其振幅微不足道。这些特征被认为是残留的数值伪影或轻微的次级极小值，不会影响最大后验解的稳定性。

推断得到的后验分布能够显著缩小可容许参数空间，从而有效地确定一个狭窄的高概率区域。这证实了所提出的方法在求解具有局部非线性响应的逆问题时具有稳健性。



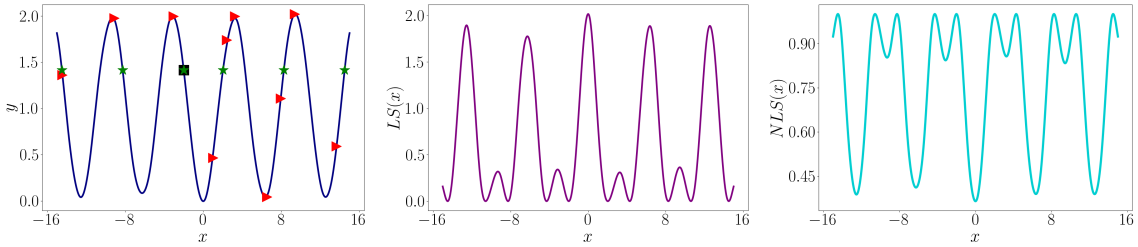
(a) 最大后验估计　(b) 最小二乘剖面　(c) 非线性最小二乘剖面

图 C.16：Lévy 基准问题的贝叶斯反演结果参数推断。(a) 多次优化运行得到的最大后验估计。(b) 最小二乘泛函剖面。(c) NLS泛函剖面，用于表示后验分布近似；灰色水平虚线标示 0.95 阈值，虚线竖线之间以珊瑚色部分突出显示高概率区域。

图 C.17 展示了 Griewank 基准问题的结果。图 C.17a 展示了使用通过贝叶斯优化构建的高斯过程代理模型（图5c），从不同初始猜测点启动优化运行所获得的最大后验估计。

最小二乘剖面（图 C.17b）揭示了一个高度多模态且周期性的景观，其中存在多个深度相近的极小值。因此，非线性最小二乘剖面（图 C.17c）呈现出多个振幅相近的峰值，对应于同样合理的参数配置。

从概率意义上说，这个逆问题本质上不可辨识。尽管代理模型能够准确重构可行解集，但由于目标函数具有周期性，后验分布无法确定一个占主导地位的模态。



(a) 最大后验估计　(b) 最小二乘剖面　(c) 非线性最小二乘剖面

图 C.17：通过 Griewank 基准问题的 BI 结果进行参数推断。(a) 多个初始值下的最大后验估计。(b) 最小二乘泛函剖面。(c) NLS 泛函剖面揭示了周期结构导致的不可辨识性。

对 Lévy 和 Griewank 基准问题的分析凸显了所提框架的灵活性和诊断能力。对于 Lévy 函数，NLS 剖面所表示的后验分布高度集中且具有唯一峰值，证实了该逆问题适定。相比之下，Griewank 案例表明，该框架能够有效揭示周期性逆问题中固有的不可辨识性。

在这两种情况下，所提出的贝叶斯框架都能对可容许参数空间进行可解释的刻画，即使存在结构歧义，也能支持稳健推断和明智决策。

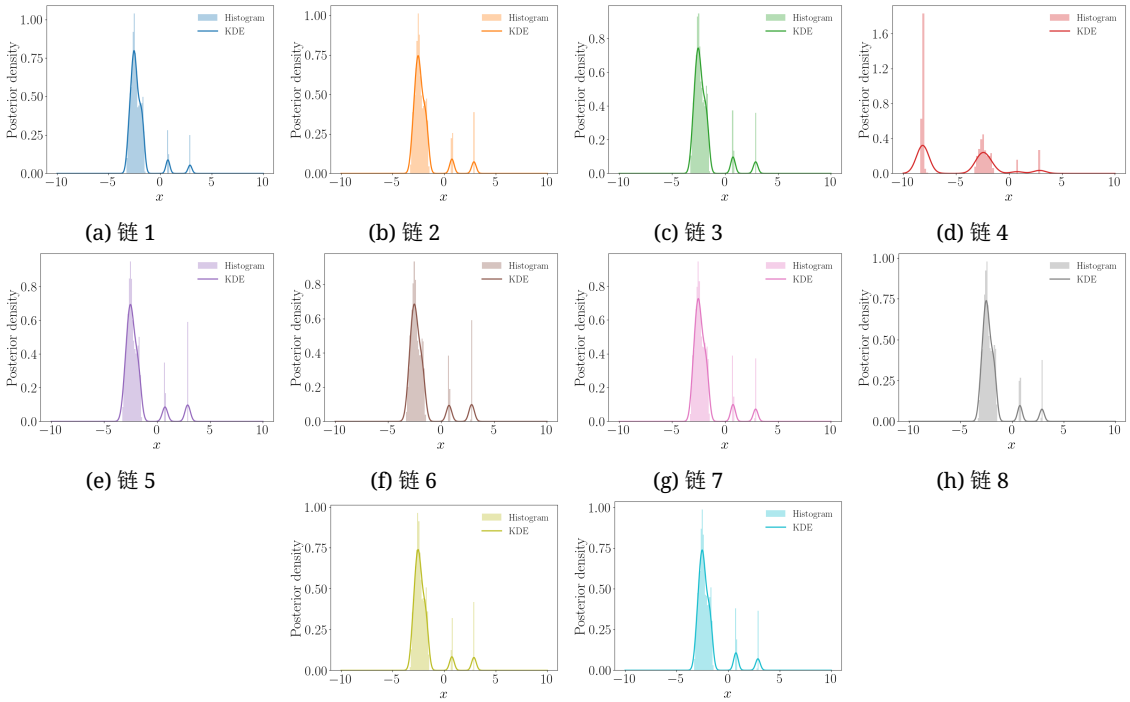
附录 D. 基于代理模型的后验分析补充内容

本附录提供一项基于代理模型辅助的马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）采样的补充后验分析 [75, 76]。这项分析旨在作为澄清性补充，而非对所提出的贝叶斯框架（见第3节和第4节）进行方法上的扩展，并展示了在何种情形下需要基于采样的推断，才能准确捕捉后验分布的结构。分析采用第4节所述、通过贝叶斯优化（BO）构建的高斯过程（GP）代理模型，并以图2a中介绍的一维混合高斯-周期基准函数作为本分析的代表性参考案例。

本分析旨在强非凸的逆问题情形下，获得独立的后验表示；在此情形下，预期所得后验分布呈多模态。在这类情况下，围绕单个极大值点的局部高斯摘要并不适用，而基于采样的后验探索则可为评估后验复杂度提供直接的定性基准。

根据生成的样本估计出的后验密度如图 D.18 所示。结果始终表明，除了一个占主导地位的后验区域外，还存在

其他次级模态，其相对显著程度因运行而异，反映出底层逆问题固有的多模态结构。



(a) 链 1 (b) 链 2 (c) 链 3 (d) 链 4

(e) 链 5 (f) 链 6 (g) 链 7 (h) 链 8

(i) 链 9 (j) 链 10

图 D.18：针对混合高斯-周期基准，由代理辅助 MCMC 采样得到的边缘后验密度。对于每条链，采样值的经验直方图与核密度估计一并给出。尽管各链一致识别出一个主导后验众数，但次级模态和低概率区域仅被间歇采样，从而导致估计后验形状存在明显的链间变异性。

逐链后验估计揭示了清晰的多模态结构：主导模态在大多数链中被稳健捕获，而额外的次级模态仅被零星探索。因此，对于混合高斯-周期基准（图 2a），围绕单一极大值的局部拉普拉斯近似所依据的假设并不成立，这一点已在第 4.1.2 节中讨论。

为进一步综合分析，图 D.19 中叠加展示了所有链的边缘后验密度，从而简洁地呈现链间变异性和模态一致性。

因此，对于混合高斯-周期基准，本稿并未强制围绕单个最大后验估计采用局部拉普拉斯近似。相反，我们使用负最小二乘（NLS）泛函作为计算成本低廉的诊断工具，以评估后验结构并识别后验概率较高的区域，同时避免采用理论上缺乏依据的单峰高斯近似。这一策略能够定位高概率区间，同时避免不必要的采样或过于严格的假设。

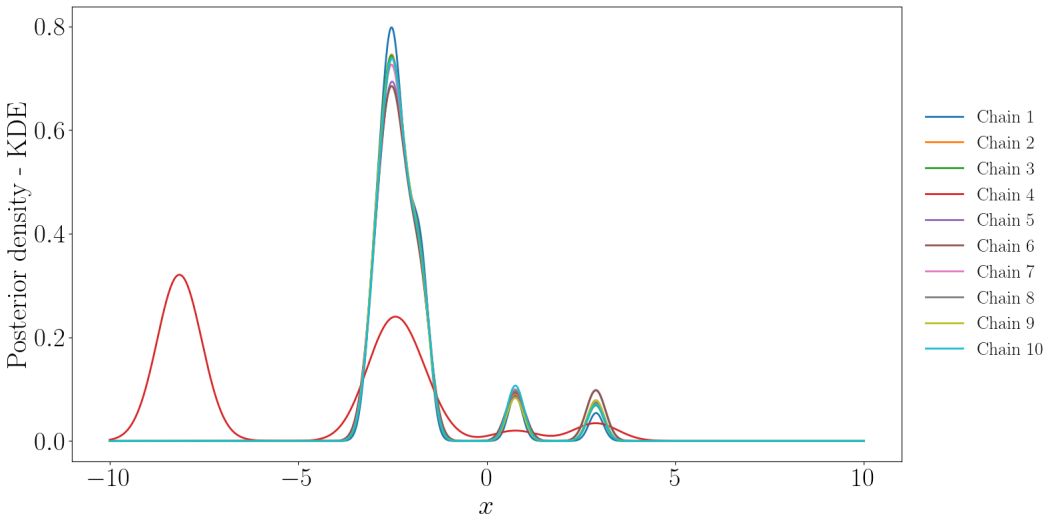


图 D.19：所有代理辅助 MCMC 链得到的边缘后验密度估计叠加图。该图突显了各链共有的主导后验众数，以及以不同频率采样到的次级模态，反映了后验分布的多模态特性。

虽然代理模型评估的计算成本较低，但基于采样的后验探索的实际成本取决于后验分布的复杂程度以及分析所需的精度 [75, 76]。要详细研究这些方面，需要作出额外的建模选择，并会大幅扩展本稿的研究范围。因此，代理辅助 MCMC 被视为所提框架的一种自然延伸，而非其主要目标。

最后，为了进行进一步的定性比较，我们在覆盖可行参数域的稠密一维网格上构建参考后验密度。图 D.20 展示了由此得到的基于网格的后验密度：在参数空间上进行均匀离散化，对代理模型诱导的似然求值，并在均匀先验下对所得数值归一化。网格后验清晰地揭示了多个彼此分离的模态，与图 6 所示并在第 4.1.2 节讨论的 LS 和 NLS 剖面完全一致。这种确定性表示为后验复杂度提供了互补的全局诊断，可据此对 MCMC 结果进行定性评估。

总的来说，本附录中的结果进一步印证了本文的核心方法论主旨：仅当逆问题在经验上适定且后验实际上呈单峰时，才采用局部拉普拉斯近似；与此同时，系统地使用基于 NLS 的诊断，以评估后验结构并以几乎为零的额外成本识别高概率区域。当这些条件不满足时，例如在混合高斯-周期基准问题中，就有必要采用基于采样的方法。从这个意义上说，拉普拉斯近似与 MCMC 是互补工具，适用于后验复杂度不同的情形，而非可相互替代的推断策略。

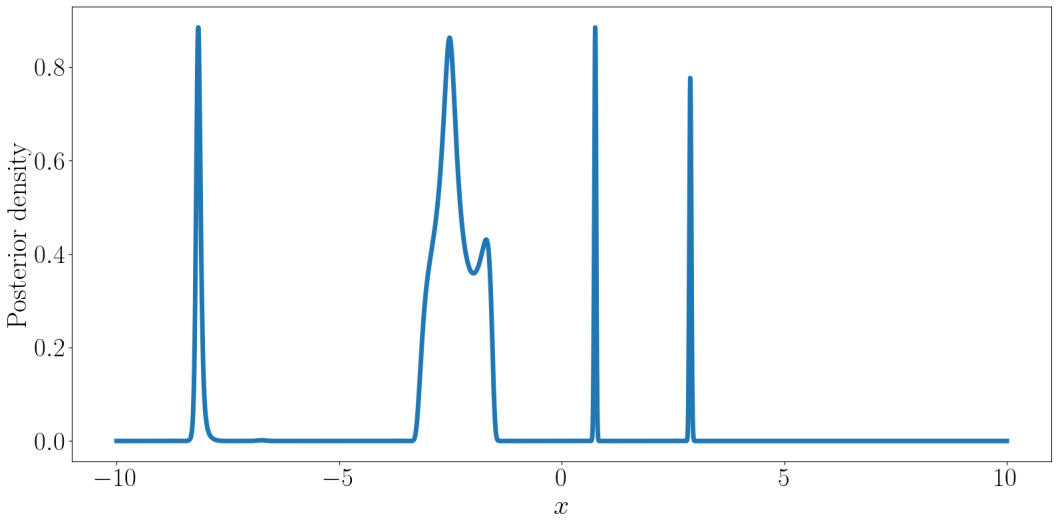


图 D.20：混合高斯-周期基准问题的基于网格的后验密度，通过在参数空间的稠密均匀离散网格上计算代理模型诱导的似然，并对所得数值进行归一化得到。图中清晰地呈现出多峰后验结构，其中包含多个彼此分离的高概率区域。