反问题与数据同化简介

黄政宇
北京大学北京国际数学研究中心
北京大学国际机器学习研究中心

本堂课大纲

- 课程内容简介
  - 贝叶斯反问题 (Bayesian inverse problems)
  - 数据同化 (Data assimilation)
  - 扩散模型 (Diffusion model)

- 课程要求
  - 作业
  - 期末报告

本堂课大纲

- 课程内容简介

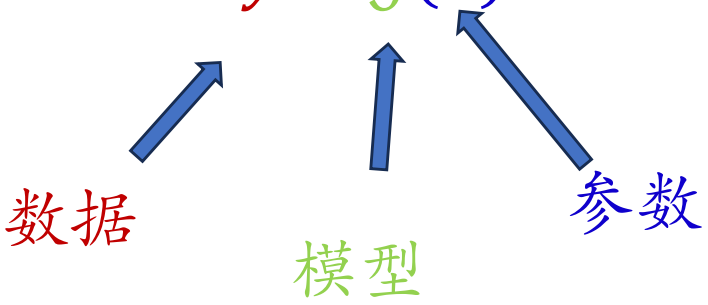
用观测数据更新我们对未知量的概率认识，
并量化不确定性。

- 反问题 ：未知参数 θ, 静态
- 数据同化： 未知轨道、状态 $\{x_n\}_{n=1}$, 时序
- 扩散模型：未知是数据分布，生成

反问题

- 抽象的数学形式

$$y = G(\theta)$$



找到最“好”的θ

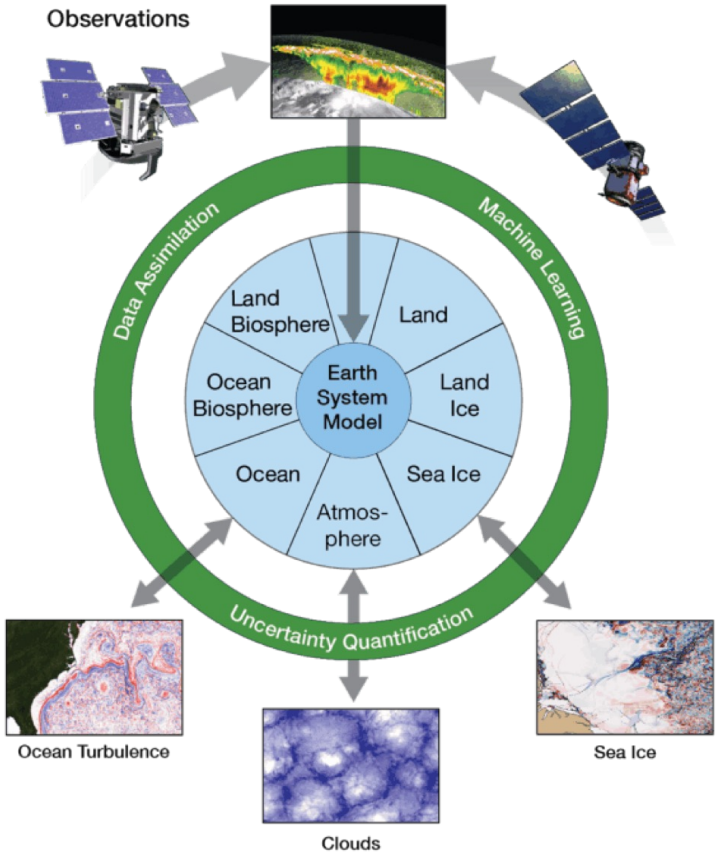
- 未知参数是什么?
- 观测数据是什么?
- 模型是什么?

反问题

- 应用：气候模拟校准

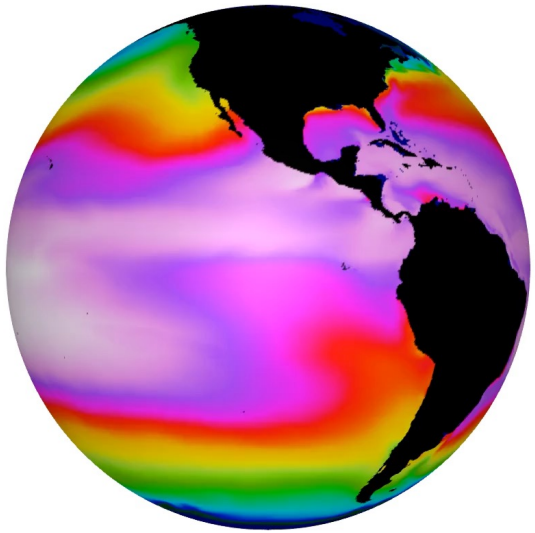
$$y = \mathcal{G}(\theta)$$

数据 y



模型 $\mathcal{G}$

湍流、冰川等模型参数 θ

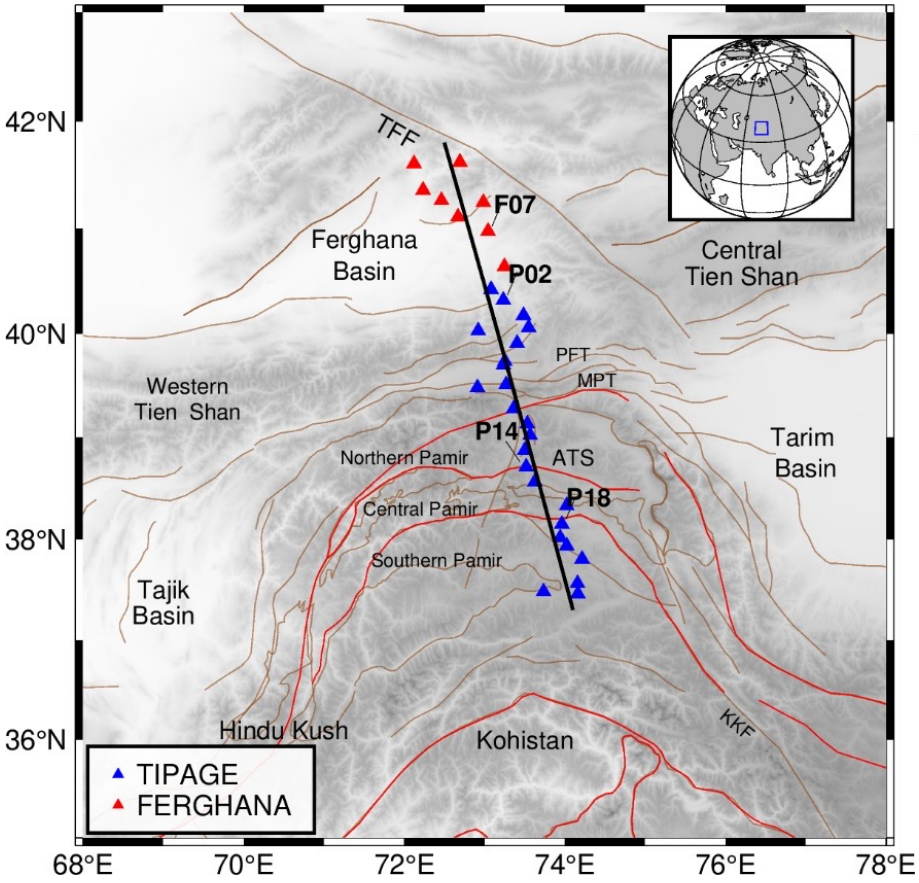


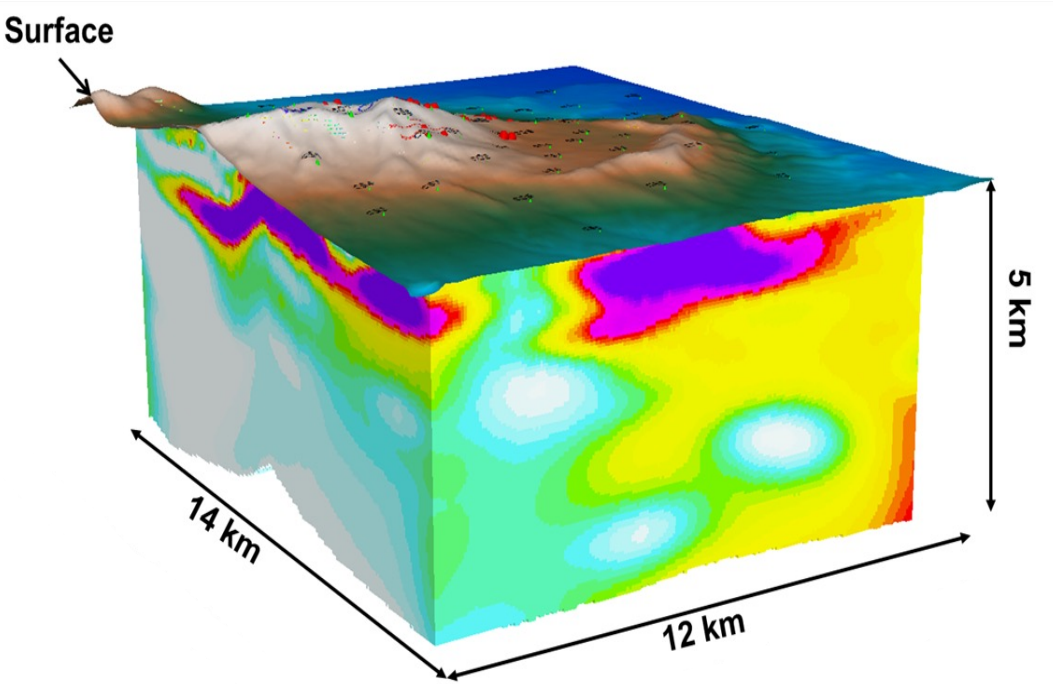
反问题

➢应用：地质勘探

$$y = \mathcal{G}(\theta)$$

数据 y　　模型 $\mathcal{G}$　　地质参数 θ



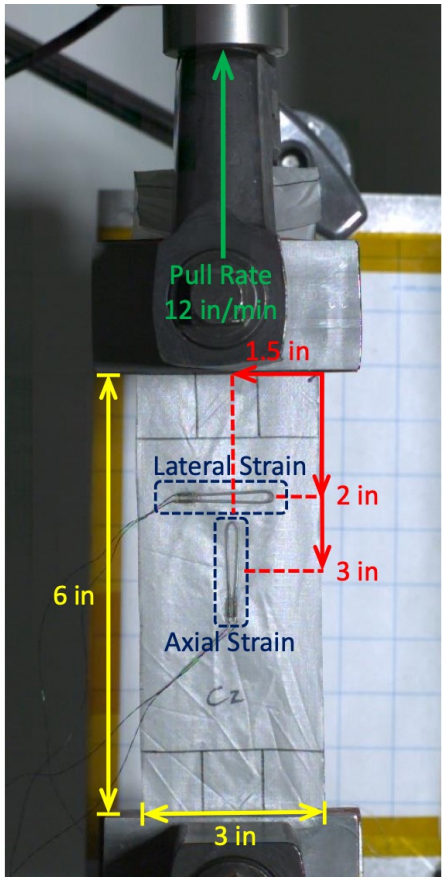


反问题

- 应用：材料力学

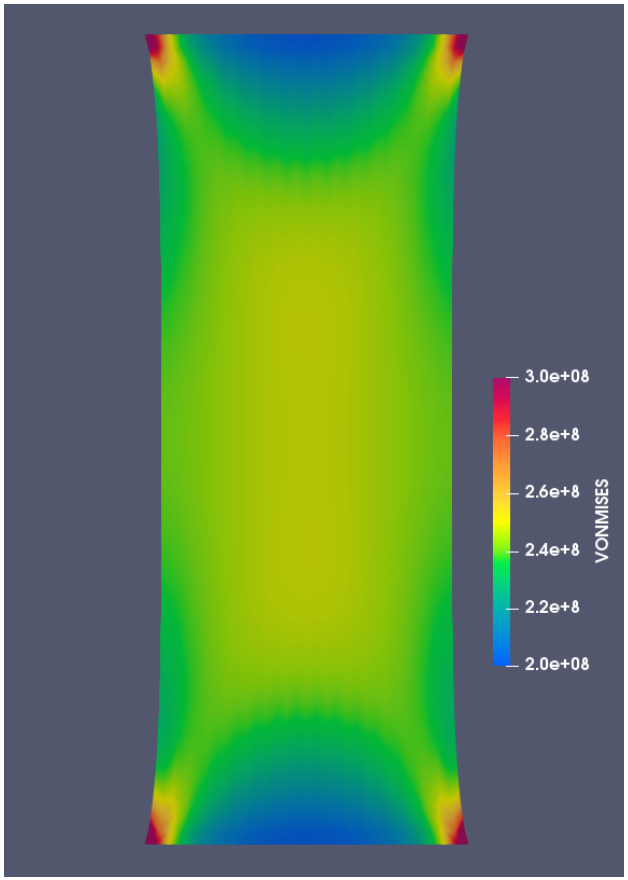
$$y = \mathcal{G}(\theta)$$

数据 y



模型 $\mathcal{G}$

材料参数 θ



反问题

➢应用：数字孪生

$$y = \mathcal{G}(\theta)$$

数据 y

模型 $\mathcal{G}$

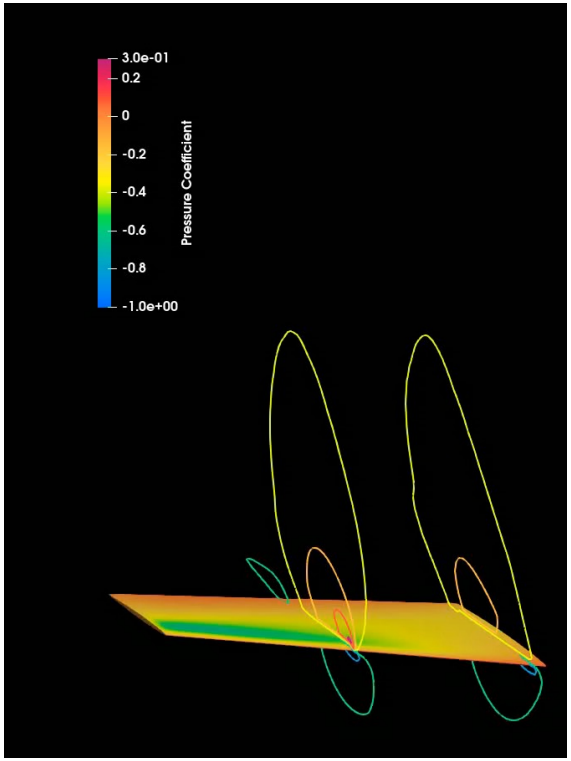
损伤参数 θ

Making Bones: Air Force to develop 'digital twin' of B-1 for damage prediction

By Jared Morgan

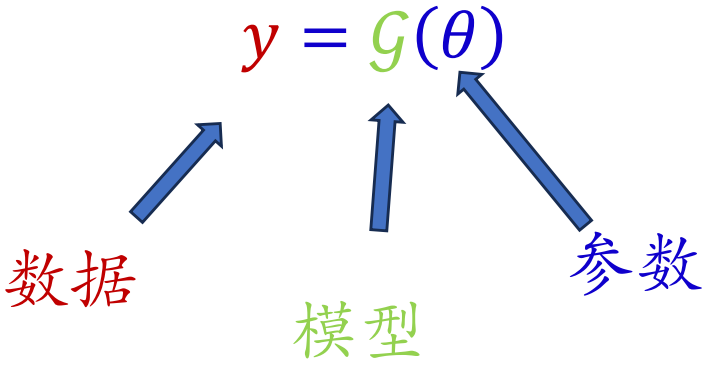
Oct 10, 2020

Two B-1B Lancers, assigned to the 28th Bomb Wing from Ellsworth Air Force Base, S.D., conduct a flyover before landing at Andersen Air Force Base, Guam. (Airman 1st Class Christina Bennett/Air Force)



反问题

- 抽象的数学形式



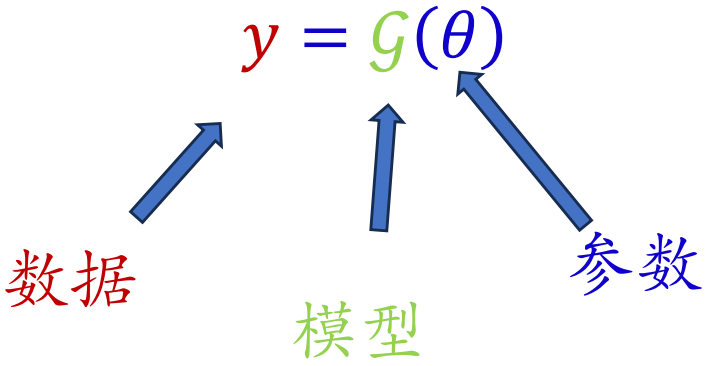
$\theta = [\theta_1; \theta_2]$　　$G(\theta) = \theta_1 + \theta_2$

$y = 1$

θ是多少？

反问题

- 抽象的数学形式



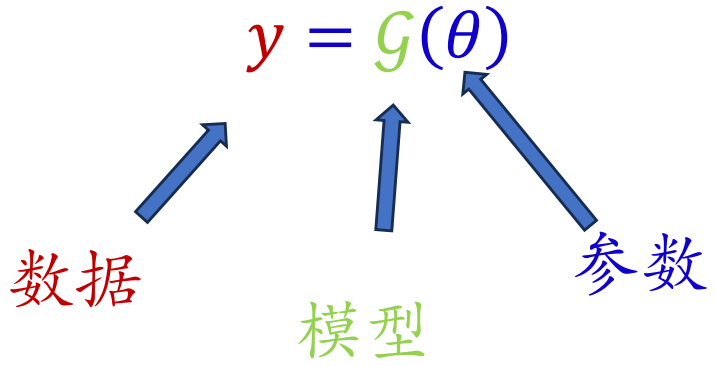
$\theta = [\theta_1; \theta_2]$　　$G(\theta) = \theta_1 + \theta_2$

$y \propto \mathcal{N}(1, 0.1^2)$

θ是多少？

反问题

- 抽象的数学形式



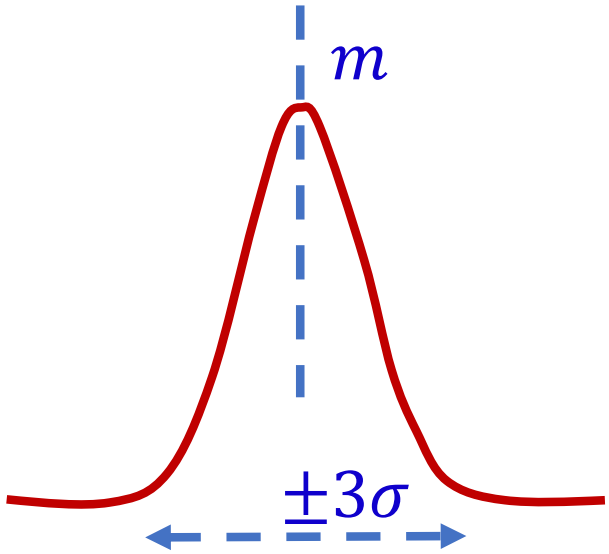
真实世界的问题：

- 观测数据：稀疏且带噪
- 模型不完美：离散误差 + 结构误差
- 问题常不适定：多解 / 病态 / 不可辨识

高斯误差

- 高斯分布

$$\mathcal{N}(x;m,\sigma^2)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right)$$



$$\mathcal{N}(x;m,C)=\frac{1}{\mathrm{Z}}\exp\left(-\frac{1}{2}(x-m)^T C^{-1}(x-m)\right)$$

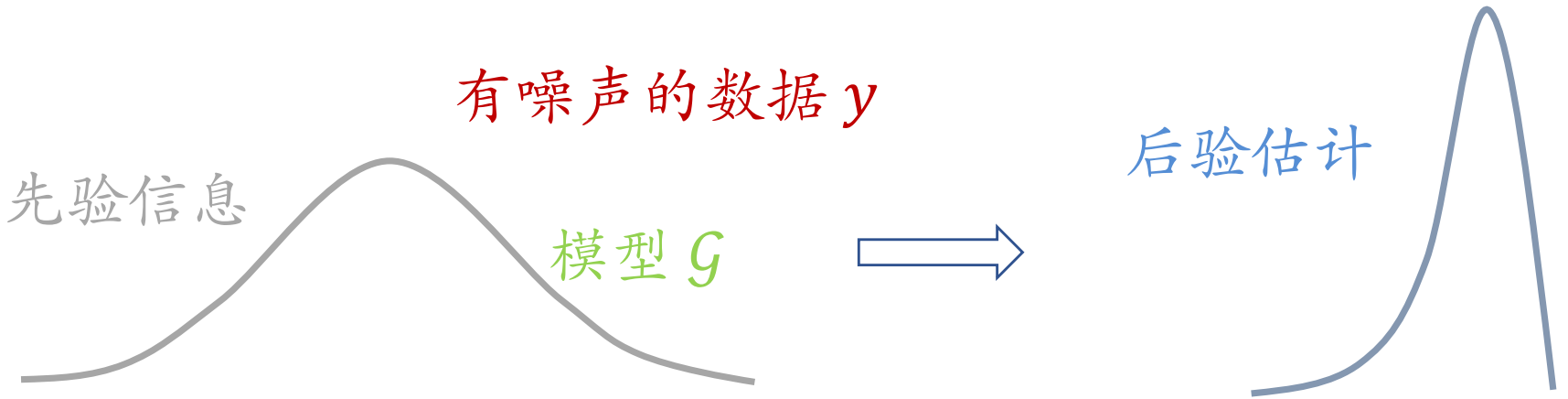
$$\mathrm{Z}=\sqrt{|2\pi C|}=(2\pi)^{N_\theta/2}\sqrt{|C|}$$

贝叶斯反问题

- 抽象的数学形式

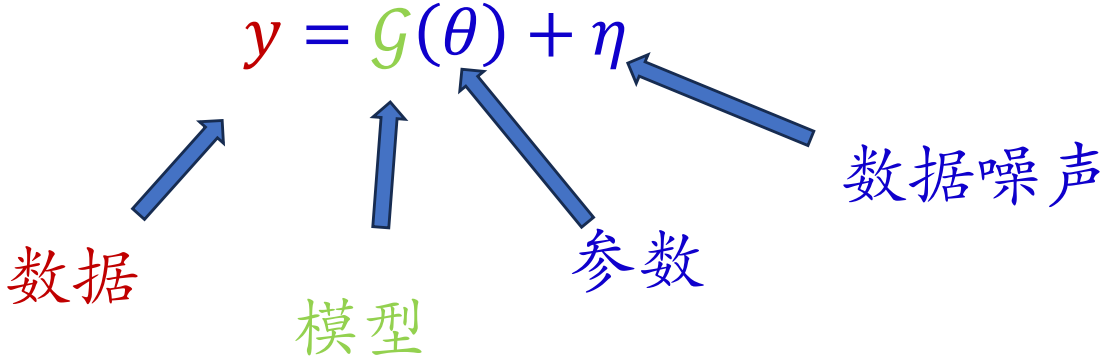
$$y = G(\theta) + \eta$$

数据　模型　参数　数据噪声



贝叶斯反问题

- 抽象的数学形式



$\theta = [\theta_1; \theta_2]$　　$\mathcal{G}(\theta) = \theta_1 + \theta_2$

$y = 1$　　$\eta \propto \mathcal{N}(0, 0.1^2)$

$\theta|y$ 的后验分布是什么？

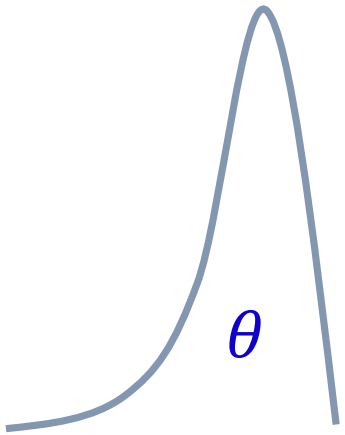
不确定性量化

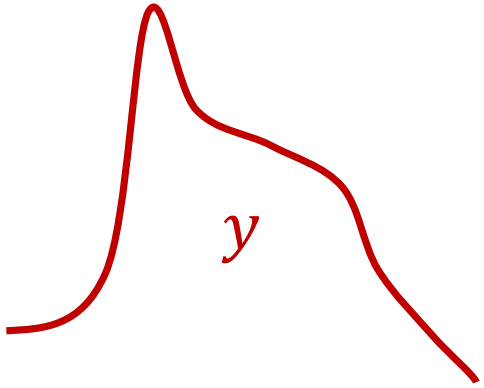
- 抽象的数学形式

$$y = G(\theta) + \eta$$

数据　模型　参数　数据噪声

$G(\theta;$ 新的边界条件、初始条件等$)$ → 新的预测



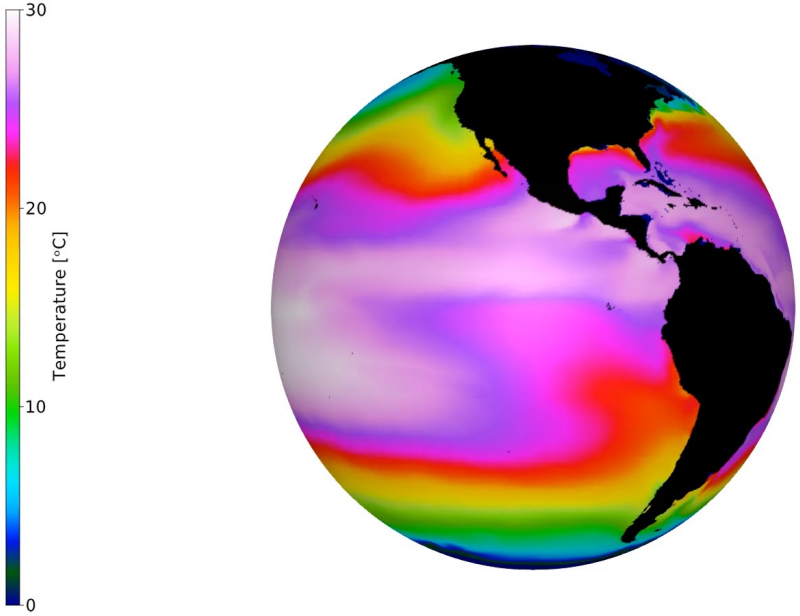


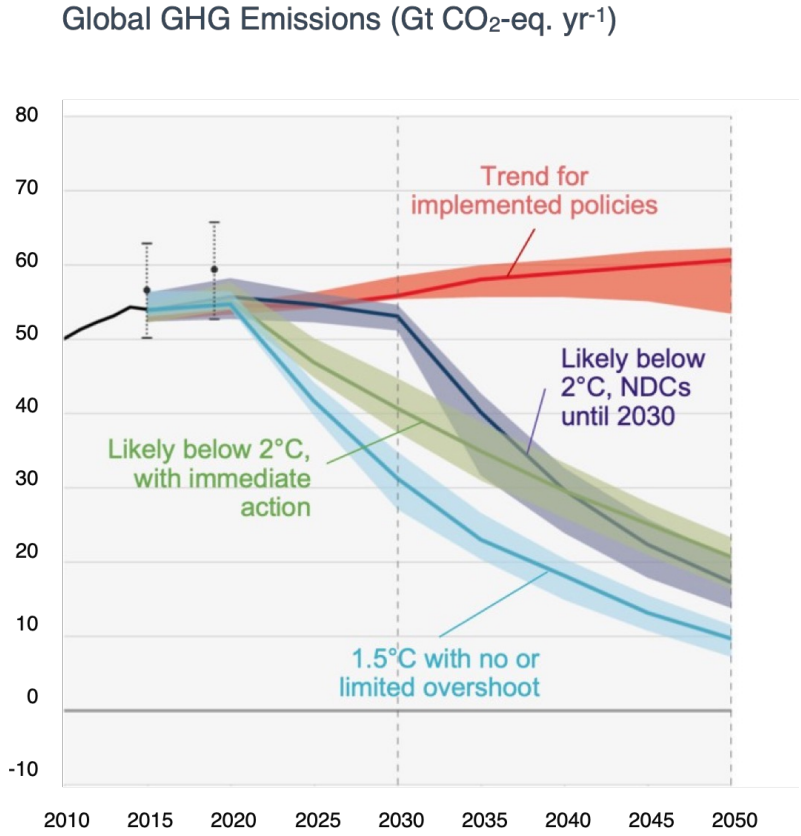
不确定性量化

- 应用：气候模拟校准

湍流、冰川等模型参数 θ

模型 $\mathcal{G}$





IPCC AR 6, Working Group III

贝叶斯反问题

- 基本理论
  - 贝叶斯反问题的适定性
  - 线性贝叶斯反问题(显式解)

- 算法以及相关理论
  - 基于输运的方法
  - 马氏链蒙特卡洛方法
  - 变分推理方法

数据同化

- 抽象的数学形式

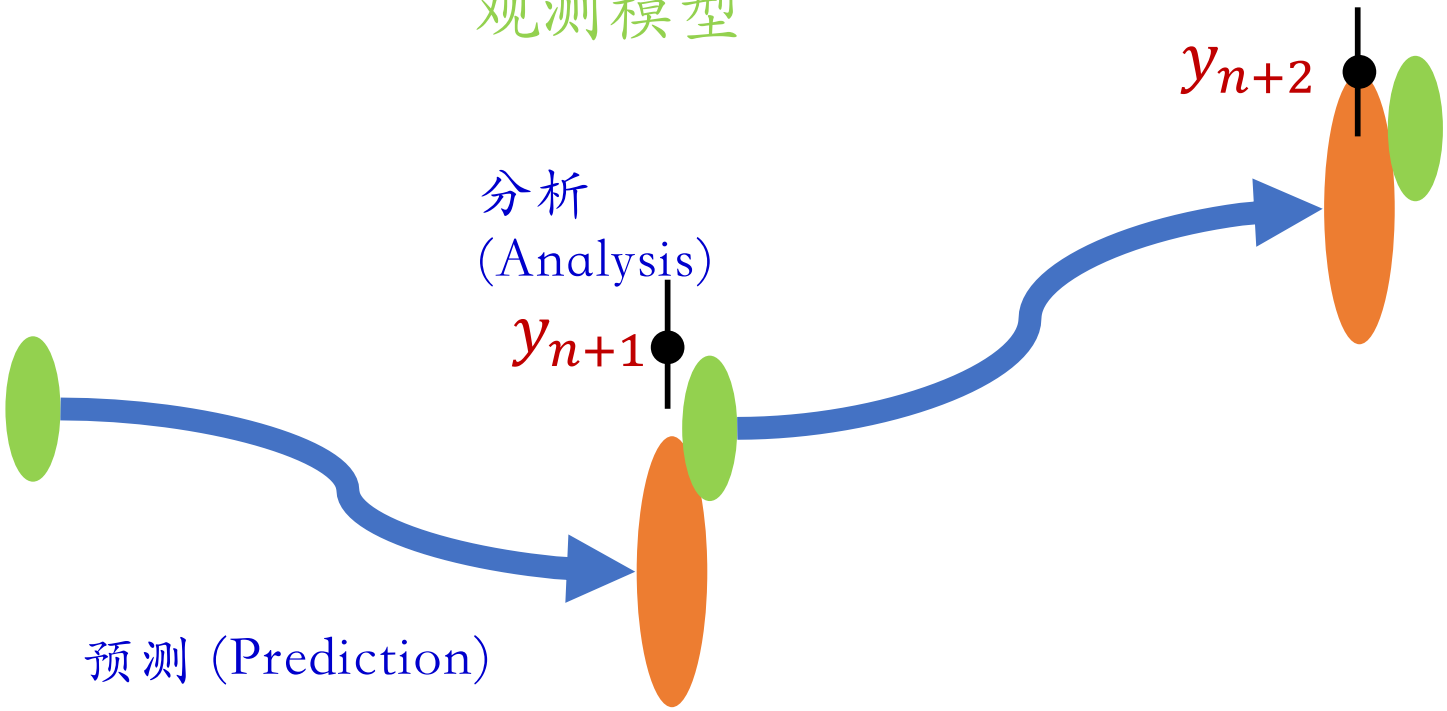
状态　　演化模型

演化方程: $x_{n+1} = \mathcal{F}(x_n) + \omega_{n+1}$

观测方程: $y_{n+1} = \mathcal{H}(x_{n+1}) + \eta_{n+1}$

噪声

数据　　观测模型



数据同化

- 应用：系统控制（无人机、航天器、机器人等）

系统状态

运动定律

控制输入

演化方程: $x_{n+1} = \mathcal{F}(x_n, u_n) + \omega_{n+1}$

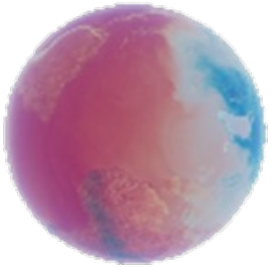
观测方程: $y_{n+1} = \mathcal{H}(x_{n+1}) + \eta_{n+1}$

传感器收集的数据

局部平均算子、局部取值算子等

数据同化

- 应用：数值天气预报



全球的空气湿度、
风速、温度等状态

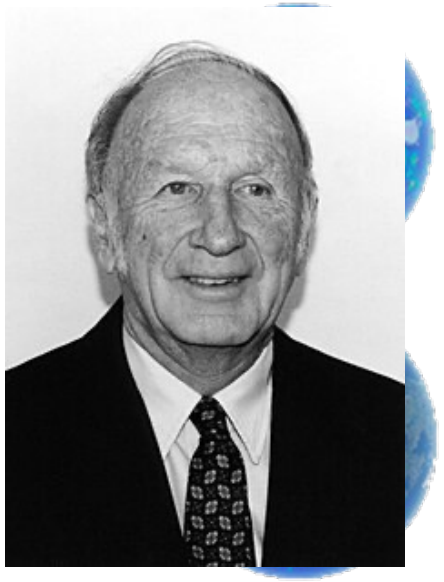
守恒律方程

演化方程: $x_{n+1} = \mathcal{F}(x_n) + \omega_{n+1}$

观测方程: $y_{n+1} = \mathcal{H}(x_{n+1}) + \eta_{n+1}$

气象站收集
的数据

局部平均算
子、局部取
值算子等



Lorenz,1963

数据同化

- 应用：股市预测

包括股价、模型参数
的潜在状态

金融模型

演化方程: $x_{n+1} = \mathcal{F}(x_n) + \omega_{n+1}$

观测方程: $y_{n+1} = \mathcal{H}(x_{n+1}) + \eta_{n+1}$

股票价格

计算股价

数据同化

- 基本理论
  - 贝叶斯滤波 (filter)和平滑 (smooth)问题的适定性
  - 线性数据同化问题 (显式解)

- 算法以及相关理论
  - 卡尔曼滤波 (Kalman filter)
  - 卡尔曼平滑 (Kalman smoother)
  - 粒子滤波 (Particle filter)

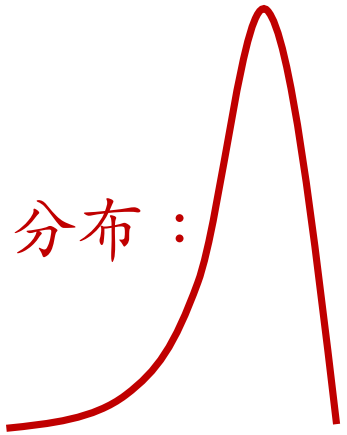
Kálmán,1960

扩散模型

- 抽象的数学形式

数据：$\{\theta_i\}$

分布：



生成新的数据：$\{\theta_i'\}$

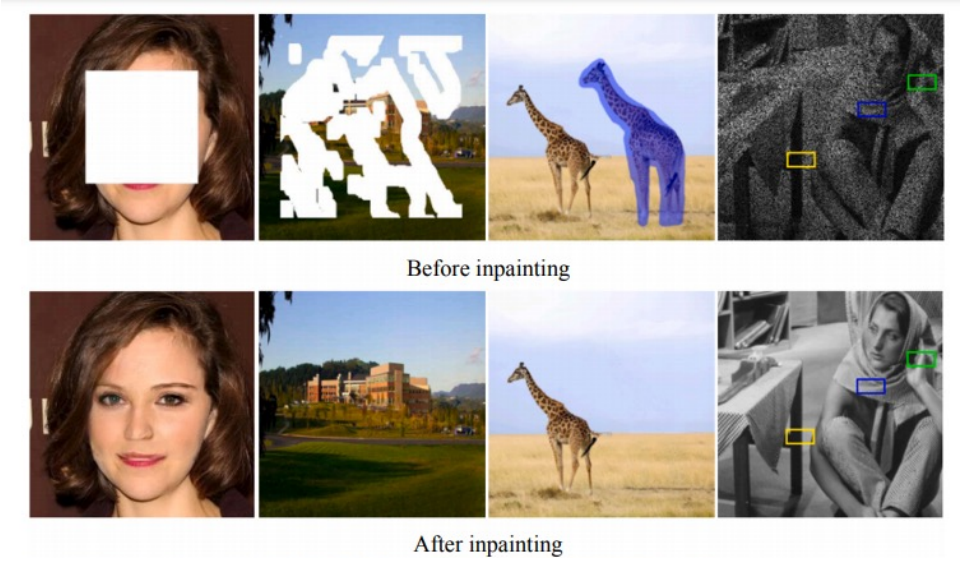
没有显式物理模型！

扩散模型

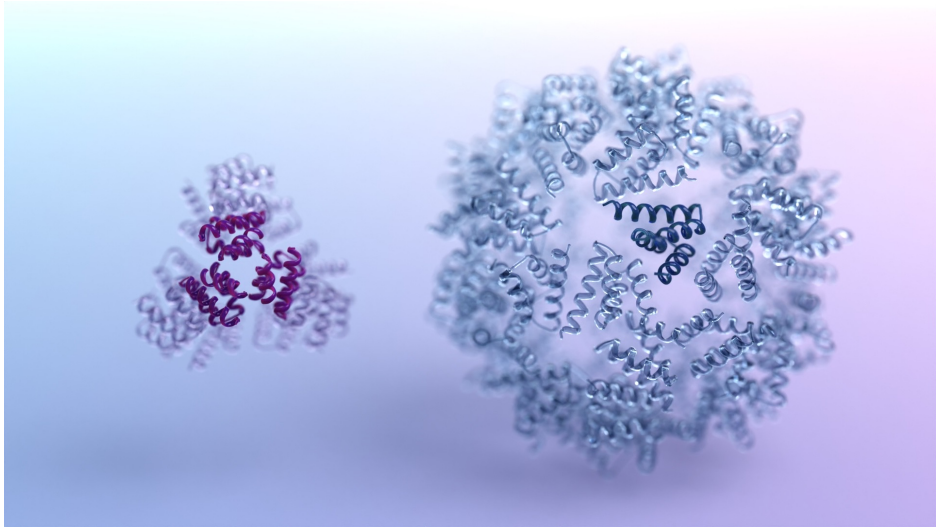
- 应用：视频、音乐生成

扩散模型

- 应用：条件生成（反问题）



图像修复



蛋白质设计

扩散模型

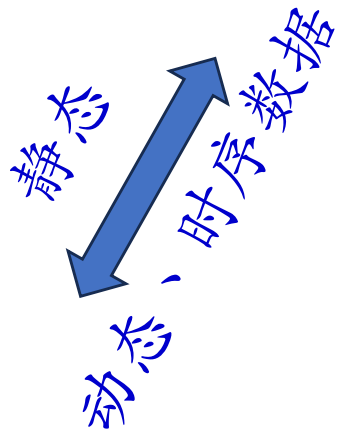
- 基本理论
  - 扩散过程

- 算法以及相关理论
  - 分数估计
  - 神经网络 UNet
  - 基于扩散过程的生成模型

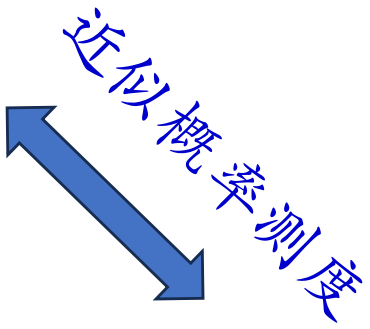
课程简介

- 课程内容简介

贝叶斯反问题
(Bayesian inverse problems)



概率论
随机过程
泛函分析



数据同化
(Data assimilation)

时序问题

扩散模型
(Diffusion model)

用观测数据更新我们对未知量的概率认识，
并量化不确定性。

反问题与数据同化

- 练习

考虑如下统计模型(比如神经网络)

$$y = f(x, \theta)$$

我们有数据$(x_i, y_i)\ i = 1,2, \cdots N$，但是$y_i$的误差是$\mathcal{N}(0, \sigma^2)$。

如何用反问题或者数据同化的方法，来更好预测新的x对应的y?

反问题与数据同化

➢ 练习

考虑如下常微分方程描述的系统

$$\frac{\mathrm{d}x}{dt} = f(x,u) \qquad x \in R^{N_x}$$

我们知道函数 $f(\cdot,\ \cdot)$, 以及在时刻 $t_i = i$ $(i = 1,2,\cdots,N)$ 的观测 $x[i \bmod N_x]$，即x向量的某个分量的信息，观测误差是$\mathcal{N}(0,\sigma^2)$。

如何用反问题或者数据同化的方法，来更好预测时间 t_N后的系统状态 x ？

课程要求

- 作业 （50%）
  - 两次作业各占 25%
  - 每次作业有理论推导和上机练习

- 期末报告（50%）
  - 选一篇相关文章阅读、重复数值实验、报告
  - 或做相关科研并报告
  - 1-3人一组

课程要求

- 课堂
  - 会有（上机）练习
  - 积极讨论

```
julia> a = [1. 2; 3 5]
2×2 Matrix{Float64}:
 1.0  2.0
 3.0  5.0

julia> b = [1.; 2]
2-element Vector{Float64}:
 1.0
 2.0

julia> a\b
2-element Vector{Float64}:
 -0.9999999999999999
  0.9999999999999999
```

- 关于上机
  - Python3 （使用Anaconda管理）
    https://www.anaconda.com/download#Downloads)
  - Julia
    https://julialang.org/downloads/

```
>>> a = np.array([[1, 2], [3, 5]])
>>> b = np.array([1, 2])
>>> x = np.linalg.solve(a, b)
>>> x
array([-1.,  1.])
```

课程要求

- 课件

http://faculty.bicmr.pku.edu.cn/~huangdz/teaching.html