

Научная конференция НИИЯФ МГУ по итогам 2023 года

26 февраля 2024 г., online

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ

МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

ДЛЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ

ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ:

РЕЗУЛЬТАТЫ ЛАМОД 2023 ГОДА*

Исаев И.В.¹, Гуськов А.А.^{1,2}, Доленко С.А.¹

Буриков С.А.^{1,2}, Лаптинский К.А.^{1,2}, Сарманова О.Э.^{1,2}, Доленко Т.А.^{1,2},

Оборнев И.Е.^{1,2}, Оборнев Е.А.², Родионов Е.А.², Шимелевич М.И.²

¹ НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва.

² Физический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, г. Москва.

³ Российский государственный геологоразведочный университет
имени С. Орджоникидзе, г. Москва.

** Исследование выполнено за счёт гранта Российского Научного Фонда,
№ 19-11-00333.*

Введение

Обратные задачи

Обратные задачи (ОЗ) – это такой тип задач, когда параметры системы определяются из наблюдаемых данных, описывающих состояние системы.

Примеры обратных задач обработки экспериментальных данных:

- ❑ Обратные задачи спектроскопии —
определение качественного и количественного состава образца по его спектру.
- ❑ Обратные задачи разведочной геофизики (РГ) —
восстановление пространственного распределения свойств среды в толще Земли по геофизическим полям, измеренным на ее поверхности.

Введение

Обратная задача спектроскопии

Описание задачи:

Определение концентраций 8 ионов, содержащихся в многокомпонентных растворах 10 солей, по спектрам оптического и ИК поглощения и спектрам КР.

- ❑ Ионы: NO_3^- , SO_4^{2-} , Cu^{2+} , Fe^{3+} , Li^+ , NH_4^+ , Ni^{2+} , Zn^{2+}
- ❑ Соли: $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$, CuSO_4 , $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$, LiNO_3 , NH_4NO_3 , $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$,
 $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, NiSO_4 , $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$, ZnSO_4
- ❑ Каждый образец содержал от 1 до 10 солей
- ❑ Диапазон концентраций катионов: 0-1 М
- ❑ 5 серий экспериментов:
 - Растворы солей в дистиллированной воде: 3 760 образцов
 - Растворы солей в речной воде: 400 + 3 * 200 образцов

Введение

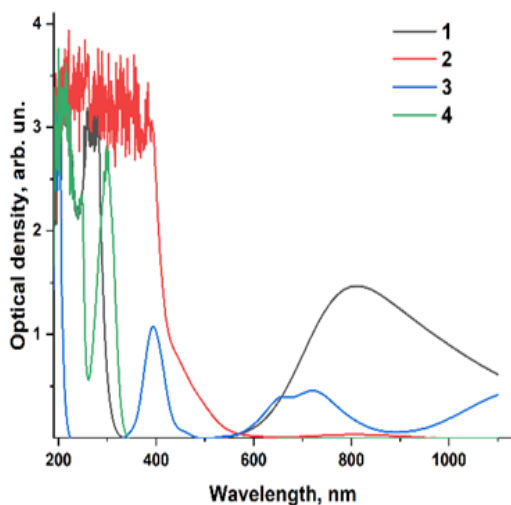
Обратная задача спектроскопии

Описание задачи:

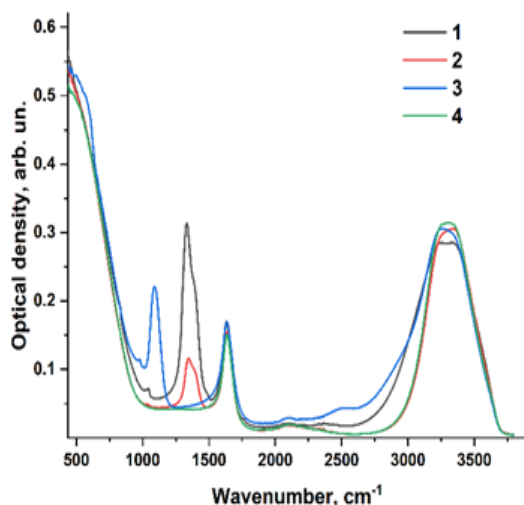
Определение концентраций 8 ионов, содержащихся в многокомпонентных растворах 10 солей, по спектрам оптического и ИК поглощения и спектрам КР.

□ Примеры спектров:

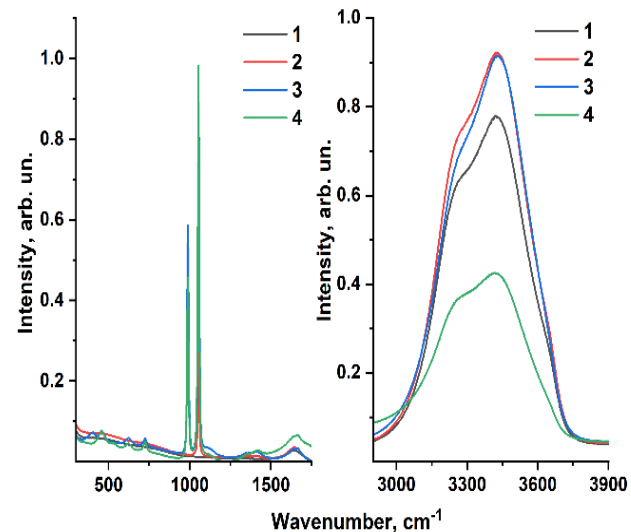
ОП



ИК



КР



Введение

Обратная задача спектроскопии

Особенности задачи:

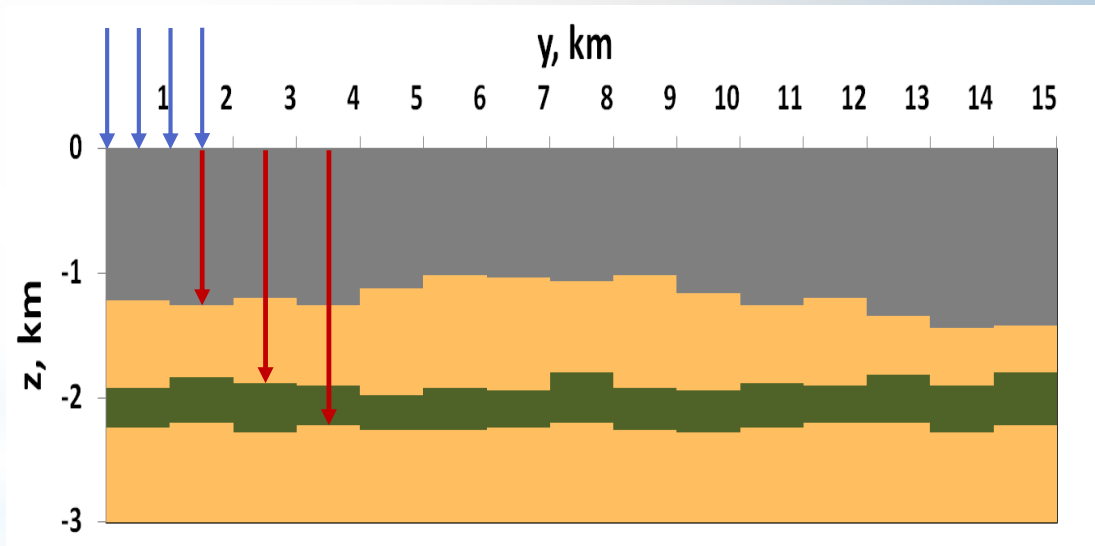
- ❑ Нелинейная (в случае многокомпонентных растворов)
- ❑ Некорректная и плохо обусловленная
- ❑ Присутствуют шумы и искажения различной природы.
- ❑ Наборы данных – 3 760 + 400 + 3 * 200 примеров
- ❑ Размерность задачи по выходу:
 - 8 параметров
- ❑ Размерность задачи по входу:
 - Спектроскопия оптического поглощения – 911 признаков
 - Спектроскопия ИК поглощения – 2 126 признаков
 - Спектроскопия КР – 2 598 признака
- ❑ Присутствуют мультиколлинеарные признаки

Введение

Обратная задача разведочной геофизики

Модель:

- Четырехслойная 2D-модель
- Рассчитываемые физические поля
 - Гравиметрия
 - Магнитометрия
 - Магнитотеллурическое зондирование (МТЗ)
- Варьируемые (определяемые) параметры
 - Глубины нижних границ слоев



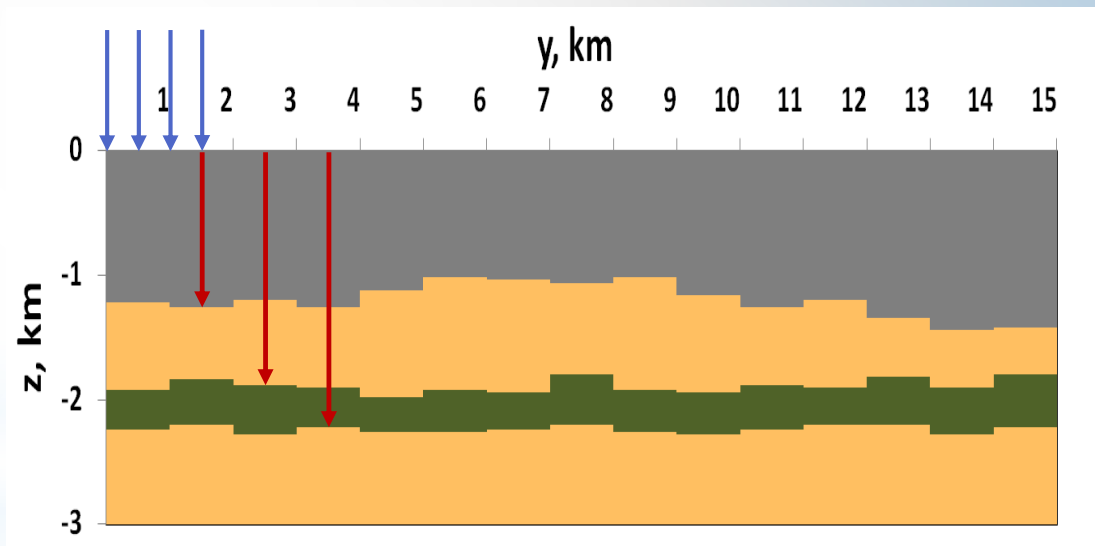
- Физические свойства слоев **фиксированные / переменные**, при этом они могут изменяться:
 - В пределах разреза
 - По всему набору данных

Введение

Обратная задача разведочной геофизики

Особенности задачи:

- Нелинейная
- Некорректная
- Отсутствует аналитическое решение ОЗ
- Есть численное решение ПЗ
- Набор данных –
3 набора по 10 000 примеров
- Размерность задачи по выходу
- 45 параметров
 - 3 слоя * 15 значений глубин границ слоев



- Размерность задачи по входу:
 - Гравиметрия, магнитометрия - 31 признак.
 - МТЗ – 2418 признаков
6 компонент поля*13 частот *31 точка измерения

Введение

Особенности обратных задач

Особенности ОЗ обработки экспериментальных данных:

- Отсутствие аналитического решения ОЗ
- Отсутствие аналитического и/или прямого численного решения ПЗ
- Нелинейность
- Некорректность
- Плохая обусловленность
- Шумы во входных данных
- Высокая входная и выходная размерность
- Мультиколлинеарность входных признаков
- Малая представительность тренировочной выборки

Использование аппроксимационных методов, в т. ч. методов машинного обучения

Введение

Особенности обратных задач

Особенности ОЗ обработки экспериментальных данных:

- Отсутствие аналитического решения ОЗ
- Отсутствие аналитического и/или прямого численного решения ПЗ
- Нелинейность
- Некорректность
- Плохая обусловленность
- Шумы во входных данных
- Высокая входная и выходная размерность
- Мультиколлинеарность входных признаков
- Малая представительность тренировочной выборки

Использование
нелинейных методов,
например,
нейронных сетей

Введение

Особенности обратных задач

Особенности ОЗ обработки экспериментальных данных:

- Отсутствие аналитического решения ОЗ
- Отсутствие аналитического и/или прямого численного решения ПЗ
- Нелинейность
- Некорректность
- Плохая обусловленность
- Шумы во входных данных
- Высокая входная и выходная размерность
- Мультиколлинеарность входных признаков
- Малая представительность тренировочной выборки

Изменение постановки задачи путем внесения дополнительной информации об объекте:

- Использование доп. инф-ции в качестве входных признаков
- сужение области определения задачи
- комплексирование данных

Введение

Особенности обратных задач

Особенности ОЗ обработки экспериментальных данных:

- Отсутствие аналитического решения ОЗ
- Отсутствие аналитического и/или прямого численного решения ПЗ
- Нелинейность
- Некорректность
- Плохая обусловленность
- Шумы во входных данных
- Высокая входная и выходная размерность
- Мультиколлинеарность входных признаков
- Малая представительность тренировочной выборки

Использование спец. подходов к повышению устойчивости решения к шумам в данных:

- обучение с шумом
- multitask learning
- и пр.

Введение

Особенности обратных задач

Особенности ОЗ обработки экспериментальных данных:

Отсутствие аналитического решения ОЗ

Отсутствие аналитического и/или прямого численного решения ПЗ

Нелинейность

Некорректность

Плохая обусловленность

Шумы во входных данных

Высокая входная и выходная размерность

Мультиколлинеарность входных признаков

Малая представительность тренировочной выборки

Отбор признаков

с учетом их

мультиколлинеарности

Введение

Особенности обратных задач

Особенности ОЗ обработки экспериментальных данных:

- Отсутствие аналитического решения ОЗ
- Отсутствие аналитического и/или прямого численного решения ПЗ
- Нелинейность
- Некорректность
- Плохая обусловленность
- Шумы во входных данных
- Высокая входная и выходная размерность
- Мультиколлинеарность входных признаков
- Малая представительность тренировочной выборки

Генерация примеров,
перенос обучения

Обратные задачи геофизики

Постановка вычислительного эксперимента

Использование априорной информации осуществлялось путем добавления значений физических свойств слоев в качестве входных признаков.

Всего – по три признака для каждого геофизического метода.

Обратные задачи геофизики

Постановка вычислительного эксперимента

При комплексировании геофизических методов на вход НС одновременно подавались данные нескольких геофизических методов.

Индивидуальное использование геофизических методов

- Гравиметрия и магнитометрия - 31 (31+3) признаков
- МТЗ – 62 (62+3) признаков

Одновременное использование данных двух геофизических методов:

- 62 (62+6) или 93 (93+6) признаков

Одновременное использование данных всех трех геофизических методов:

- 124 (124+9) признаков

Обратные задачи геофизики

Постановка вычислительного эксперимента

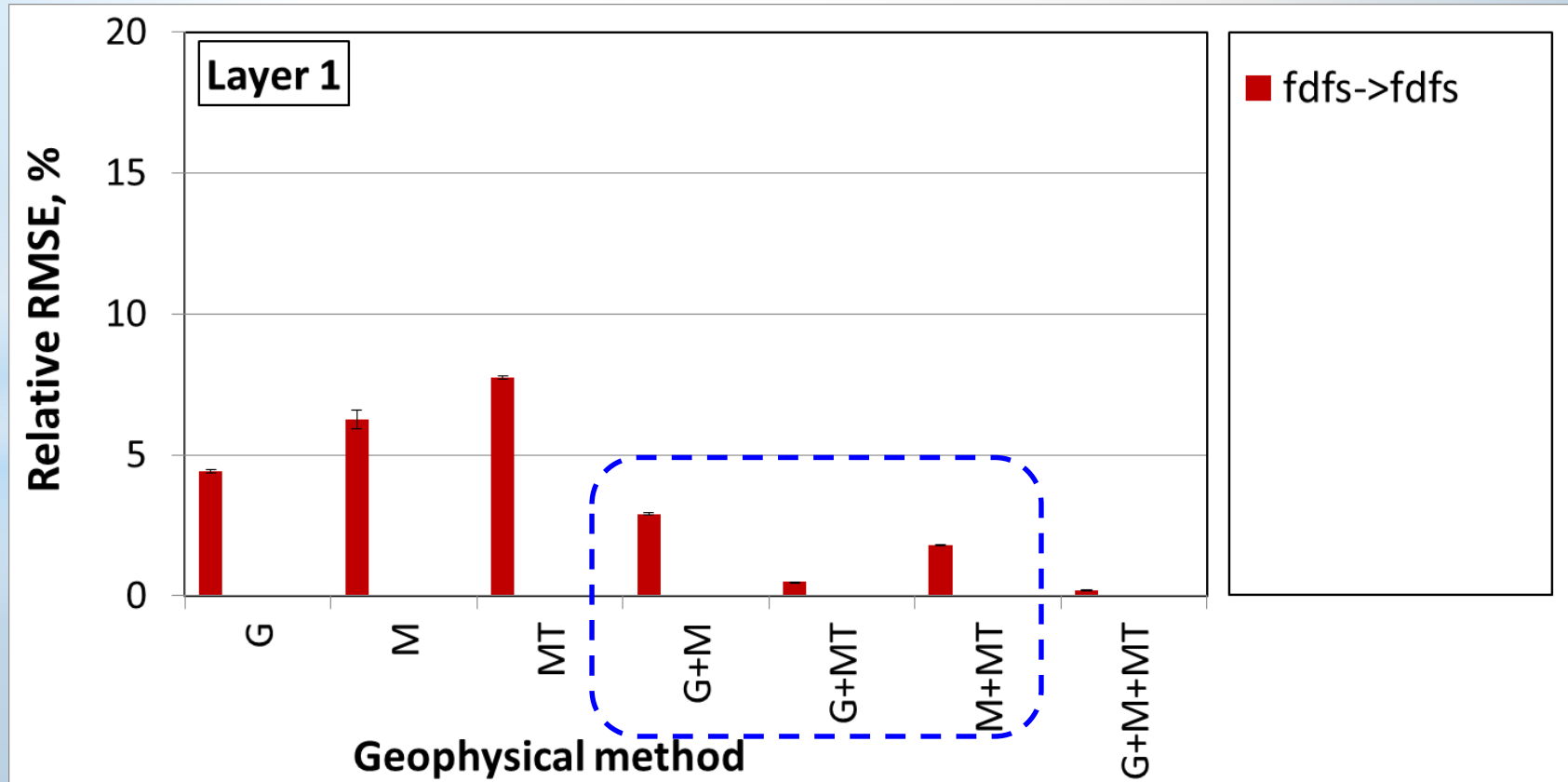
Схемы параметризации:

- Свойства слоев фиксированы и по набору, и по разрезу – **fdfs**
 - Переменные по набору, фиксированные по разрезу – **udfs**
 - Переменные свойства слоев и по набору, и по разрезу – **udus**
- Использование **априорной информации** – **ai**

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных

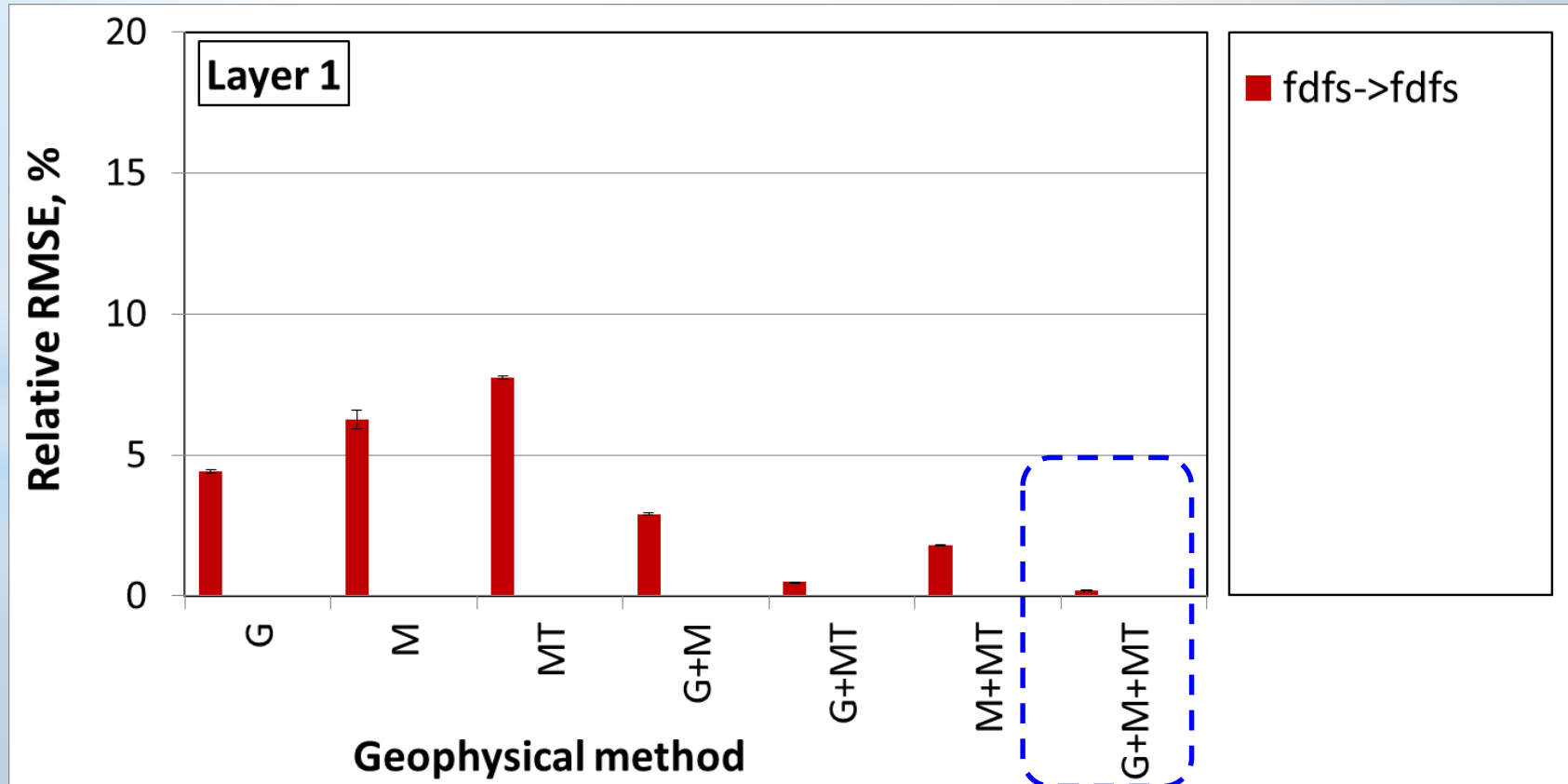


Одновременное использование данных двух геофизических методов повышает качество решения по сравнению с индивидуальным использованием данных любого из них.

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных

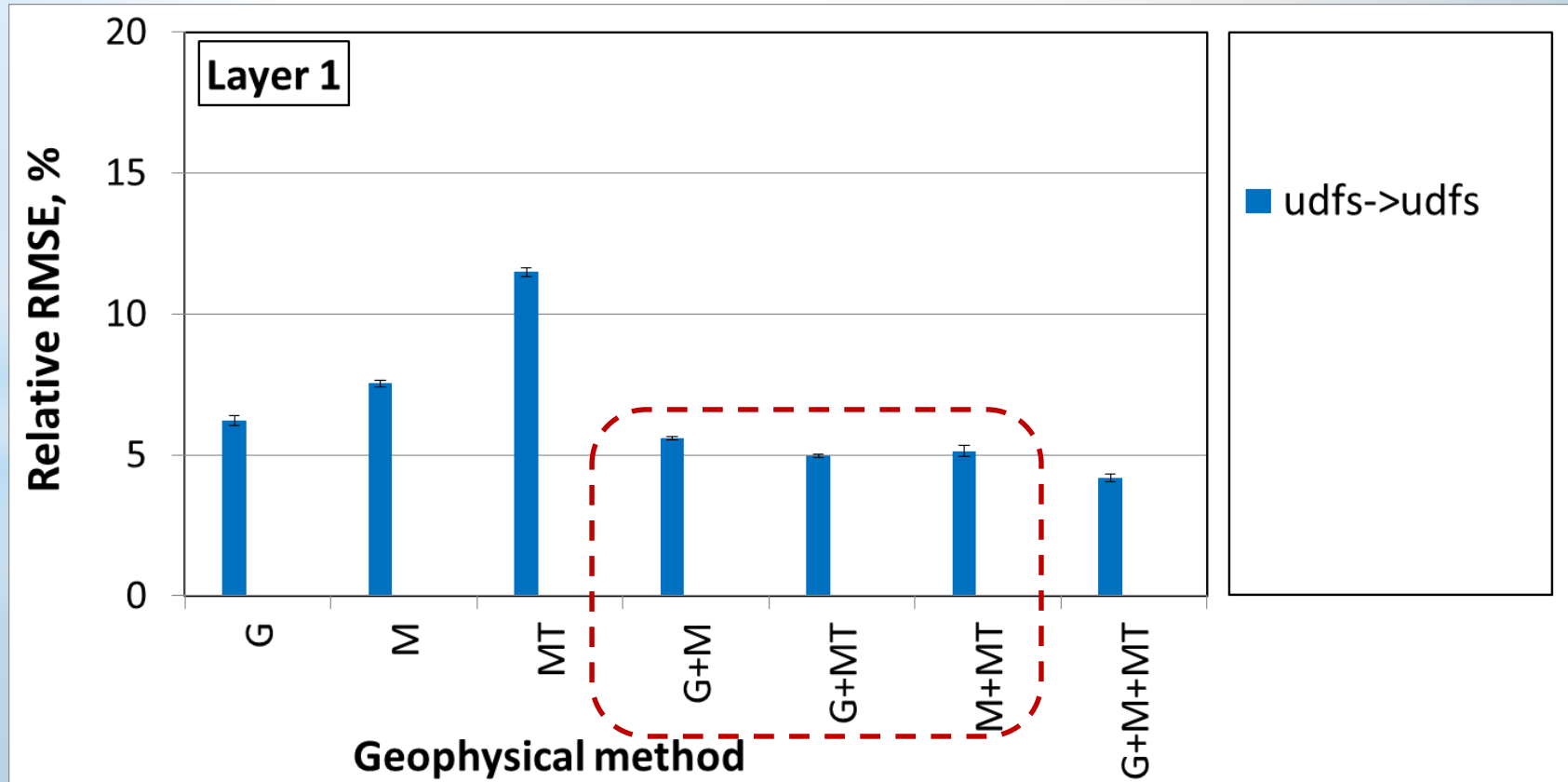


Наилучший результат наблюдается при одновременном использовании данных всех трех геофизических методов.

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных

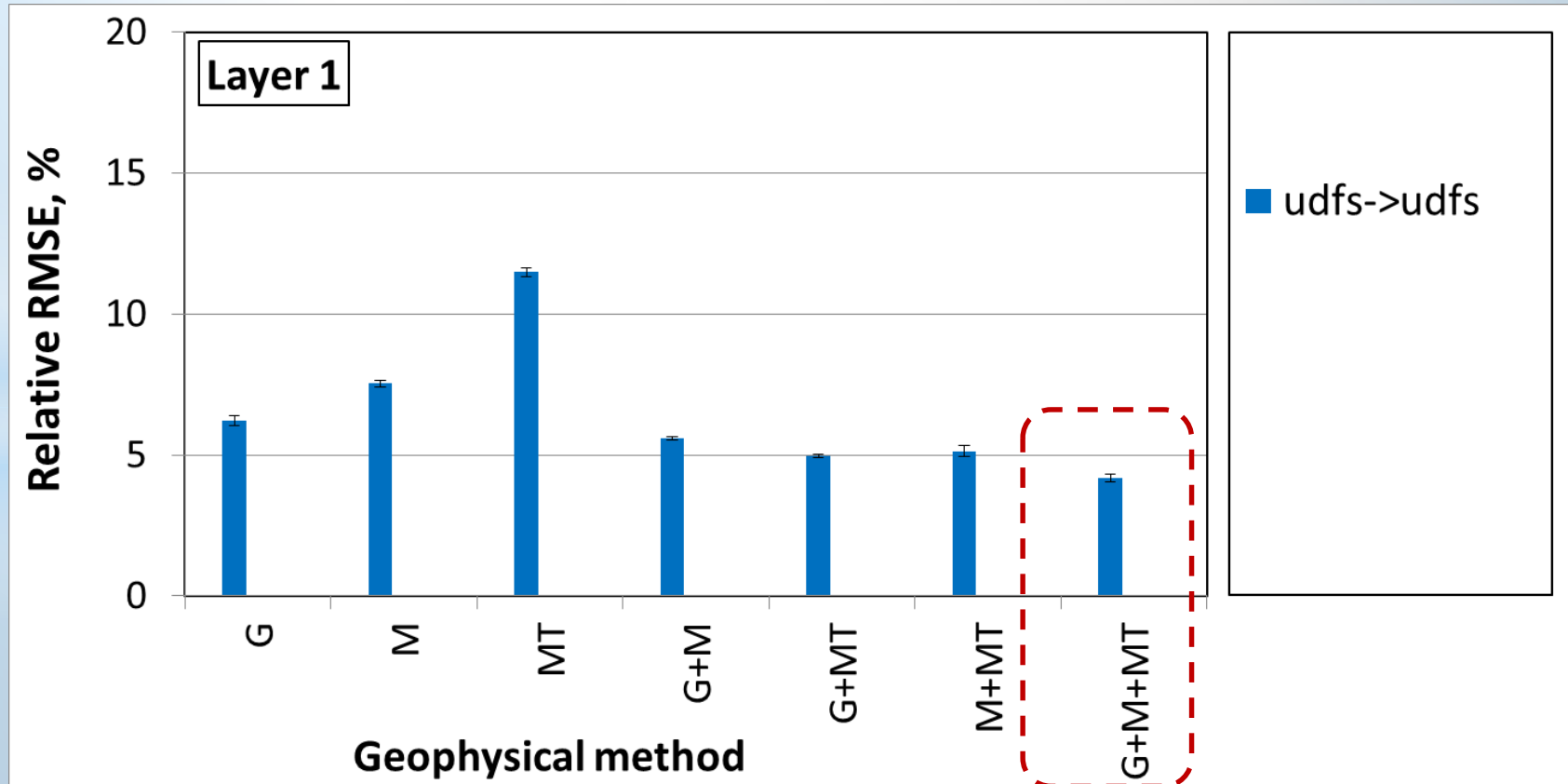


Одновременное использование данных двух геофизических методов повышает качество решения по сравнению с индивидуальным использованием данных любого из них.

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных

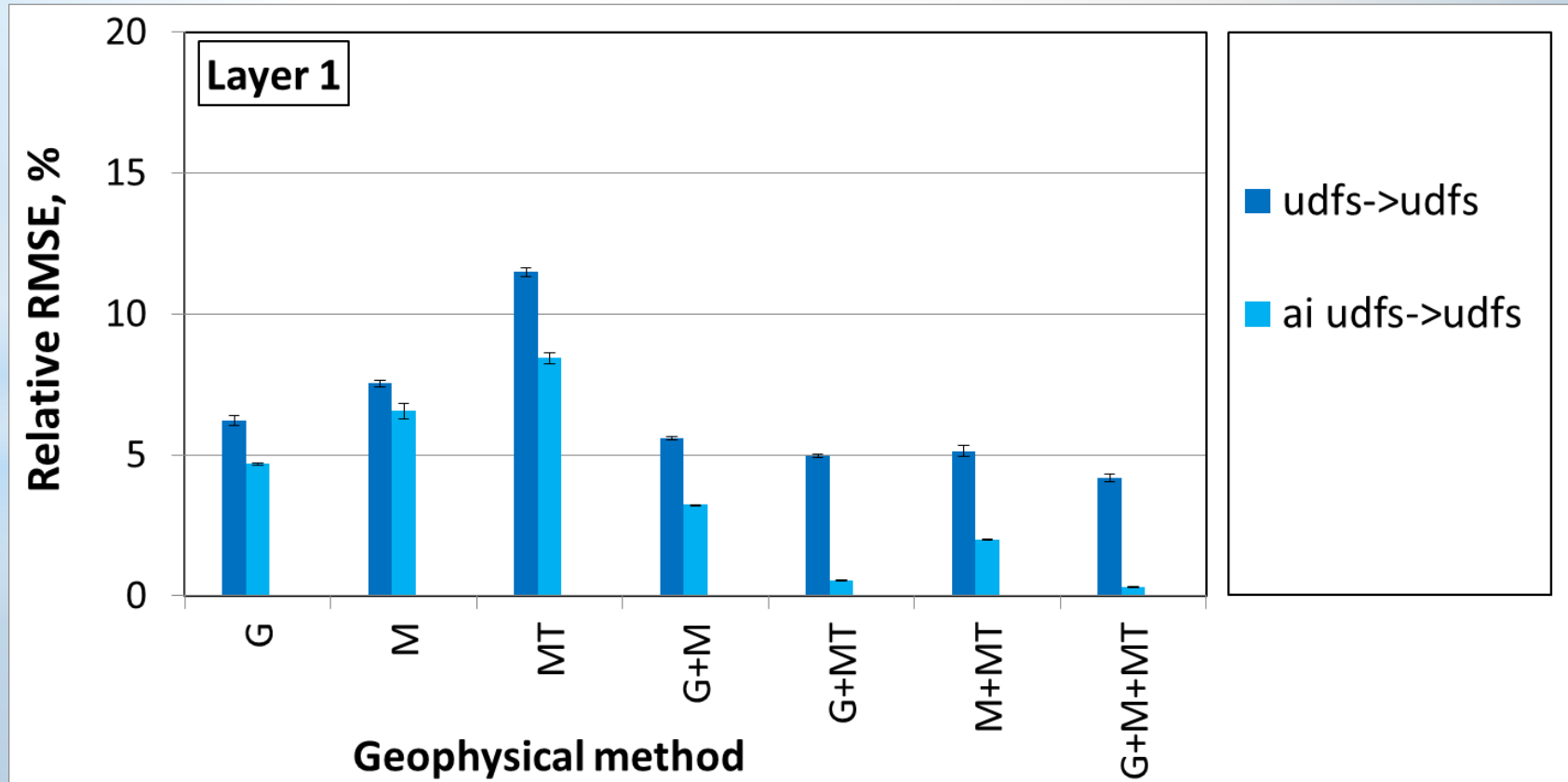


Наилучший результат наблюдается при одновременном использовании данных всех трех геофизических методов.

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных

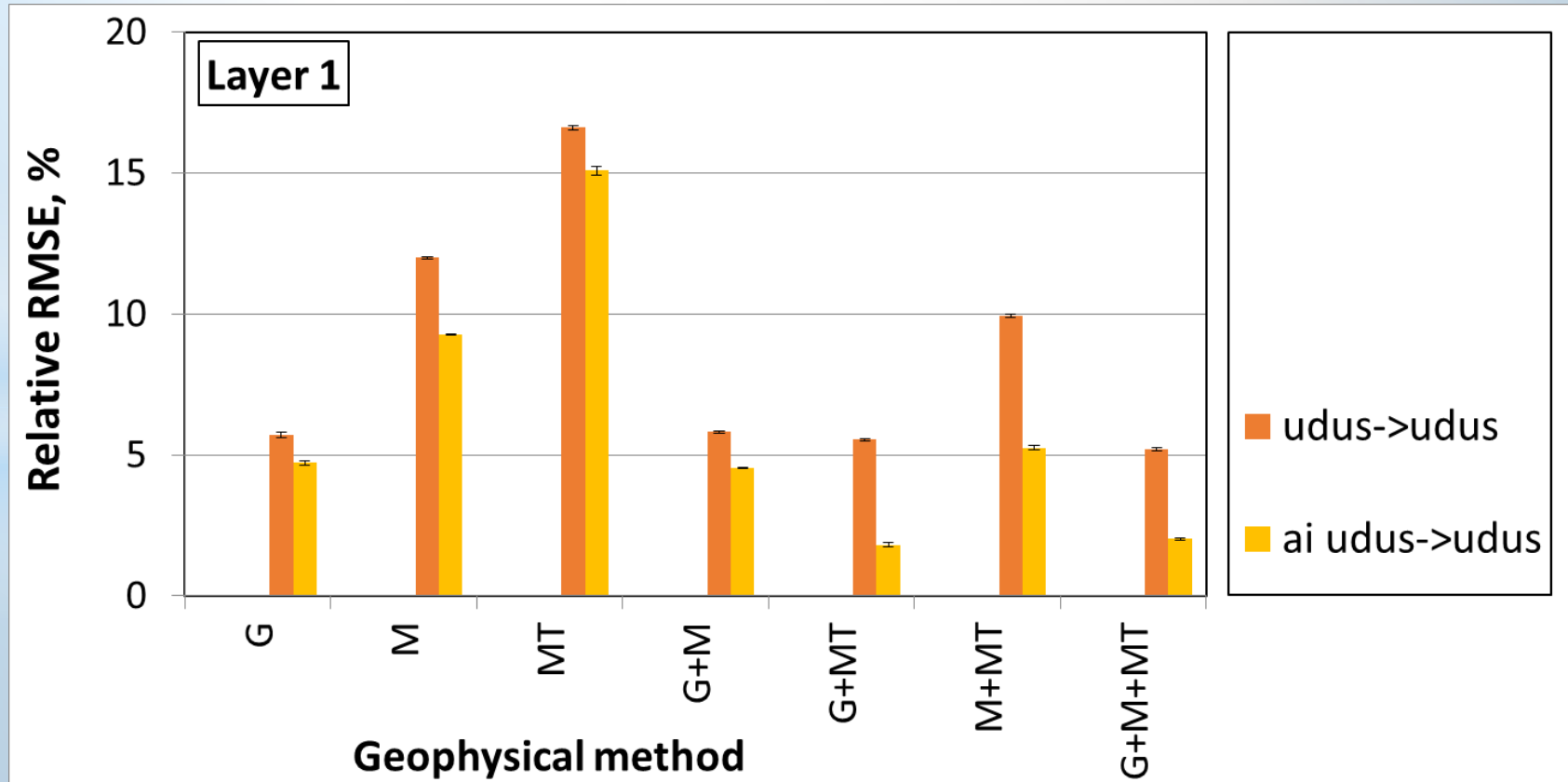


Непосредственное добавление информации о физических свойствах слоев в качестве входных признаков позволяет улучшить качество решения.

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных

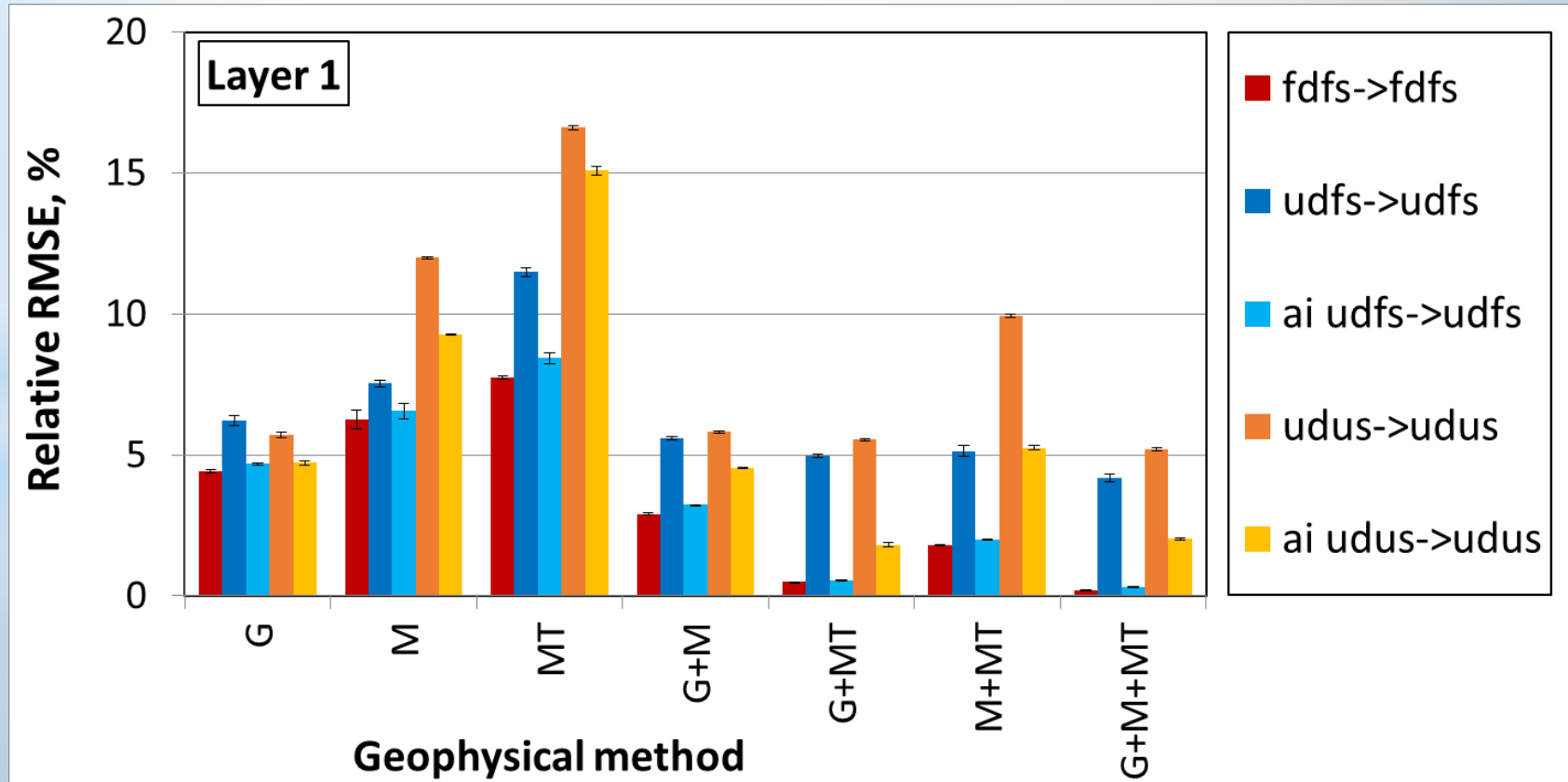


Непосредственное добавление информации о физических свойствах слоев в качестве входных признаков позволяет улучшить качество решения.

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных



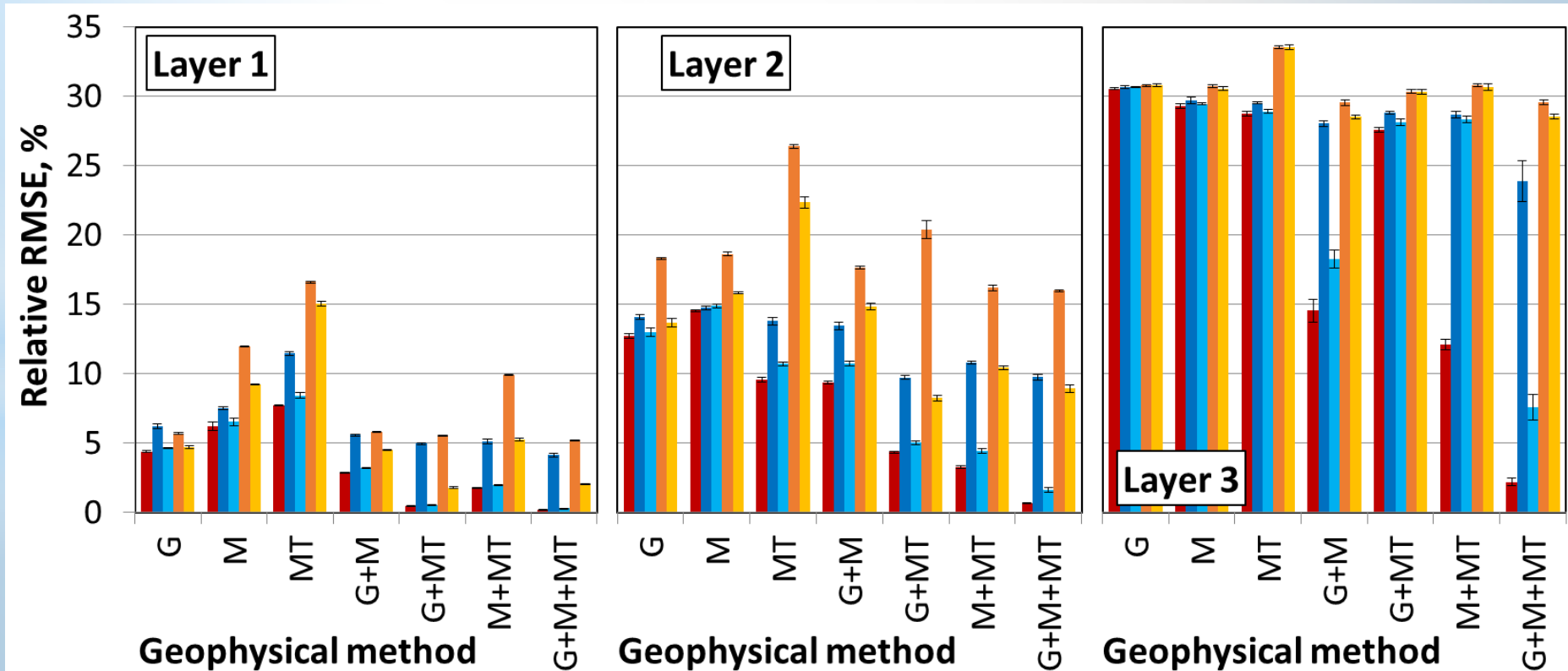
Косвенное введение априорной информации

за счет использования более узкой схемы параметризации также позволяет улучшить качество решения.

Обратные задачи геофизики

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных



Все наблюдаемые эффекты справедливы для всех слоев.

Обратные задачи спектроскопии

Постановка вычислительного эксперимента

Наборы данных:

- ❑ Базовая серия
 - Растворы солей в дистиллированной воде
 - 3760 примеров
- ❑ “Золотая серия”:
 - Растворы солей в речной воде (река Москва)
 - 400 примеров
- ❑ “Серебряные серии”:
 - Растворы солей в речной воде (реки Яуза, Битца, Сетунь)
 - 3 серии по 200 примеров

Обратные задачи спектроскопии

Постановка вычислительного эксперимента

Обучение нейронных сетей:

- ❑ Обучение НС на данных дистиллированной воды
 - Обучение НС – базовая серия
 - Применение НС – “серебряные” серии
 - Проблема: данные тренировочного и тестового наборов различаются

- ❑ Обучение НС на данных речной воды:
 - Обучение НС – “золотая” серии
 - Применение НС – “серебряные” серии
 - Проблема: малое количество примеров в обучающей выборке

- ❑ Перенос обучения
 - Предобучение НС – базовая серия
 - Тонкая настройка НС – “золотая” серия
 - Применение НС – “серебряные” серии

Обратные задачи спектроскопии

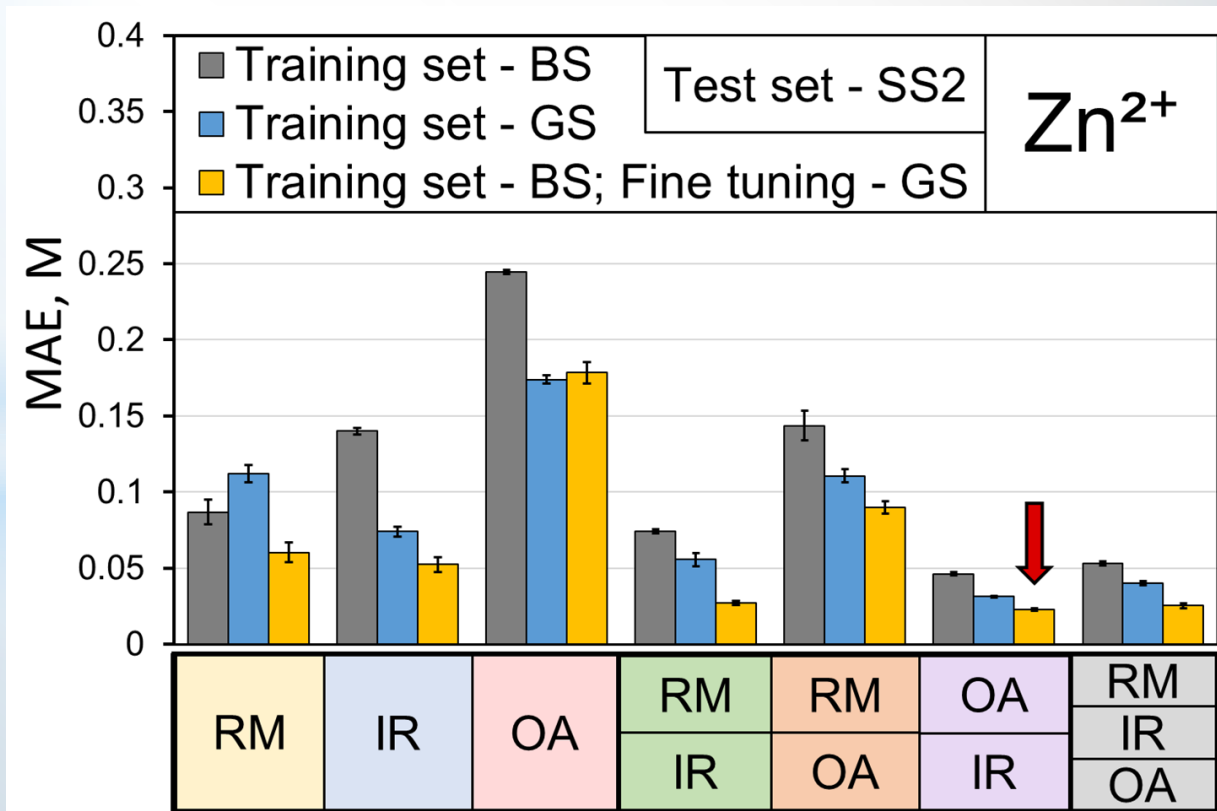
Постановка вычислительного эксперимента

При комплексировании спектроскопических методов на вход НС одновременно подавались данные нескольких спектроскопических методов.

Обратные задачи спектроскопии

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных



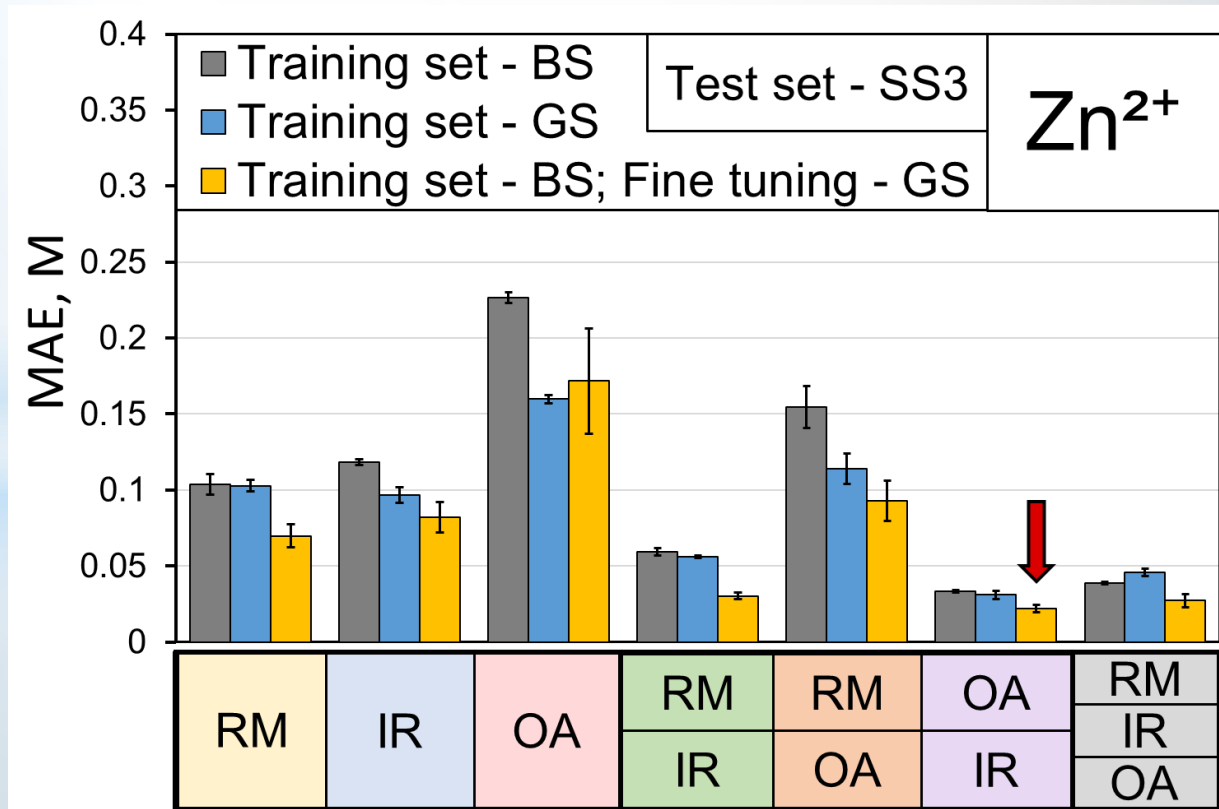
Комплексирование данных нескольких спектроскопических методов показывает результат лучше, чем индивидуальное их использование

Перенос обучения позволяет повысить качество решения

Обратные задачи спектроскопии

Результаты

Зависимость качества решения от входных данных



Комплексирование данных нескольких спектроскопических методов показывает результат лучше, чем индивидуальное их использование

Перенос обучения позволяет повысить качество решения

Спасибо за внимание!

Обратные задачи геофизики

Применение нейронных сетей

Параметры обучения нейронных сетей:

❑ Архитектура:

- Персептрон
- 1 скрытый слой - 32 нейрона
- Передаточная функция:
 - ✓ скрытый слой — сигмоидальная
 - ✓ выходной слой: — линейная

❑ Предотвращение переобучения – метод ранней остановки:

- Остановка обучения спустя 500 эпох без улучшения результата на валидационном наборе.

❑ Начальная инициализация весов:

- Каждая сеть тренировалась по 5 раз с различными случайными комплектами начальных весов.
- Статистики результатов применения усреднялись.

Обратные задачи спектроскопии

Применение нейронных сетей

Параметры обучения нейронных сетей:

□ Архитектура:

- Персептрон
- 3 скрытых слоя – 64+32+16 нейронов
- Передаточная функция:
 - ✓ скрытый слой – сигмоидальная
 - ✓ выходной слой: – линейная

□ Предотвращение переобучения – метод ранней остановки:

- Остановка обучения спустя 500 эпох без улучшения результата на валидационном наборе.

□ Начальная инициализация весов:

- Каждая сеть тренировалась по 5 раз с различными случайными комплектами начальных весов.
- Статистики результатов применения усреднялись.