

Обратная задача аномальной диффузии: нейросетевой подход

Дедок В.А.

Институт математики СО РАН, Новосибирск, Россия

18 октября 2018

Основные публикации по теме

- Нейросетевой подход к решению обратных задач теории аномальной диффузии // А. Н. Бондаренко, Т. В. Бугуева, В. А. Дедок. Сиб. журн. индустр. матем., 2016, том 19, номер 3, страницы 3–14.
- Neural network solution of the inverse anomalous diffusion problem // 2017 Siberian Symposium on Data Science and Engineering (SSDSE) 2017, Page(s): 93 - 98.

Задача аномальной диффузии

В пионерских работах Нигматуллина было выяснено, что замена производной по времени в уравнении диффузии на оператор дробного дифференцирования может описывать эффекты памяти. Особенностью таких процессов является отклонение среднеквадратичного отклонения от классической гауссовской (соответствующей закону $\langle x^2(t) \rangle \sim K_1 t$) диффузии:

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{2K_\alpha}{\Gamma(1 + \alpha)} t^\alpha.$$

Дробные производные Римана-Лиувилля и Капуто

Дробной производной Капуто порядка α функции $f(x)$ называется выражение

$$D_{a+}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_a^x \frac{f'(\xi)}{(\xi-x)^{\alpha}} d\xi. \quad (1)$$

Дробной производной Римана – Лиувилля порядка α функции $f(x)$ называется выражение

$$D_{a+}^{\alpha} f(x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{d}{dx} \int_a^x \frac{f(\xi)}{(\xi-x)^{\alpha}} d\xi, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (2)$$

Уравнение аномальной диффузии (УАД)

$$D_{a+}^{\alpha} u(x, t) = \lambda \Delta u(x, t) \quad (3)$$

Обратная задача аномальной диффузии

Восстановление параметров α и λ задачи с периодическим источником без граничных условий:

$${}_t D_+^{2\alpha} u(x, t) = \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t), \quad \lambda > 0, x \geq 0, -\infty < t < \infty, 0 < 2\alpha < 1,$$
$$u(0, t) = Ae^{i\omega t}, \quad \omega \in \mathbb{R}^+,$$

где оператор ${}_t D_+^{2\alpha}$ представляет собой дробную производную Римана – Лиувилля.

В работе Иващенко Д.С. впервые определялся порядок α дифференцирования по переменной t (экспонента Херста). Эта задача позже рассматривалась Yamamoto M. с соавторами, в одномерном случае была доказана единственность.

Обратная задача аномальной диффузии

Cheng J., Nakagawa J., Yamamoto M. and Yamazaki T.

рассматривали обратную задачу по восстановлению порядка дифференцирования α и коэффициента диффузии $p(x)$ уравнения

$${}_t D_{0+}^{\alpha} u(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left(p(x) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right), \quad 0 < x < l, \quad 0 < t < T,$$

$$u(x, t) = \delta(x),$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(l, t), \quad 0 < t < T,$$

используя данные на границе $u(0, t)$, $0 < t \leq T$.

Краевая задача УАД

$$\Omega = \{(x, t) : 0 \leq x \leq 1, t \geq 0\}.$$

В данной области рассмотрим краевую задачу для одномерного уравнения диффузии дробного порядка по времени:

$$\begin{aligned} {}_t\mathcal{D}_{0+}^{\alpha} u &= \lambda^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u, & 0 < \alpha \leq 1, & \quad 0 < \lambda \leq 1, \\ u(x, 0) &= u_0(x), & 0 \leq x \leq 1, & \\ u(0, t) &= u(1, t) = 0, & t > 0. & \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $u = u(x, t)$, $|u(x, t)| < M$ для некоторой константы M , $u_0 \in C([0, 1])$, ${}_t\mathcal{D}_{0+}^{\alpha}$ – оператор дробного дифференцирования Капуто порядка α .

Обратная задача УАД

Выберем некоторую точку $x_0 \in (0, 1)$. Ограничим время наблюдения данных о концентрации вещества значением $0 \leq t \leq 1$. Выберем число N – число измерений данных о концентрации вещества. Измерим данные о концентрации вещества $\tilde{u}_i = u(x_0, t_i)$ в моменты времени $t_i = i/N$, $i = 0, 1, \dots, N$. Известно, что функция $u(x, t)$ удовлетворяет задаче (4) с некоторыми параметрами α и λ . Нашей целью является определение неизвестных параметров α и/или λ по заданным значениям \tilde{u}_i .

Что ищем?

Обратные задачи аномальной диффузии

	Известные данные	Искомые данные
Обратная задача 1	$x_0, \tilde{u}_i, i = 0, 1, \dots, N$	α, λ
Обратная задача 2	$x_0, \tilde{u}_i, i = 0, 1, \dots, N$	α
Обратная задача 3	$x_0, \lambda, \tilde{u}_i, i = 0, 1, \dots, N$	α

Расширенные постановки обратных задач аномальной диффузии

	Известные данные	Искомые данные
Обратная задача 4	$\tilde{u}_i, i = 0, 1, \dots, N$	α, λ
Обратная задача 5	$\tilde{u}_i, i = 0, 1, \dots, N$	α
Обратная задача 6	$\lambda, \tilde{u}_i, i = 0, 1, \dots, N$	α

Искусственный нейрон

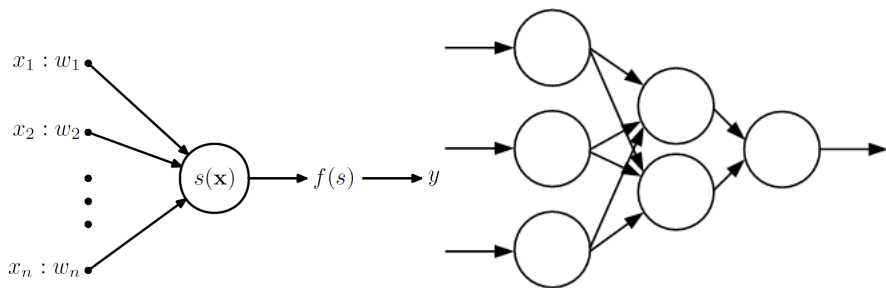
Искусственным нейроном называется единица обработки информации в *нейронной сети*, задаваемая следующим набором:

- совокупность входов x_i , $i = 1, 2, \dots, n$;
- веса входов w_i , $i = 1, 2, \dots, n$;
- функция состояния $s(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$;
- функция активации $f(s)$;
- выход нейрона y .

Выход нейрона y связан с входами x_1, \dots, x_n следующим соотношением:

$$y = f(s(\mathbf{x})), \quad \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n).$$

Искусственный нейрон и нейронная сеть (персептрон)



Решение обратной задачи УАД. Свойства персептрона

- *входные данные:*
 $(x_0, \lambda, \tilde{u}_0, \tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N)$ – $(N + 3)$ -компонентный вектор, или
 $(x_0, \tilde{u}_0, \tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N)$ – $(N + 2)$ -компонентный вектор, или
 $(\tilde{u}_0, \tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N)$ – $(N + 1)$ -компонентный вектор;
- *выходные значения:* пара (α, λ) или α .

Здесь x_0 – «координата наблюдения» функции концентрации, удовлетворяющей задаче (4) со значениями α , λ и $u_0(x)$,
 $\tilde{u}_i = u(x_0, t_i)$, $t_i = i/N$.

$$s(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n x_i w_i, \quad f(s) = \frac{s}{c + |s|}, \quad N = 2 \cdot 10^k$$

Количество нейронов

Тип нейронной сети	Слой 1	Слой 2	Слой 3
Нейронная сеть 1	$N + 2$	$N/2$	$N/4$
Нейронная сеть 2	$N + 2$	$N/2$	$N/4$
Нейронная сеть 3	$N + 3$	$N/2$	$N/4$
Нейронная сеть 4	$N + 1$	$N/2$	$N/4$
Нейронная сеть 5	$N + 1$	$N/2$	$N/4$
Нейронная сеть 6	$N + 2$	$N/2$	$N/4$

Подготовка данных для обучения

$$u(x, t) = X(x)T(t)$$

$$u_n(x, t) = X_n(x)T_n(t) = C_n E_\alpha(-\pi^2 n^2 \lambda^2 t^\alpha) \sin(\pi n x)$$

являются частными решениями задачи (4). Здесь $E_\alpha(z)$ – функция Миттаг-Леффлера:

$$E_\alpha(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + 1)}, \quad \alpha > 0.$$

Решение (4) представим в виде ряда:

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n E_\alpha(-\pi^2 n^2 \lambda^2 t^\alpha) \sin(\pi n x)$$

Обучение нейронной сети

Считалось, что нейронная сеть правильно распознает исходный пример, если отклонение прогноза от истинного значения составляет не более 0.1 (т.е. 10% от максимального значения параметров α и λ).

Множества для обучения:

- "Исходное" + "Тестовое"
- "Исходное + 5% шум" + "Тестовое + 5% шум"

Количество примеров. $N = 20$: 1000 обучающее, 500 – тестовое,
 $N = 40$: 3000 обучающее, 1000 – тестовое.

α и λ выбирались случайным образом с равномерным распределением в интервале (0, 1).

Результат обучения. "Исходное" + "Исходное + шум"

Сеть 1	Правильно	67.60 %	35.50 %	67.60 %	35.50 %
	Неправильно	32.40 %	64.50 %	32.40 %	64.50 %
	Ср. ошибка	0.0787	0.1433	0.0828	0.1442
	Макс. ошибка	0.3673	0.5029	0.9694	0.5045
	Дисперсия ошибки	0.0031	0.0088	0.0047	0.0089
Сеть 2	Правильно	86.00 %		82.40 %	
	Неправильно	14.00 %		17.60 %	
	Ср. ошибка	0.0604		0.0641	
	Макс. ошибка	0.3622		0.4495	
	Дисперсия ошибки	0.0020		0.0028	
Сеть 3	Правильно	88.70 %		82.40 %	
	Неправильно	11.30 %		17.60 %	
	Ср. ошибка	0.0583		0.0634	
	Макс. ошибка	0.2045		0.8540	
	Дисперсия ошибки	0.0013		0.0029	

Результат обучения. "Исходное" + "Исходное + шум"

Сеть 4	Правильно	77.10 %	39.50 %	75.80 %	38.60 %
	Неправильно	22.90 %	60.50 %	24.20 %	61.40 %
	Ср. ошибка	0.0671	0.1449	0.0712	0.1466
	Макс. ошибка	0.3594	0.5603	0.7292	0.5605
	Дисперсия ошибки	0.0025	0.0103	0.0036	0.0104
Сеть 5	Правильно	88.50 %		84.20 %	
	Неправильно	11.50 %		15.80 %	
	Ср. ошибка	0.0574		0.0651	
	Макс. ошибка	0.3233		1.4295	
	Дисперсия ошибки	0.016		0.0057	
Сеть 6	Правильно	80.60 %		79.00 %	
	Неправильно	19.40 %		21.00 %	
	Ср. ошибка	0.0631		0.0683	
	Макс. ошибка	0.2647		0.8166	
	Дисперсия ошибки	0.0018		0.0037	

Результат обучения. "Тестовое" + "Тестовое + шум"

Сеть 1	Правильно	65.20 %	34.80 %	63.60 %	33.00 %
	Неправильно	34.80 %	65.20 %	36.40 %	67.00 %
	Ср. ошибка	0.0997	0.1682	0.1032	0.1687
	Макс. ошибка	0.7490	0.6681	0.7668	0.6675
	Дисперсия ошибки	0.0097	0.0145	0.0112	0.0143
Сеть 2	Правильно	77.60 %		76.20 %	
	Неправильно	22.40 %		23.80 %	
	Ср. ошибка	0.0789		0.0843	
	Макс. ошибка	0.8874		0.7064	
	Дисперсия ошибки	0.0068		0.0092	
Сеть 3	Правильно	73.80 %		71.00 %	
	Неправильно	26.20 %		29.00 %	
	Ср. ошибка	0.0895		0.0939	
	Макс. ошибка	0.9298		0.9716	
	Дисперсия ошибки	0,0102		0.0118	

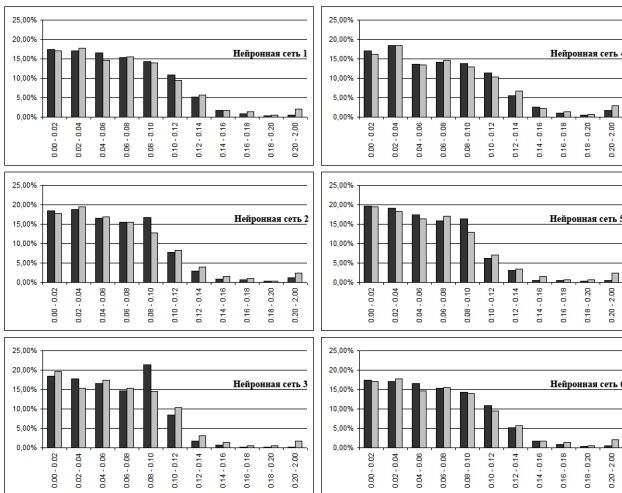
Результат обучения. "Тестовое" + "Тестовое + шум"

Сеть 4	Правильно	75.00 %	38.40 %	75.00 %	39.20 %
	Неправильно	25.00 %	61.60 %	25.00 %	60.80 %
	Ср. ошибка	0.0756	0.1626	0.0782	0.1625
	Макс. ошибка	0.6543	0.8854	0.8313	0.8898
	Дисперсия ошибки	0.0062	0.0170	0.0075	0.0165
Сеть 5	Правильно	82.80 %		80.60 %	
	Неправильно	17.20 %		19.40 %	
	Ср. ошибка	0.0688		0.078	
	Макс. ошибка	0.9258		0.9773	
	Дисперсия ошибки	0.0066		0.0111	
Сеть 6	Правильно	74.80 %		73.40 %	
	Неправильно	25.20 %		26.60 %	
	Ср. ошибка	0.0838		0.0837	
	Макс. ошибка	0.7624		0.7641	
	Дисперсия ошибки	0.0080		0.0079	

Увеличение дискретности измерений N

		$N = 20$		$N = 40$	
		α	λ	α	λ
Сеть 1	Правильно	65.20 %	34.80 %	75.67 %	44.20 %
	Неправильно	34.80 %	65.20 %	24.33 %	55.80 %
Сеть 2	Правильно	86.00 %		86.07 %	
	Неправильно	14.00 %		13.93 %	
Сеть 3	Правильно	88.70 %		81.53 %	
	Неправильно	11.30 %		18.47 %	
Сеть 4	Правильно	75.00 %	38.40 %	81.03 %	36.47 %
	Неправильно	25.00 %	61.60 %	18.97 %	63.53 %
Сеть 5	Правильно	82.80 %		85.53 %	
	Неправильно	17.20 %		14.47 %	
Сеть 6	Правильно	74.80 %		87.47 %	
	Неправильно	25.20 %		12.53 %	

Распределение ошибки восстановления параметра α



Значимость входов

$$\begin{aligned}\chi(a_k|x^p) &= \left| \frac{\partial H(x^p, a)}{\partial a_k} (a_k - a_k^0) \right|, \\ \chi(x_j|x^p) &= \left| \frac{\partial H(x^p, a)}{\partial x_j} (x_j^p - x_j^{p0}) \right|, \\ \chi(a_k) &= \sum_p \chi(a_k|x^p), \\ \chi(x_j) &= \sum_p \chi(x_j|x^p).\end{aligned}\tag{5}$$

Низкий уровень значимости у входов, соответствующих:

- x_0 ,
- $u_i, i > 2/3N$

Выводы

- Модель искусственных нейронных сетей (многослойный персептрон) показал себя достаточно эффективным для численного решения обратных задач аномальной диффузии по определению показателя дробного дифференцирования α . Средняя ошибка восстановления составляла 5 – 8%.
- Коэффициент диффузии предложенным методом на основе рассматриваемых входных данных задачи восстанавливается существенно хуже. По всей видимости, для улучшения точности определения коэффициента λ требуются дополнительные данные.

Выводы

- Метод показал себя устойчивым к шуму в начальных данных: в большинстве рассматриваемых моделей внесение шума в исходные данные обратной задачи в размере не более 5% дает 5 – 7% снижение точности распознавания и весьма незначительное увеличение средней ошибки (порядка 0.02 – 0.03).

ВЕРИФИКАЦИЯ РЕШЕНИЯ

Приглашение к совместной работе

Дедок Василий
Институт математики СО РАН
+7-903-930-07-29
e-mail: dedok@math.nsc.ru

Обратная задача аномальной диффузии: нейросетевой подход

Дедок В.А.

Институт математики СО РАН, Новосибирск, Россия

18 октября 2018