不确定性量化及典型反问题：二氧化碳的捕获及存贮

Marco Iglesias Andrew M. Stuart

反问题求解中不确定性量化的问题在数学科学中是一个令人兴奋的研究领域，在分析，计算，概率论和统计学的交汇领域中提出了意义重大的挑战．就来自诸如天气预报，流行病学以及交通流等物理学，生物学和社会科学中的的各种不同的问题而言，不确定性量化的可应用范围是极其巨大的．

粗略地说，反问题要面对的是带有数据的数学模型，因此我们可以推演出为运行此类模型所需要的输入；然后可将有关这些输入的知识用于做预测，甚至设计基于此等预测的控制策略．模型和数据二者通常都是不确定的，作为结果的推演和预测也都是不确定的；因此，如果不确定性得到量化，那么基于此等预测作出的任何决策或控制策略将会得到极大的改善．

1. 反问题的 Bayes (贝叶斯)[1] 方法

一个实验的数学模型是联系输入 u 和输出 y 的一组方程．输入表示可在实验发生之前加以校准的物理变量；输出则表示作为试验结果的可测定的量．对于正问题 (*forward problem*), 数学模型 G 用于对给定的输入 u 预测实验的输出 y. 对于反问题 (*inverse problem*), 数学模型则是用来作出对将会生成给定测量得到的输出 y 的输入 u 的推断 [6, 11]; 实际中，很多反问题的提法在 Hadamard (阿达马) 意义下是 不适定 的；他们至少不满足适定性准则 —— 存在性，唯一性和解对数据的连续依赖性中的一个．当测得的数据杂有噪声以及 / 或当数学模型不完善时，将作为反问题解的一部分的任何推断和预测中所固有的不确定性加以量化就是重要的．反问题的 Bayes 方法使我们可以有原则的方式来承担这一任务．当适当使用此方法时，可以同时正则化反问题的不适定性．

在 Bayes 方法中，认为 (u, y) 是随机变量，反问题的解则是随机变量 u 在给定 y 时的条件概率分布，记为 $\mathbb{P}(u|y)$ (原文中误为 $u|y$—— 译注)．这一条件概率分布的公式由 *Bayes* 规则 给出，即

译自：SIAM News, Vol. 47 (2014), No. 6, UQ and a Model Inverse Problem: CO_2 Capture/Storage, Marco Iglesias, Andrew M. Stuart, figure number 3.

Marco Iglesias 是英国 Nottingham 大学数学学院的助理教授，Andrew Stuart 是英国 Warwick 大学数学研究所的数学教授.

本文是部分基于 Stuart 在美国乔治亚州 Savannah 举行的 2014 美国工业与应用数学学会不确定性量化会议 (2014 SIAM Conference on Uncertainty Quantification) 上的讲演写成的.

1) Thomas Bayes, 1702–1761 年，英国统计学家，哲学家和长老会牧师，1742 年成为英国皇家学会会员．Bayes 以其在概率论领域的研究闻名于世，他提出的 Bayes 定理对于现代概率论和数理统计的发展有重要的影响.—— 校注

$$\mathbb{P}(u|y) \propto \mathbb{P}(y|u)\mathbb{P}(u).$$

其文字叙述为：*后验的* 概率分布 $\mathbb{P}(u|y)$, 即在给定数据 y 后，关于未知的 u 我们所知道的知识，它正比于 *似然* $\mathbb{P}(y|u)$ 乘以先验的 $\mathbb{P}(u)$, 该似然是对于给定的输入 u, 出现所观测到的 y 的可能程度的度量，$\mathbb{P}(u)$ 则描述了我们在得到数据之前关于未知量的知识．下面我们描述一个具体应用的例子，读者不妨记住这个例子来重温我们非常重要的数学陈述．

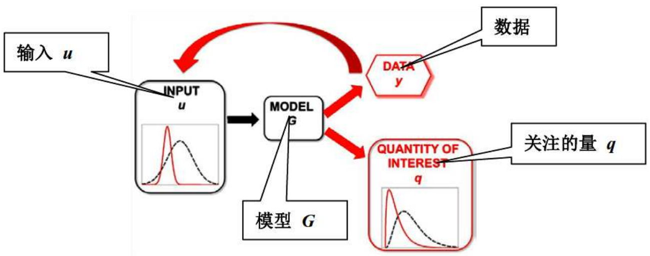

图 1　Bayes 反演中的不确定性量化

Bayes 规则及其应用概略地图示于图 1 中．*先验* 分布用黑色虚线表示于 *输入框* 中，连同规定其似然的 *模型* G; 而数据 y 用于获得 *后验* 分布，以红色实线表示在 *输入框* 中．

概率分布从先验到后验的这一更新为我们做了什么？我们的答案就在 *关注的量* q 中不确定性的预测中：不用数据 (仅考虑 *先验*), 我们作出以黑色虚线表示的预测；若用数据 (得到 *后验*), 我们可以作出以红色实线表示的更精细的预测．

注意所有的预测都带有不确定性．此外，在这一图解中，反问题的 Bayes 方法 —— 如在关注的量后验概率分布的展开范围中所表明的 —— 降低了不确定性，反映了从数据获得的额外的信息．读者马上可以看到这一不确定性的降低在任何应用 —— 包括前面提到的天气预报，流行病学和交通流的例子，以及在日益增长的大量可使用定量模型和噪声数据的应用领域的例子 —— 中的好处．

2．实际问题：CO_2 的捕捉和存贮

那么对应用数学提出的挑战是什么呢？为了获得对出现挑战的问题的某些深入洞察，我们考虑通过碳的捕捉和存贮来推动缓解全球温室效应的问题 [3]．例如，假设我们感兴趣的是评估把 CO_2 注入地下的经济可行性和对环境影响的问题．一种典型的 CO_2 存贮地点应该是枯竭的油气田或很深的含盐蓄水层 (图 2)．这时的数学模型由描述把 CO_2 注入地下部分的热柱的偏微分方程组构成．

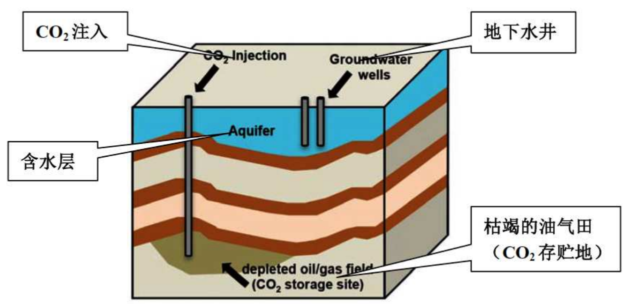

图 2　CO_2 的地下存贮

模型的重要输入是存贮地点的渗透性和其他的地质特性，诸如断层和裂缝的存在等．自然的输出包括来自注入井的底孔压力的测量结果，以及，可能的话，来自卫星数据和 GPS 设备的地表变形的测量结果．由于地表下面不是直接可观察的，因此从测量结果 (输出) 来推断其特性 (输入) 的问题就特别重要了：有准确的推断，就可以在种种关注的量

的基础上作出决策，这些量涉及到存贮地点的安全性和财务可行性等；例如，人们希望评估 CO_2 泄漏导致的潜在的地下水污染的风险.

当我们考虑在看似简单实则不然的 Bayes 定律中隐藏着什么时，这一应用中固有的挑战就变得明显了. 在本例中，似然本身是通过正问题模型 —— 描述多孔介质中多相流物理性质的一组守恒律 (偏微分方程组)—— 的解来定义的. 渗透性的输入空间上的概率分布是在一个函数空间上的概率分布；实际上，这意味着我们将在非常高维的空间上表述概率. 于是，为深入探究后验概率分布，我们需要承受在一个巨大的输入渗透性空间上求解复杂的偏微分方程组的挑战. 类似的吓人挑战出现在大量的应用中. 虽然如此，人们在过去的 10 年里已经看到关于反问题的 Bayes 方法的相当大的进步，专著 [10] 在建立用当今的计算机可以运作的该方法方面起到了重要作用.

因为我们的课题在应用数目的增长以及在方法论可及的范围方面还处在它的初创期，所以在相当长时间里挑战依然会存在. 一个非常特定应用的问题的关键建模涉及未知量的先验选择. 关键的计算问题涉及以充分的准确度深入探究后验概率分布的方式，这准确度就是我们能够计算关于关注的量的后验概率分布的准确度. 此外，这些建模和计算问题是交互作用的.

这一课题需要应用数学家的持续投入，他们能有助于通过分析算法的复杂性并通过计算方法的创新来指导算法的研制. 这项工作需要在多种特定应用的先验模型的情境下来完成. 这一领域上的成功需要具备对分析 (例如，基于偏微分方程的正问题模型), 计算 (例如，高维积分), 概率论 (例如，指定随机场的先验概率) 和统计学 (例如，为探究后验概率的算法设计时要开发的数据) 的鉴赏能力. 在每种情况下，研究工作都需要得到特定应用的建模考虑的指引.

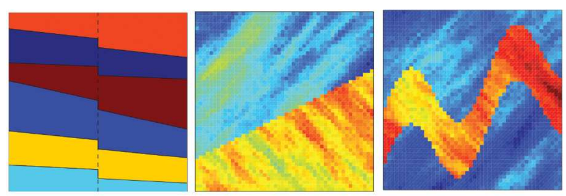

图 3　取自不同渗透性的先验假设：有缺陷的分块常数模型 (左), 分块连续层模型 (中), 分块连续通道模型 (右)

回到 CO_2 存贮的例子，我们考虑对地下渗透性先验地表述为如图 3 左图和中间图所示的不同的 “典型性” 函数. 在左图中渗透性是分块常数的，其未知参数确定了构成地下的不同物质层的位置，以及缺陷的位置和渗透性在各层内的值. 在中间图中，渗透性通过单个交界面的定位来确定；交界上下的显著变化用一函数表示，且此函数不一定是单值的. 这两种 “典型的” 不同渗透性的先验模型将是十分不同的，并将导致不同的计算考虑；而且如果缺少先验知识，此先验模型或许需要合并两种渗透性成另一种 “典型”, 或许还需考虑诸如图 3 (右) 所示的其他类型. 这些问题数学表述的细节，以及讲述起始开发这些模型的工程文献的参考文献，可以在 [9] 中找到.

一旦明确规定了先验概率分布和正问题模型，后验概率分布就由 Bayes 规则确定，然后我们就转向探究后验概率的计算，以及计算关于它的期望值. Monte Carlo-Markov (马尔可夫) 链，或记作 MCMC, 是研究这些问题的自然的做法，而且过去 10 多年来人们已经看到在高维空间中这些方法在理论和实践上相当大的进步 [5]. 虽然如此，普通的

基于 Monte Carlo 的方法虽极为灵活，却为其 $N^{-1/2}$ 的收敛速率所牵制 [2], 这意味着计算复杂性 (每单位误差的代价) 会是相当过分的. 因此，我们有望看到反问题情况下多层 Monte Carlo 方法 [8] 和拟 Monte Carlo 方法 [2] 的发展. 此外，广义的多项式混沌方法及其相关方法的应用 [1, 4, 7, 12], 如在 [13] 中举例说明的那样，很可能转移到反问题的研讨中; 还有，这些方法有可能改进 Monte Carlo 方法的复杂性. 有兴趣的读者可在文 [14, 15] 及其参考文献中找到进一步的详细介绍.

在这个新兴领域，应用数学大量的研究机会是由数量巨大和类型众多的应用以及需要为之做出贡献的范围广阔的数学科学诸领域的研究工作所驱动的. 这一课题正处在一个转折点，计算能力正开始允许探究十分复杂的 Bayes 模型，且取得效果的机会很高. 概言之，对于正在寻求新的研究挑战的应用数学家来说，这是一个极好的研究领域.

致谢 本文作者非常感谢英国工程和自然科学研究委员会 (Engineering and Physical Sciences Research Council, EPSRC), 欧洲研究委员会 (European Research Council, ERC) 以及美国海军研究局 (Office of Naval Research, ONR) 为支持本文的研究提供的资助. Andraw M. Stuart 教授为 EPSRC 资助项目 EQUIP 的首席科学家：`http://www2.warwick.ac.uk/fac/sci/maths/research/grants/equip/`.

译、校者致谢 复旦大学数学科学学院的陆帅副研究员仔细审阅了我们的译文，并提出了若干很好的修改意见，正在复旦大学访问的 Andraw M. Stuart 教授也和他一起讨论了我们的译文，我们向他们表示诚挚的感谢.

参考文献

[1] I. Babuska, R. Tempone, and G. Zouraris, Galerkin finite element approximations of stochastic elliptic partial differential equations, SIAM J. Numer. Anal., 42 (2004), 800–825.

[2] R. Caflisch, Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods, Acta Numer., 7 (1998), 1–49.

[3] A. Chadwick, CCS: Between a rock and a hard place? Greenhouse Gases: Science and Technology, 2 (2011), 99–101.

[4] A. Cohen, R. DeVore, and C. Schwab, Convergence rates of best N-term Galerkin approximations for a class of elliptic sPDEs, Found. Comput. Math., 10 (2010), 615–646.

[5] S. Cotter, G. Roberts, A. M. Stuart, and D. White, MCMC methods for functions: Modifying old algorithms to make them faster, Stat. Sci., 28 (2013), 424–446.

[6] H. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer, Regularization of Inverse Problems, Kluwer, Philadelphia, 1996.

[7] R. G. Ghanem and P. D. Spanos, Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach, Springer, New York, 1991.

[8] M. Giles, Multilevel Monte Carlo path simulation, Oper. Res., 56 (2008), 607–617.

[9] M. Iglesias, K. Lin, and A. M. Stuart, Well-posed Bayesian geometric inverse problems arising in subsurface flow, arxiv.org/abs/1401.5571, to appear in Inverse Problems, special issue on Bayesian inversion, 2014.

[10] J. Kaipio and E. Somersalo, Statistical and Computational Inverse Problems, 160, Applied Mathematical Sciences, Springer-Verlag, New York, 2005.

[11] J. B. Keller, Inverse problems, Amer. Math. Monthly, 83 (1976), 107–118.

[12] C. Schwab and C. J. Gittelson, Sparse tensor discretizations of high-dimensional parametric and stochastic PDEs, Acta Numer., 20 (2011), 291–467.
[13] C. Schwab and A. M. Stuart, Sparse deterministic approximation of Bayesian inverse problems, Inverse Problems, 28 (2012); arxiv.org/abs/1103.4522.
[14] A. M. Stuart, Inverse problems: A Bayesian perspective, Acta Numer., 19 (2010), 451–559.
[15] A. M. Stuart, Inverse Problems and Uncertainty Quantification, invited lecture, ICM 2014, Seoul; http://homepages.warwick.ac.uk/~masdr/TALKS/stuart_SIAMUQ.pdf.

(刘宝光 译　　叶其孝 校)

****

(上接 81 页)

参考文献

[1] L. E. J. Brouwer, Leven, Kunst en Mystiek, J. Waltman Jr., Delft, 1905. English translation with an introduction by W. P. van Stigt in Notre Dame Journal of Formal Logic 37(3) (1996), 381–429.
[2] ——, Collected Works, Volume 1: Philosophy and Foundations of Mathematics, A. Heyting, editor, North-Holland, Amsterdam, 1975.
[3] ——, Collected Works, Volume 2: Geometry, Analysis, Topology and Mechanics, H. Freudenthal, editor, North-Holland, Amsterdam, 1976.
[4] J. Dauben, Georg Cantor: His Mathematics and Philosophy of the Infinite, Harvard, Cambridge, MA, 1979.
[5] H.-D. Ebbinghaus with V. Peckhaus, Ernst Zermelo: An Approach to His Life and Work, Springer, Berlin, 2007.
[6] M. Georgiadou, Constantin Carathéodory: Mathematics and Politics in Turbulent Times, Springer, Berlin, 2004.
[7] J. Gray, Henri Poincaré: A Scientific Biography, Princeton Univ. Press, Princeton, NJ, 2013.
[8] C. Reid, Hilbert, George Allen & Unwin, London, Springer, Berlin, 1970. See also the extensive publication of Hilbert's lectures and algebraic number theory being published by Springer.
[9] A. S. Troelstra and D. van Dalen, Constructivism in Mathematics: An Introduction, 2 volumes, Elsevier, Amsterdam, 1988.
[10] D. van Dalen, Mystic, Geometer, and Intuitionist: The Life of L. E. J. Brouwer, Volume 1: The Dawning Revolution, Oxford Univ. Press, Oxford, 1999; Volume 2: Hope and Disillusion, Oxford Univ. Press, Oxford, 2005.
[11] ——, The Selected Correspondence of L. E. J. Brouwer, Springer, London, 2011; in English, with extra material available online at Springer.
[12] ——, Logic and Structure, 5th edition, Springer, Berlin, 2013.
[13] W. van Stigt, The rejected parts of Brouwer's dissertation on the foundations of mathematics, Historia Mathematica 6 (1979), 385–404.
[14] F. Verhulst, Henri Poincaré: Impatient Genius, Springer, New York, 2012.
[15] H. Weyl, Das Kontinuum: Kritische Untersuchungen über die Grundlagen der Analysis, Berlin, Veit, 1918. English translation, The Continuum: A Critical Examination of the Foundations of Analysis, Dover, New York, 1994.
[16] ——, Gesammelte Abhandlungen, 4 volumes, Springer, Berlin, 1968.

(袁向东 译　　冯绪宁 校)