

1. 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 $(x_i, y_i) \quad i = 1, 2, \dots, N$ 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 ?

反问题方法

当我们同时使用所用数据

$$y = [y_1, y_2, \dots, y_N] \quad \mathcal{G}(\theta) = [f(x_1, \theta), f(x_2, \theta), \dots, f(x_N, \theta)] \quad \eta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$$

数据同化方法

数据是在线接受的

$$\begin{aligned} \theta &= \theta & \mathcal{F} &= \text{identity} \\ y &= f(x, \theta) + \eta & \eta &\sim \mathcal{N}(0, \sigma^2) & \mathcal{H}(\theta) &= f(x, \theta) \end{aligned}$$

2. 练习

考虑如下常微分方程描述的系统

$$\frac{dx}{dt} = f(x, u) \quad x \in \mathbb{R}^{N_x}$$

我们知道函数 $f(\cdot, \cdot)$, 以及在时刻 $t_i = i (i = 1, 2, \dots, N)$ 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 ?

反问题方法

假设我们在时刻 t_i 的观测是 y_i , 我们的反问题需要同时反演参数 u 和初始状态 x_0

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

其中 $y = [y_1, y_2, \dots, y_T]$, $\theta = [x_0; u]$, 噪音满足 $\eta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$ 。给定 θ , 我们可以求解常微分方程, 假设解是 $x(t)$, 我们的模型 \mathcal{G} 是常微分方程求解器, 我们需要求解 $t \in [0, t_N]$:

$$\mathcal{G}(\theta) = \left[x(t_1)[1 \bmod N_x], x(t_2)[2 \bmod N_x] \cdots x(t_N)[N \bmod N_x] \right]$$

给定先验分布, 求解了反问题后, 我们就有参数 u 和初始状态 x_0 的估计, 可以更好预测时间 t_N 后的系统状态 x 。

数据同化方法

假设我们在时刻 t_i 的观测是 y_i , 根据参数 u 和初始状态 x_0 的先验分布, 生成参数 $u(0)$ 和初始状态 $x(0)$, 用数据同化方法同时修正 参数 u_t 和状态 x_t :

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x(t_{n+1}) \\ u(t_{n+1}) \end{bmatrix} &= \mathcal{F} \left(\begin{bmatrix} x(t_n) \\ u(t_n) \end{bmatrix} \right) \\ y_{n+1} &= \mathcal{G}_{n+1} \left(\begin{bmatrix} x(t_{n+1}) \\ u(t_{n+1}) \end{bmatrix} \right) + \eta \end{aligned}$$

其中 $n = 0, 1, \dots, N - 1$, 观测噪声满足 $\eta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ 。对于预测步: 给定 $x(t_n)$ 和 $u(t_n)$, 我们的演化算子 \mathcal{F} 用 $x(t_n)$ 作为当前状态, $u(t_n)$ 作为参数, 求解常微分方程, 得到 t_{n+1} 时刻的解 $x(t_{n+1})$, $u(t_{n+1}) = u(t_n)$ 保持不变。对于分析步: 我们的观测算子 \mathcal{G}_{n+1} 从 $\begin{bmatrix} x(t_{n+1}) \\ u(t_{n+1}) \end{bmatrix}$ 得到第 $n + 1 \bmod N_x$ 维的分量信息。

在时刻 t_N 时, 我们就有参数 $u := u(t_N)$ 和状态 $x(t_N)$ 的估计, 可以更好预测时间 t_N 后的系统状态 x 。

思考

上述算法中的观测算子 \mathcal{G} 和演化算子 \mathcal{F} 都是假设我们能精确求解常微分方程。而现实中, 我们通常会进行时间离散, 比如采用向前欧拉方法求解这个系统,

$$x_{n+1} = x_n + \delta f(x_n, u)$$

其中时间步长是 δ , 因此我们需要把反问题方法中的观测算子 \mathcal{G} 替换为对应的离散后的算子 \mathcal{G}_δ , 数据同化的演化算子 \mathcal{F} 替换为对应的离散后的算子 \mathcal{F}_δ , 这会引入一些误差, 稍微改变我们的问题。