

DOI: 10.20098/j.cnki.1001-5132.2025.0314

一类分数阶扩散方程的反问题

——基于谱方法和 PINNs 方法

邬倩文, 马飞遥*

(宁波大学 数学与统计学院, 浙江 宁波 315211)

摘要: 提出了一种基于物理信息神经网络 (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) 的方法, 用于求解无界区域分数阶扩散方程的参数反演问题。首先用延拓法将非局部的分数阶扩散方程转换为高一维局部方程, 克服非局部数值求解的困难; 然后用 PINNs 方法解出局部方程谱的展开系数和反演参数值, 解决了无界区域数值求解问题; 最后通过数值实验验证该方法的有效性。

关键词: 分数阶扩散方程; 参数反演; 物理信息神经网络; 延拓法; 谱方法

中图分类号: O241.82; O175.2 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-5132 (2025) 06-0091-06

分数阶扩散方程在描述反常扩散现象方面能力较强, 如异常运输^[1]、多孔介质溶质运输^[2]、湍流^[3]、细胞内分子运输^[4]等, 因此广受关注。分数阶模型对应的反问题, 即依赖适当的附加信息来识别模型中的未知参数。对于分数阶反问题, 传统数值解法通常须多次正问题迭代求解, 如伴随法^[5]、Tikhonov 正则化法^[6], 不仅计算成本较高, 而且理论体系也不完善。物理信息神经网络 (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) 方法^[7]具有端到端求解的优势, 即将未知参数作为网络可训练变量, 与方程残差共同优化。因此相较于传统数值解法, 基于 PINNs 方法在解决反问题上具有优势。

PINNs 方法作为一种强大的反问题求解工具, 已在电磁学^[8]、航空航天^[9]等多个领域应用。然而 PINNs 方法依赖自动微分技术计算导数, 不能直接用于非局部特性的分数阶导数, 为此许多学者针对分数阶问题的数值解法进行了研究。

分数阶扩散方程可分为时间和空间两类, 目前针对时间分数阶扩散方程的反问题研究已取得一定进展^[10-12], 而针对空间分数阶扩散方程的反问题算法研究相对较少。Pang 等^[13]结合有限差分法和 PINNs 方法求解分数阶平流扩散方程; Wang 等^[14]

提出基于幂级数展开的 PINNs 方法, 用于求解变阶空间分数阶偏微分方程。这类研究均聚焦于有界域上的分数阶扩散方程, 而在实际应用中, 许多全局现象的建模须在无界域上进行, 如大气污染^[15]、流行病^[16]、全球碳排放^[17]等, 应用 PINNs 方法解决无界域分数阶扩散方程的反问题已成为研究热点之一, 但目前该问题尚缺乏有效求解算法。由于 PINNs 方法难以对无界变量进行简单归一化, 因此很难处理无界区域问题。为此, 有学者提出了谱适应物理信息神经网络 (s-PINNs) 方法^[18], 用以解决该问题。s-PINNs 方法通过结合谱方法在无界域中构造谱格式近似解, 可计算无界域中经典偏微分方程, 有效处理解在无穷远处的渐近行为。但是 s-PINNs 方法不能解决无界域上非局部的分数阶正反问题。因此, 本文基于 s-PINNs 方法, 通过引入延拓法^[19]克服分数阶算子非局部的难点, 构建一种解决无界域分数阶扩散方程反问题的算法, 即分数阶谱物理信息神经网络 (fs-PINNs) 方法。考虑的无界域分数阶扩散方程为

$$\begin{cases} \partial u / \partial t = -c(-\Delta)^s u + f(u) + g(x, t), \\ t \in (0, T], x \in R^d \\ u(x, 0) = u_0(x), x \in R^d \end{cases} \quad (1)$$

收稿日期: 2025-03-20

宁波大学学报(理工版)网址: <http://journal.nbu.edu.cn/>

基金项目: 国家自然科学基金 (11971251)

第一作者: 邬倩文, 硕士研究生, 主要研究方向为偏微分方程。E-mail: 378920756@qq.com

*通信作者: 马飞遥, 博士/副教授, 主要研究方向为偏微分方程。E-mail: mafeyao@nbu.edu.cn

其中: c 为扩散系数; $s \in (0,1)$; u 为式(1)解; $f(u)$ 为依赖 u 的已知函数; $g(x,t)$ 为依赖 x 和 t 的已知函数; $u_0(x)$ 为 $t=0$ 时刻 u 的初值; 分数阶 Laplace 算子 $(-\Delta)^s$ 定义为

$$(-\Delta)^s u(x) = c_{d,s} PV \int_{R^d} \frac{u(x) - u(y)}{|x - y|^{d+2s}} dy$$

其中: PV 代表柯西主值; $c_{d,s} := \frac{2^{2s} s \Gamma(s + d/2)}{\pi^{d/2} \Gamma(1-s)}$ 。

算法在空间方向 x 上采用谱方法的截断正交基函数(如 Hermite 函数)构建出逼近空间,在时间方向 t 上采用高阶隐式 Runge-Kutta 方法通过均匀时间离散化推进解的演化,设离散时间步长 $\Delta t = t_{j+1} - t_j$, $j = 0, 1, \dots, T/\Delta t$ 。通过在时间区间 $(0, T]$ 内选取离散时间点 t_j ($j = 1, \dots, T/\Delta t$),在每个时间点 t_j 上的 $u(x, t_j)$ 从已知节点 x 处获得数据,以此反演式(1)中未知参数 c 和 s 。反演 c 和 s 的难点在于分数阶算子的非局部性,所以针对分数阶算子,采用延拓法^[19]将非局部分数阶偏微分方程转换为高一维局部方程,然后将转换后局部方程嵌入 s-PINNs 方法框架中实现求解。最后通过数值算例验证该算法的有效性。

1 基于 PINNs 方法分数阶扩散方程的参数反演模型

为反演参数 c 和 s , 假设从已知 $(n+1)$ 个节点获得的先验数据为 $u(x_i, t_j)$, $x_i \in R^d$, $i = 0, 1, \dots, n$, $j = 0, 1, \dots, T/\Delta t$ 。此时参数反演模型转化为求如下非线性最优化问题的解:

$$\lambda^* = \arg \min_{\lambda} \sum_{j=1}^{T/\Delta t} \sum_{i=0}^n |\tilde{u}(x_i, t_j; \lambda) - u(x_i, t_j)|^2$$

其中: λ 表示待反演参数 c 和 s ; $\tilde{u}(x_i, t_j; \lambda)$ 是以 λ 为参数, 从式(1)获得的数值解。

为解决分数阶 Laplace 算子非局部性问题, 引入 Caffarelli 等^[19]提出的延拓法, 即若 U 满足高一维局部方程

$$\begin{cases} \Delta_x U(x, z, t) + z^\alpha U_{zz}(x, z, t) = 0, \\ x \in R^d, z > 0, t \in (0, T] \\ U(x, 0, t) = u(x, t), x \in R^d, t \in (0, T] \end{cases}$$

那么 $(-\Delta)^s$ 可表示为

$$(-\Delta)^s u(x, t) = \frac{4^s \Gamma(s)}{2s \Gamma(-s)} U_z(x, 0, t)$$

其中: $\alpha = (2s-1)/s$, Γ 是 Gamma 函数。

于是可转化为如下非线性最优化问题的解:

$$\lambda^* = \arg \min_{\lambda} \sum_{j=1}^{T/\Delta t} \sum_{i=0}^n |\tilde{U}(x_i, 0, t_j; \lambda) - u(x_i, t_j)|^2$$

其中: $\tilde{U}(x_i, 0, t_j; \lambda)$ 是以 λ 为参数的方程

$$\begin{cases} \partial U(x, 0, t) / \partial t = \mathcal{M}[U](x, 0, t; \lambda), \\ t \in (0, T], x \in R^d \\ \mathcal{N}[U](x, z, t) = 0, x \in R^d, z > 0 \\ U(x, 0, 0) = u_0(x), x \in R^d \end{cases} \quad (2)$$

的数值解, 在式(1)中, 令

$$(-\Delta)^s u(x, t) := \frac{4^s \Gamma(s)}{2s \Gamma(-s)} U_z(x, 0, t)$$

$$u(x, t) := U(x, 0, t)$$

那么

$$\mathcal{M}[U](x, 0, t; \lambda) = -c \frac{4^s \Gamma(s)}{2s \Gamma(-s)} U_z(x, 0, t) +$$

$$f(U(x, 0, t)) + g(x, t)$$

$$\mathcal{N}[U](x, z, t) = \Delta_x U(x, z, t) + z^\alpha U_{zz}(x, z, t)$$

如前所述, 相较于传统数值解法, PINNs 方法在解决反问题上具有优势, 且该反问题定义在无界区域, 因此引入 s-PINNs 方法求解式(2)。

对时间进行剖分, 在每个离散时间步长 $\Delta t = t_{j+1} - t_j$, $j = 0, 1, \dots, T/\Delta t$ 内, 最优化问题可表示为

$$\begin{aligned} \lambda^* = \arg \min_{\lambda} \sum_{i=0}^{N_x} \left(\left| U_{N_x, N_z}(x_i, 0, t_j; \theta_{j+1}; \lambda) - u(x_i, t_j) \right|^2 + \right. \\ \left. \left| U_{N_x, N_z}(x_i, 0, t_{j+1}; \theta_{j+1}; \lambda) - u(x_i, t_{j+1}) \right|^2 \right) \\ U_{N_x, N_z}(x, z, t; \theta_{j+1}; \lambda) = \\ \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{l=0}^{N_z} w_{i,l}(t; \theta_{j+1}) \mathcal{H}_i(x) \mathcal{L}_l(z) \end{aligned} \quad (3)$$

表示以 λ 为参数的方程

$$\begin{cases} \frac{\partial U(x, 0, t)}{\partial t} = \mathcal{M}[U](x, 0, t; \lambda), x \in R^d, t \in [t_j, t_{j+1}] \\ \mathcal{N}[U](x, z, t) = 0, x \in R^d, z > 0, t \in [t_j, t_{j+1}] \\ U(x, 0, t_j) = u(x, t_j), x \in R^d \\ U(x, 0, t_{j+1}) = u(x, t_{j+1}), x \in R^d \end{cases} \quad (4)$$

的神经网络谱展开数值解, 其中 N_x 和 N_z 为谱展开阶数。由于 x 定义在无界域上, $\mathcal{H}_i(x)$ 采用 i 阶 Hermite 函数。 z 定义在半无界域上, $\mathcal{L}_l(z)$ 采用 l 阶 Laguerre 函数。 x 和 z 采用相对应 N_x 和 N_z 个 Gauss 型求积节点。在每个离散时间区间 $[t_j, t_{j+1}]$,

网络输入为各个时刻 $t_j + \rho_m \Delta t$, $0 < \rho_m < 1$ 是时间方向上对应的 Runge-Kutta 方法的系数, 网络输出为每个时刻 t 对应的一组谱展开系数 $w_{i,l}(t; \theta_{j+1})$, θ_{j+1} 是时间区间 $[t_j, t_{j+1}]$ 上的神经网络可训练参数集。结合 K 阶隐式 Runge-Kutta 方法构造神经网络的损失函数。若给定 $U(x, z, t_j; \lambda)$ 和 $U(x, z, t_{j+1}; \lambda)$, 根据 K 阶隐式 Runge-Kutta 方法可得

$$\begin{aligned} & U_{N_x, N_z}(x, z, t_j + \rho_m \Delta t; \lambda) = \\ & \sum_{r=1}^K a_{rm} \mathcal{M}[U_{N_x, N_z}(x, z, t_j + \rho_r \Delta t; \lambda)] + \\ & U(x, z, t_j; \lambda) \\ & U_{N_x, N_z}(x, z, t_j + \rho_m \Delta t; \lambda) = \\ & \sum_{r=1}^K (a_{rm} - b_r) \mathcal{M}[U_{N_x, N_z}(x, z, t_j + \rho_r \Delta t; \lambda)] + \\ & U(x, z, t_{j+1}; \lambda) \end{aligned}$$

其中: $a_{rm}, b_r (m, r=1, 2, \dots, K)$ 是相应 Runge-Kutta 方法系数, $0 < \rho_m < 1$ 是时间方向上对应的 Runge-Kutta 方法的系数, 这就构成损失函数的其中二项。

如此构造 $U_{N_x, N_z}(x, z, t_j + \rho_m \Delta t)$ 是因为该方法反演未知参数 λ 不同于标准 PINNs 方法只考虑单个时间点的残差, 是通过对称性设计损失函数, 充分利用时间区间 $[t_j, t_{j+1}]$ 两端点上的信息, 从两端出发计算残差, 从而提高参数推断的准确性和稳定性。在每个时间区间 $[t_j, t_{j+1}]$, 初值条件定义为

$$\begin{aligned} & U_{N_x, N_z}(x, 0, t_j; \theta_{j+1}; \lambda) := u(x, t_j) \\ & U_{N_x, N_z}(x, 0, t_{j+1}; \theta_{j+1}; \lambda) := u(x, t_{j+1}) \end{aligned}$$

基于上述推导, 待反演的参数须满足式 (4) 的约束, 因此参数反演模型可表述为如下最优化问题:

$$\lambda^* = \arg \min_{\lambda} L_j$$

其中损失函数满足

$$\begin{aligned} L_j &= L_j^1 + L_j^2 + L_j^3 \quad (5) \\ L_j^1 &= \sum_{m=1}^K \|U_{N_x, N_z}(x, 0, t_j + \rho_m \Delta t; \theta_{j+1}; \lambda) - \\ & U_{N_x, N_z}(x, 0, t_j; \theta_{j+1}; \lambda) - \\ & \sum_{r=1}^K a_{rm} \mathcal{M}[U_{N_x, N_z}(x, 0, t_j + \rho_r \Delta t; \theta_{j+1}; \lambda)]\|_2^2 \\ L_j^2 &= \sum_{m=1}^K \|U_{N_x, N_z}(x, 0, t_j + \rho_m \Delta t; \theta_{j+1}; \lambda) - \\ & U_{N_x, N_z}(x, 0, t_{j+1}; \theta_{j+1}; \lambda) - \sum_{r=1}^K (a_{rm} - b_r) \cdot \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{M}[U_{N_x, N_z}(x, 0, t_j + \rho_r \Delta t; \theta_{j+1}; \lambda)]\|_2^2 \\ L_j^3 &= \sum_{m=1}^K \|\mathcal{N}[U_{N_x, N_z}(x, z, t_j + \rho_m \Delta t; \theta_{j+1}; \lambda)]\|_2^2 + \\ & \|\mathcal{N}[U_{N_x, N_z}(x, z, t_j + \Delta t; \theta_{j+1}; \lambda)]\|_2^2 \end{aligned}$$

$\|\cdot\|_2$ 代表空间变量 x 和 z 的离散 L^2 范数, 即对谱方法的配置点 $\{x_i\}_{i=0}^{N_x}$ 和 $\{z_l\}_{l=0}^{N_z}$ 离散 L^2 范数定义为

$$\|u\|_2 = \left(\sum_{i=0}^{N_x} \sum_{l=0}^{N_z} |u(x_i, z_l) w_{i,l}|^2 \right)^{1/2}$$

其中: $w_{i,l}$ 为对应所选正交多项式 (如 Hermite 多项式) 的 Gauss 求积权重。 L_j^1 和 L_j^2 分别从两个时间端点 t_j 和 t_{j+1} 出发, 结合 Runge-Kutta 方法计算时间区间 $[t_j, t_{j+1}]$ 上式 (4) 中第一个方程的均方误差。 L_j^3 是计算时间区间 $[t_j, t_{j+1}]$ 上式 (4) 中第二个方程的均方误差。通过最小化损失函数, 进而根据延拓法可得参数反演问题 (式 (1)) 的反演参数 λ^* 和近似解 $\tilde{u}(x, t) := U_{N_x, N_z}(x, 0, t; \theta_{j+1}; \lambda)$ 。

综上, 可归结参数反演算法, 时间区间 $[t_j, t_{j+1}]$ 上分数阶扩散方程参数反演算法步骤如下:

步骤 1 给定每个时间节点 t_j 上数据 $u(x_i, t_j)$, $i=0, 1, \dots, n$, $j=0, 1, \dots, T/\Delta t$ 。

步骤 2 通过谱展开式 (3) 构建神经网络近似解 $U_{N_x, N_z}(x, 0, t; \theta_{j+1}; \lambda)$ 作为精确解 $u(x, t)$ 的近似。

步骤 3 设 Gauss 型求积节点 $\{x_i\}_{i=0}^{N_x}$ 和 $\{z_l\}_{l=0}^{N_z}$ 的时间节点 $t_j + \rho_m \Delta t$, 利用谱展开得到近似解 $U_{N_x, N_z}(x, 0, t; \theta_{j+1}; \lambda)$, 得出损失函数 L_j 。

步骤 4 利用 Adam 优化器更新损失函数 L_j , 降至理想误差, 停止训练, 得到神经网络近似解 $\tilde{u}(x, t)$ 和反演参数 λ^* 。

2 数值算例

通过数值算例检验算法的有效性, 考虑如下修正 Allen-Cahn 方程^[20]:

$$\begin{aligned} & \partial u / \partial t = -c(-\Delta)^s u(x) + f(u) + g(x, t), \\ & t \in (0, T], x \in R \quad (6) \end{aligned}$$

方程右端项定义为

$$\begin{aligned} & f(u) = \frac{u(u-1)(2u-1)}{2} \\ & g(x, t) = \\ & c \exp(-t) \frac{2^{2s} \Gamma(s+1/2)}{\Gamma(1/2)} {}_1F_1(s+\frac{1}{2}; \frac{1}{2}; -x^2) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp(-3t)\exp(-3x^2) - \\ & \frac{3}{2}\exp(-2t)\exp(-2x^2) - \\ & \frac{1}{2}\exp(-t)\exp(-x^2) \end{aligned} \quad (7)$$

这里合流超几何函数(Kummer 函数) ${}_1F_1(a;b;x)$ ^[21] 定义为

$${}_1F_1(a;b;x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n x^n}{(b)_n n!}$$

珀赫哈默尔符号 $(a)_n$ 定义为

$$(a)_0 = 1, (a)_n = a(a+1)\cdots(a+n-1)$$

方程的解析解为

$$u(x,t) = \exp(-t)\exp(-x^2)$$

数值实验通过设定函数(式(7))中的参数 c 和 s 值,将式(6)中的 c 和 s 作为未知参数进行反演。反演模型在时间方向上采用时间步长 $\Delta t = 0.1$ 的四阶隐式 Runge-Kutta 方法最小化式(5)给出的损失函数。神经网络架构采用 20 个全连接线性隐藏层,每个隐藏层包含 50 个神经元,激活函数选择 ReLU 函数。近似解的谱展开阶数 $N_x = N_z = 15$ 。

本实验 $\mathbb{L}^2$ 的相对误差是中间时间节点 $t_j + \rho_m \Delta t$ 的神经网络近似解的 $\mathbb{L}^2$ 相对误差,这里 $\mathbb{L}^2$ 相对误差是神经网络输出谱展开系数和精确解谱展开系数之间的 $\mathbb{L}^2$ 相对误差与谱方法的截断误差之和。在每个时间节点 $t = t_j$,从

$$u(x, t_j) = \exp(-t_j)\exp(-x^2) + \xi(x, t_j)$$

获得数据,其中配置点 x 选取为 Hermite-Gauss 型求积节点,配置点 z 选取为 Laguerre-Gauss 型求积节点。 $\xi(x, t)$ 是空间和时间内都不相关的噪声项, $\xi(x, t)$ 服从正态分布,均值为 0,方差为 σ ,即 $\xi(x, t) \sim N(0, \sigma^2)$ 。在每个时间区间 (t_j, t_{j+1}) 内,针对不同的噪声程度 σ ,采用带有噪声的解 $u(x, t_j)$ 和 $u(x, t_{j+1})$ 来反演未知参数,同时还能获得中间时间节点 $t_j + c_s \Delta t$ 处的神经网络近似解。

2.1 反演未知参数 c

式(6)的参数设置为 $T = 0.5$, $s = 0.5$ 。不同噪声强度影响下 $c = 2.25$ 时的反演结果见表 1,反演参数 c 与其精确值的绝对误差 $|c - 2.25|$ 如图 1 所示。图 1 中每个时间节点 t_{j+1} 上的反演参数 c 的绝对误差代表该时间区间 (t_j, t_{j+1}) 反演参数 c 的绝对

误差。从表 1 可见,当未加入噪声或加入的噪声强度较小,即 $\sigma = 0$ 或 $\sigma = 10^{-3}$ 时,反演参数 c 的相对误差都控制在 5×10^{-2} 左右,近似解的 $\mathbb{L}^2$ 相对误差达到 10^{-3} ,模型反演效果较好;当加入的噪声强度较大时,即 $\sigma = 10^{-2}$ 时,反演参数 c 的相对误差和近似解的 $\mathbb{L}^2$ 相对误差出现不稳定现象,模型稳定性和反演能力逐渐下降;而当加入的噪声强度过大,即 $\sigma = 10^{-1}$ 时,模型的反演能力大幅下降,反演参数 c 的相对误差十分不稳定,近似解的 $\mathbb{L}^2$ 相对误差超过 10^{-1} 。综上表明 fs-PINNs 方法具有较好的泛化能力和稳定性。

表 1 不同噪声强度影响下反演参数 c 的相对误差和神经网络近似解的 $\mathbb{L}^2$ 相对误差

(t_j, t_{j+1})	$\sigma = 0$	$\sigma = 10^{-3}$
(0, 0.1)	(0.047 7, 0.004 0)	(0.050 8, 0.004 1)
(0.1, 0.2)	(0.057 2, 0.006 0)	(0.049 3, 0.004 8)
(0.2, 0.3)	(0.058 4, 0.005 3)	(0.061 2, 0.012 4)
(0.3, 0.4)	(0.054 0, 0.008 4)	(0.049 7, 0.007 7)
(0.4, 0.5)	(0.039 6, 0.007 6)	(0.045 9, 0.007 3)
(t_j, t_{j+1})	$\sigma = 10^{-2}$	$\sigma = 10^{-1}$
(0, 0.1)	(0.004 3, 0.012 7)	(0.314 1, 0.121 7)
(0.1, 0.2)	(0.202 4, 0.048 4)	(0.129 1, 0.109 0)
(0.2, 0.3)	(0.032 2, 0.028 4)	(0.093 5, 0.201 7)
(0.3, 0.4)	(0.059 1, 0.038 6)	(0.316 9, 0.262 0)
(0.4, 0.5)	(0.132 4, 0.046 5)	(0.874 7, 0.294 1)

注:括号中第一项是反演参数 c 的相对误差 $|c - 2.25|/2.25$;第二项是神经网络近似解的 $\mathbb{L}^2$ 相对误差。

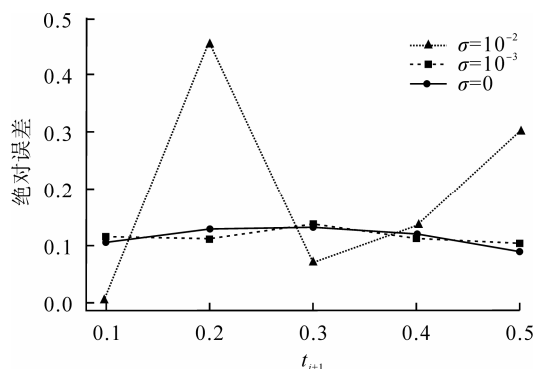


图 1 不同噪声强度影响下反演参数 c 与其精确值的绝对误差 $|c - 2.25|$

2.2 反演未知参数 s

式(6)的参数设置为 $c = 1$, $T = 0.5$ 。不同噪声强度影响下 $s = 0.5$ 时的反演结果见表 2,反演参数

s 与其精确值的绝对误差 $|s - 0.5|$ 如图 2 所示。图 2 中每个时间节点 t_{j+1} 上的参数 s 代表该时间区间 (t_j, t_{j+1}) 反演参数 s 的绝对误差。

表 2 不同噪声强度影响下反演参数 s 的相对误差和神经网络近似解的 L^2 相对误差

(t_j, t_{j+1})	$\sigma=0$	$\sigma=10^{-3}$
(0, 0.1)	(0.062 4, 0.005 7)	(0.083 9, 0.003 6)
(0.1, 0.2)	(0.075 6, 0.002 6)	(0.074 5, 0.004 1)
(0.2, 0.3)	(0.077 4, 0.003 2)	(0.039 8, 0.003 7)
(0.3, 0.4)	(0.063 1, 0.007 1)	(0.081 8, 0.004 5)
(0.4, 0.5)	(0.049 5, 0.008 7)	(0.036 8, 0.007 2)
(t_j, t_{j+1})	$\sigma=10^{-2}$	$\sigma=10^{-1}$
(0, 0.1)	(0.093 0, 0.010 2)	(1.345 2, 0.138 7)
(0.1, 0.2)	(0.116 2, 0.020 4)	(0.347 2, 0.161 9)
(0.2, 0.3)	(0.063 2, 0.021 8)	(0.527 0, 0.255 3)
(0.3, 0.4)	(0.118 4, 0.030 2)	(0.710 2, 0.209 3)
(0.4, 0.5)	(0.087 6, 0.028 5)	(2.322 0, 0.410 5)

注: 括号中第一项是反演参数 s 的相对误差 $|c - 0.5|/0.5$; 第二项是神经网络近似解的 L^2 相对误差。

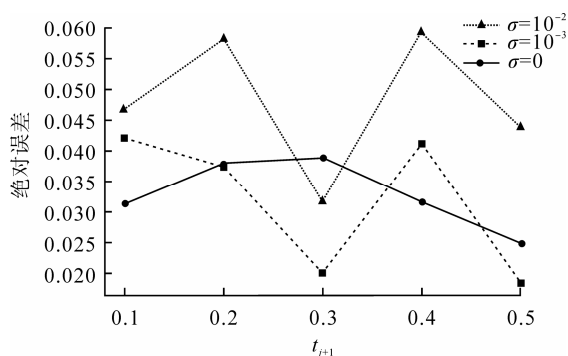


图 2 不同噪声强度影响下反演参数 s 与其精确值的绝对误差 $|s - 0.5|$

从表 2 可见, 当未加入噪声或加入的噪声强度较小, 即 $\sigma=0$ 或 $\sigma=10^{-3}$ 时, 反演参数 s 的相对误差控制在 7×10^{-2} 左右, 近似解的 L^2 相对误差达到 10^{-3} , 模型反演效果较好; 当加入的噪声强度较大, 即 $\sigma=10^{-2}$ 时, 反演参数 s 的相对误差达到 10^{-1} , 近似解的 L^2 相对误差达到 10^{-2} , 模型稳定性和反演能力逐渐下降; 当加入的噪声强度过大, 即 $\sigma=10^{-1}$ 时, 反演能力大幅下降, 反演参数 s 的相对误差十分不稳定, 甚至超过 1, 近似解的 L^2 相对误差超过 10^{-1} , 说明这类强度的噪声对模型干扰极大, 显著影响其性能。综上表明, fs-PINNs 方法具有较好的泛化能力和稳定性, 当噪声强度超过临界值

时, 网络的学习能力下降, 无法准确从数据中提取有效信息。

3 结论

结合延拓法、谱方法和 PINNs 方法, 对无界域分数阶扩散方程参数反演问题的解法进行了探讨。该参数反演问题的主要难点在于分数阶 Laplace 算子的非局部特性与扩散系数和分数阶指数之间的强非线性耦合特性, 使得传统反演方法 (如最小二乘法) 在求解时普遍存在收敛速度缓慢、数值精度不足的问题。因此采用延拓法处理分数阶算子, 用谱方法逼近无界域问题, 用 PINNs 方法通过将未知参数作为网络可训练变量, 与方程残差共同优化以减小求解反问题的计算量。实验结果表明, 当不存在噪声或噪声水平适中时反演参数和近似解的相对误差较小、精度较高; 当噪声强度较大时反演参数的不确定性显著增加, 反演结果的精度随之下降。

参考文献:

- [1] AHMAD I, MEKAWY I, KHAN M N, et al. Modeling anomalous transport in fractal porous media: a study of fractional diffusion PDEs using numerical method[J]. Nonlinear engineering, 2024, 13(1):20220366.
- [2] MORADI G, MEHDINEJADIANI B. Modelling solute transport in homogeneous and heterogeneous porous media using spatial fractional advection-dispersion equation[J]. Soil and water research, 2018, 13(1):18-28.
- [3] CHURBANOV A G, VABISHCHEVICH P N. Numerical investigation of a space-fractional model of turbulent fluid flow in rectangular ducts[J]. Journal of computational physics, 2016, 321:846-859.
- [4] TAMIS A, DRAPACA C S. Modeling no biotransport in brain using a space-fractional reaction-diffusion equation [J]. Frontiers in physiology, 2021, 12:644149.
- [5] 彭鑫, 周晓军. 基于时间分数阶扩散方程导数参数反演问题[J]. 贵州师范大学学报(自然科学版), 2022, 40(2):81-87.
- [6] 杜文慧, 熊向团. 时间分数阶扩散方程同时反演源项和初值的迭代分数次 Tikhonov 方法[J]. 山东大学学报(理学版), 2024, 59(8):77-83.
- [7] RAISSI M, PERDIKARIS P, KARNIADAKIS G E. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems

- involving nonlinear partial differential equations[J]. Journal of computational physics, 2019, 378:686-707.
- [8] BALDAN M, DI BARBA P, LOWTHER D A. Physics-informed neural networks for inverse electromagnetic problems[J]. IEEE transactions on magnetics, 2023, 59(5): 7001705.
- [9] JAGTAP A D, MAO Z P, ADAMS N, et al. Physics-informed neural networks for inverse problems in supersonic flows[J]. Journal of computational physics, 2022, 466:111402.
- [10] ALI I, HAQ S, HUSSAIN M, et al. On the analysis and application of a spectral collocation scheme for the nonlinear two-dimensional fractional diffusion equation [J]. Results in physics, 2024, 56:107222.
- [11] 阮周生, 王泽文, 张文. 数值求解时间分数阶扩散方程源项反问题[J]. 黑龙江大学自然科学学报, 2015, 32(5): 586-590.
- [12] 邱淑芳, 王泽文, 曾祥龙, 等. 一类时间分数阶扩散方程中的源项反演解法[J]. 江西师范大学学报(自然科学版), 2018, 42(6):610-615.
- [13] PANG G F, LU L, KARNIADAKIS G E. fPINNs: fractional physics-informed neural networks[J]. SIAM journal on scientific computing, 2019, 41(4):A2603-A2626.
- [14] WANG S P, ZHANG H, JIANG X Y. Physics-informed neural network algorithm for solving forward and inverse problems of variable-order space-fractional advection-diffusion equations[J]. Neurocomputing, 2023, 535:64-82.
- [15] MOREIRA D M, DOS SANTOS C A G. New approach to handle gas-particle transformation in air pollution modelling using fractional derivatives[J]. Atmospheric pollution research, 2019, 10(5):1577-1587.
- [16] NABTI A, GHANBARI B. Global stability analysis of a fractional SVEIR epidemic model[J]. Mathematical methods in the applied sciences, 2021, 44(11):8577-8597.
- [17] GU H L, WU L F. Pulse fractional grey model application in forecasting global carbon emission[J]. Applied energy, 2024, 358:122638.
- [18] XIA M T, BÖTTCHER L, CHOU T. Spectrally adapted physics-informed neural networks for solving unbounded domain problems[J]. Machine learning: science and technology, 2023, 4(2):025024.
- [19] CAFFARELLI L, SILVESTRE L. An extension problem related to the fractional Laplacian[J]. Communications in partial differential equations, 2007, 32(8):1245-1260.
- [20] YUAN H F. An efficient spectral-Galerkin method for fractional reaction-diffusion equations in unbounded domains[J]. Journal of computational physics, 2021, 428: 110083.
- [21] 林伟川, 罗旭丹. 合流超几何函数的零点性质[J]. 数学物理学报, 2017, 37(5):801-807.

An inverse problem of fractional diffusion equations: based on the spectral method and PINNs method

WU Qianwen, MA Feiyao

(School of Mathematics and Statistics, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

Abstract: This paper proposes an approach based on Physics-Informed Neural Networks (PINNs) to address the parameter inversion problem for fractional diffusion equations on unbounded domains, which lack effective algorithms. Firstly, the non-local fractional diffusion equation is transformed into a higher-dimensional local equation through the extension technique to overcome numerical difficulties caused by nonlocality. Subsequently, PINNs are utilized to determine both the spectral expansion coefficients of the local equation and the inversion parameters values, addressing numerical challenges on unbounded domains. Lastly, the effectiveness of the proposed algorithm is demonstrated with numerical experiments.

Keywords: fractional diffusion equations; parameter inversion; physics-informed neural networks; extension technique; spectral method

(责任编辑 史小丽)