

DOI: 10.16452/j.cnki.sdkjzk.2020.06.010

文章编号:1672-3767(2020)06-0077-08

引用格式:刘艳杰,王迎美,李功胜.时间分数阶扩散方程微分阶数与扩散系数联合反演的贝叶斯方法[J].山东科技大学学报(自然科学版),2020,39(6):77-84.

LIU Yanjie, WANG Yingmei, LI Gongsheng. Joint inversion by Bayesian method for the fractional order and diffusion coefficient in the time fractional diffusion equation[J]. Journal of Shandong University of Science and Technology (Natural Science), 2020, 39(6): 77-84.

# 时间分数阶扩散方程微分阶数与扩散系数 联合反演的贝叶斯方法

刘艳杰,王迎美,李功胜

(山东理工大学 数学与统计学院, 山东 淄博 255049)

**摘要:**应用贝叶斯方法对同时确定时间分数阶扩散方程的微分阶数与扩散系数的反问题进行统计反演。依据待参数的先验信息和观测数据的随机扰动建立联合先验分布与似然函数,进而基于贝叶斯推断得到联合后验概率密度分布,再应用马尔可夫链蒙特卡罗算法对后验空间进行抽样获得参数估计值。模拟计算结果表明,这种贝叶斯反演方法不依赖梯度计算和初值选取且可获得参数的统计特征,是一种有效的统计反演方法。

**关键词:**时间分数阶扩散方程;参数反演;贝叶斯方法;马尔可夫链蒙特卡罗算法

中图分类号:O212.8; O175.29

文献标志码:A

## Joint inversion by Bayesian method of fractional order and diffusion coefficient in time fractional diffusion equation

LIU Yanjie, WANG Yingmei, LI Gongsheng

(School of Mathematics and Statistics, Shandong University of Technology, Zibo, Shandong 255049, China)

**Abstract:** This paper deals with an inverse problem of determining the fractional order and the diffusion coefficient in the time fractional diffusion equation from uncertainty quantification using Bayesian method. The joint prior distribution and the likelihood function were established based on the parameters' prior information and random noise of the measured data respectively. The joint posterior probability density function was obtained by Bayesian theorem. The inversion values of the two parameters were estimated by using Markov chain Monte Carlo (MCMC) algorithm for the posterior space sampling. The simulation results show that the proposed inversion algorithm, which can obtain the statistical characteristics of the parameters without depending upon gradient computation and initial choice, is an effective statistical inversion method.

**Key words:** time fractional diffusion equation; parameter inversion; Bayesian method; Markov chain Monte Carlo algorithm(MCMC)

近二十年来,分数阶微积分及反常扩散模型在物理学、力学、材料科学、环境科学与水文地质学等领域得

收稿日期:2019-04-24

基金项目:国家自然科学基金项目(11871313)

作者简介:刘艳杰(1994—),女,山东东营人,硕士研究生,主要从事数学物理反问题的研究。

李功胜(1966—),男,河南新乡人,教授,博士生导师,主要从事数学物理反问题及其应用研究,本文通信作者。

E-mail: ligs@sdut.edu.cn

到了广泛的应用<sup>[1-4]</sup>。分数阶反常扩散方程相关反问题研究受到越来越多的关注。对于时间分数阶扩散方程,时间微分阶数反映了反常扩散的遗传特性和整体性,扩散系数主要反映了介质属性和扩散速率,两类参数在反常扩散模型模拟中起着非常重要的作用。实际的扩散问题中,微分阶数与扩散系数往往都是未知的,需要依据扩散基本模型和附加信息加以识别确定,这就形成一类关于微分阶数与扩散系数的双参数联合反演问题。对于时间分数阶扩散方程单纯确定微分阶数或者确定扩散系数的反问题有一些研究<sup>[5-7]</sup>,但对于同时确定微分阶数与扩散系数的反问题研究相对较少。文献[8]证明了在脉冲初值条件下,应用单边测量数据确定时间微分阶数与空间依赖扩散系数反问题的唯一性;文献[9]在一类逼近空间中,应用 Levenberg-Marquart 算法给出这类反问题的数值反演;文献[10]考虑光滑初值条件下这类双参数反问题的唯一性,并应用一种最佳摄动量正则化算法给出扰动数据下的数值反演。2015—2016年,文献[11-12]对于一般时间分数阶扩散方程同时确定多个微分阶数与模型参数的反问题,应用解析方法证明了多参数联合反演的唯一性。

上述研究或是给出了这类参数联合反演问题的唯一性,或是应用梯度型算法及正则化策略进行了数值反演模拟,均是反常扩散相关反问题研究的主要方面。从模拟计算的角度看,传统的反演方法大都基于误差泛函的极小化,通过正则化策略、梯度计算与迭代方法获得反演解的点估计,不仅算法依赖于梯度计算和初值选取,而且忽略了由于模型近似和数据扰动等因素造成的反演解的不确定性。近年来,随着计算技术的进步和解决实际问题的需要,不确定性量化与统计计算方法研究受到关注,其中贝叶斯推断方法在数学物理反问题研究中得到了广泛应用。

贝叶斯方法主要通过融合先验信息与样本知识得到后验分布,进而获得研究对象的统计特征。由于后验分布往往没有显性的表达式,借助马尔可夫链蒙特卡洛(Markov chain Monte Carlo, MCMC)抽样技术的 Bayesian-MCMC 方法成为实现参数统计特征反演的主要途径。Wang 等<sup>[13-15]</sup>较早探讨了参数反演问题的贝叶斯方法;Yan 等<sup>[16]</sup>应用 Bayesian-MCMC 方法研究了一维热传导方程时间依赖 Robin 系数的统计特征反演;朱嵩等<sup>[17-18]</sup>研究了水文地质与水环境模型源项系数反演的贝叶斯算法;Yan 等<sup>[19]</sup>通过构建替代模型提出贝叶斯反演的 L1-SCM 算法,并给出了二维时间分数阶扩散方程的微分阶数与点源位置参数联合反演的算例;Jia 等<sup>[20]</sup>应用贝叶斯方法研究了基于变指标 Besov 先验的函数重建问题;Fan 等<sup>[21]</sup>应用贝叶斯方法研究了一类反常分形扩散模型的多参数反演问题;Hu 等<sup>[22]</sup>提出了无穷维贝叶斯推断的一种自适应预处理 Crank-Nicolson MCMC 算法;Yan 等<sup>[23]</sup>给出了基于替代模型的贝叶斯反演算法的收敛性。最近,Iglesias 等<sup>[24]</sup>应用贝叶斯方法研究了一类带有移动边界的树脂传输模型的参数反演;Zhang 等<sup>[25]</sup>对于时间-空间分数阶扩散方程微分阶数和源项联合反演的贝叶斯方法进行了研究;Hoang 等<sup>[26]</sup>应用贝叶斯方法研究了一个椭圆方程具有局部周期的两尺度系数的反演重建问题;Yan 等<sup>[27]</sup>基于混合多项式展开技术,提出了参数反问题贝叶斯求解的多保真加速算法。

虽然贝叶斯方法应用于数理方程反问题的求解已有不少研究,但多侧重于后验分布的抽样算法及其加速收敛问题或者先验信息与正则化策略的融合问题,对于似然函数及其参数的选取以及附加数据对算法的影响等问题研究相对较少。本研究主要探究一个时间分数阶扩散方程中微分阶数与扩散系数联合反演的贝叶斯方法。这类参数联合反演问题在一定条件下具有唯一性,文献[10]应用最佳摄动量正则化算法实现了不同参数取值条件下的数值反演。本研究应用 Bayesian-MCMC 算法给出这一反问题的统计特征反演,并讨论似然函数的方差与附加数据量的选取对反演算法的影响。

## 1 正问题与差分格式

### 1.1 正问题

考虑一个时间分数阶扩散方程的初边值问题:

$$\begin{aligned} \partial_t^\alpha u(x, t) &= Du(x, t), 0 < x < 1, 0 < t < 1, \\ u(x, 0) &= g(x), 0 \leq x \leq 1, \\ u_x(0, t) &= u_x(1, t) = 0, 0 < t \leq 1. \end{aligned} \quad (1)$$

这里,  $u(x, t)$  表示一种物质在空间点  $x$  处、时刻  $t$  时的浓度;  $D > 0$  是扩散系数;  $u_{xx}(x, t)$  表示  $u(x, t)$  关于

空间变量  $x$  的二阶偏导数;  $g(x)$  是  $t=0$  时的初始浓度分布;  $0 < \alpha < 1$  是关于时间的分数微分阶数;  $\partial_t^\alpha u(x, t)$  是 Caputo 意义下的分数阶导数, 定义为:

$$\partial_t^\alpha u(x, t) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{\partial u(x, \tau)}{\partial \tau} \frac{d\tau}{(t-\tau)^\alpha}, 0 < \alpha < 1. \quad (2)$$

当微分阶数  $\alpha$ 、扩散系数  $D$  以及初始分布  $g(x)$  均已知且满足相容条件时, 式(1)是一个适定的正问题, 其数值求解已有不少研究。为了内容的完整性, 下面给出式(1)的差分格式。

## 1.2 差分格式

设  $x_i = ih, i=0, 1, 2, \dots, M, t_j = j\tau, j=0, 1, 2, \dots, N$ , 其中  $h=1/M$  和  $\tau=1/N$  分别表示空间和时间步长。记  $u_i^j \approx u(x_i, t_j)$ , 分别对时间分数阶导数和空间二阶导数进行离散并略去高阶项, 可得:

$$\sum_{k=0}^j (u_i^{j+1-k} - u_i^{j-k}) [(k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}] = \frac{D\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)}{h^2} (u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}), i=1, 2, \dots, M-1.$$

进一步, 记  $p = \frac{D\tau^\alpha \Gamma(2-\alpha)}{h^2}$ , 即得:

$$-pu_{i+1}^{j+1} + (1+2p)u_i^{j+1} - pu_{i-1}^{j+1} = u_i^j - \sum_{k=0}^j (u_i^{j+1-k} - u_i^{j-k}) [(k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}]. \quad (3)$$

相应地, 式(1)中的初边值条件离散为:

$$u_i^0 = g(x_i), u_0^j = u_1^j, u_{M-1}^j = u_M^j.$$

因此, 可得隐式差分格式如下:

$j=0$  时,

$$-pu_{i+1}^1 + (1+2p)u_i^1 - pu_{i-1}^1 = u_i^0; \quad (4)$$

$j>0$  时,

$$\begin{aligned} & -pu_{i+1}^{j+1} + (1+2p)u_i^{j+1} - pu_{i-1}^{j+1} \\ & = (2-2^{1-\alpha})u_i^j - \sum_{k=1}^{j-1} u_i^{j-k} [2(k+1)^{1-\alpha} - (k+2)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}] + u_i^0 [(j+1)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha}]. \end{aligned} \quad (5)$$

应用矩阵表示, 式(4)~(5)即为:

$$\begin{cases} \mathbf{A}\mathbf{U}^1 = \mathbf{U}^0; \\ \mathbf{A}\mathbf{U}^{n+1} = c_1\mathbf{U}^n + c_2\mathbf{U}^{n-1} + \dots + c_n\mathbf{U}^1 + b_n\mathbf{U}^0; \\ \mathbf{U}^0 = \mathbf{G}. \end{cases} \quad (6)$$

其中

$$\begin{cases} \mathbf{U}^k = [u_1^k, u_2^k, \dots, u_{M-1}^k]^T; \\ \mathbf{G} = [g(x_1), g(x_2), \dots, g(x_{M-1})]^T; \\ c_k = 2k^{1-\alpha} - (k+1)^{1-\alpha} - (k-1)^{1-\alpha}, k=1, 2, \dots, j; \\ b_j = (j+1)^{1-\alpha} - j^{1-\alpha}, j=1, 2, \dots, N-1. \end{cases} \quad (7)$$

系数矩阵  $\mathbf{A} = (a_{il})_{(M-1) \times (M-1)}$ ,

其中:

当  $i, l=1, 2, \dots, M-1$  时,

$$a_{il} = \begin{cases} -p, & l=i \pm 1; \\ 0, & \text{其他}. \end{cases} \quad (8)$$

当  $i, l=2, \dots, M-2$  时,

$$a_{ii} = 1+2p; a_{11} = a_{M-1, M-1} = 1+p. \quad (9)$$

关于差分格式(6)的稳定性与收敛性, 有下述结论:

**引理 1**<sup>[28]</sup> 对于正问题(1), 差分求解格式(6)是无条件稳定的。

**引理 2**<sup>[28]</sup> 设  $u_i^j$  是由格式(6)计算出来的关于  $u(x_i, t_j)$  的差分解, 则存在常数  $C > 0$ , 使得

$|u(x_i, t_j) - u_i^j| \leq C(\tau + h^2) (i=1, 2, \dots, M-1; j=1, 2, \dots, N)$  成立。

## 2 反问题与反演模型

对于正演模型(1), 微分阶数  $\alpha \in (0, 1)$  表示反常扩散的时间记忆特征, 扩散系数  $D$  表示介质的属性及扩散速率, 这两个参数在实际问题中都是难以直接测量获取的。基于(1), 并根据额外的一些观测信息, 形成一个确定微分阶数与扩散系数的反问题。文中考虑附加信息为区域右边界处的观测数据:

$$u(1, t) = h(t), 0 < t \leq 1. \quad (10)$$

对于由式(1)和式(10)形成的双参数反演问题, 根据文献[8, 10]中的研究结果可以证明反演解具有唯一性。

**命题 1** 设微分阶数  $\alpha \in (0, 1)$ , 扩散系数  $D > 0$ , 则双参数反问题(1)和(10)具有唯一解。

**证明:** 分两种情况证明。设初值为特殊的 Delta 函数, 即  $g(x) = \delta(x)$ 。注意到扩散系数  $D$  为一个正数, 则根据文献[8]的方法, 即知  $\alpha$  与  $D$  可由边值数据  $u(1, t) (0 < t < T)$  唯一确定。

若初值取为一般的光滑函数, 此时对于一般的扩散系数, 反演的唯一性需要两个边界处的观测数据或者扩散系数的额外信息。不过, 注意到扩散系数恒为正数, 其在区间  $[0, 1]$  上满足对称性条件, 则依据文献[10]中的证明方法, 可知该反问题的解唯一。证毕。

为便于讨论和书写, 记  $\theta = (\alpha, D)$  及  $I = (0, 1) \times (0, \theta)$ , 这里  $\theta < +\infty$  为给定的正数。对于任意给定的  $\theta \in I$ , 求解正问题得到的解记为  $u(\theta)(x, t)$ 。结合附加条件(10), 反问题首先可化为时间域  $t \in (0, 1]$  上一个方程的求解

$$h(t) = u(\theta)(1, t). \quad (11)$$

考虑到实际观测数据和计算数据的离散性, 上式左右两端对应离散后分别记为  $\mathbf{Y}$  与  $F(\theta)$ , 则得到一个有限维的随机反演模型

$$\mathbf{Y} = F(\theta) + \epsilon. \quad (12)$$

其中:  $F(\theta)$  是给定参数时的正问题计算值;  $\theta = (\alpha, D)$  是需要评估反演的模型参数;  $\mathbf{Y} = h(t)$  表示观测数据向量;  $\epsilon$  表示反演模型的随机误差, 包括数据测量误差、正问题计算误差及计算机舍入误差等, 一般服从于均值为 0、方差为  $\sigma^2$  的高斯分布。

以下主要应用贝叶斯方法求解模型(12), 获得参数  $\theta = (\alpha, D)$  的分布值及其统计特征。

## 3 贝叶斯推理与 MCMC 算法

### 3.1 贝叶斯推理

对于反演模型(12), 记  $p(\theta)$  是待估参数的先验分布概率密度函数,  $p(\mathbf{Y}|\theta)$  是似然函数, 表示给定参数取值时观测数据分布的条件概率, 则有贝叶斯公式

$$p(\theta|\mathbf{Y}) = \frac{p(\theta)p(\mathbf{Y}|\theta)}{p(\mathbf{Y})}. \quad (13)$$

其中  $p(\theta|\mathbf{Y})$  表示参数的后验分布概率密度函数。这里的反演即是要求出在给定观测数据  $\mathbf{Y}$  的条件下使得后验分布概率最大的参数分布。由于  $p(\mathbf{Y})$  是积分常量, 具体计算中(13)式常写为:

$$p(\theta|\mathbf{Y}) \propto p(\theta)p(\mathbf{Y}|\theta). \quad (14)$$

贝叶斯反演是基于(14)式的一种参数估计方法, 其实施步骤为:

第 1 步: 依据待估参数的先验信息, 得到先验概率密度函数  $p(\theta)$ ;

第 2 步: 根据待估参数和测量数据的关系, 提出一个似然函数  $p(\mathbf{Y}|\theta)$ ;

第 3 步: 根据(14)式计算得到待估参数的后验概率密度函数  $p(\theta|\mathbf{Y})$ ;

第 4 步: 在后验状态空间进行抽样, 建立后验分布的近似分布, 取其统计量即为待估参数的反演值。

根据先验信息, 获得待估参数的先验概率分布是实现贝叶斯算法的前提。历史经验或专家经验是重要

的参考,常用的先验分布有高斯分布、均匀分布和马尔可夫随机场等。注意到这里的待估参数是落于区域  $I$  的正常数,假设均服从均匀分布,即  $\alpha \sim U(0,1)$ ,  $D \sim U(0,5)$ ,则有:

$$p(\alpha) = \begin{cases} 1, & \alpha \in [0,1]; \\ 0, & \text{其他。} \end{cases} \quad (15)$$

及

$$p(D) = \begin{cases} 0.2, & D \in [0,5]; \\ 0, & \text{其他。} \end{cases} \quad (16)$$

进一步假设微分阶数与扩散系数相互独立,则有:

$$p(\theta) = p(\alpha)p(D) = \begin{cases} 0.2, & 0 < \alpha < 1, 0 < D < 5; \\ 0, & \text{其他。} \end{cases} \quad (17)$$

似然函数表征了模型参数拟合观测数据的程度,其值越大则拟合效果越好。在反演模型(12)中,假设误差  $\epsilon$  服从均值为 0、方差为  $\sigma^2$  的正态分布,则有:

$$p(\theta | \mathbf{Y}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{n}{2}}} \exp\left(-\frac{(F(\theta) - \mathbf{Y})'(F(\theta) - \mathbf{Y})}{2\sigma^2}\right). \quad (18)$$

其中  $n$  表示观测数据向量  $\mathbf{Y}$  的维数,即观测数据的多少。综上,根据贝叶斯公式即得:

$$p(\theta | \mathbf{Y}) = \begin{cases} \lambda \exp\left(-\frac{(F(\theta) - \mathbf{Y})'(F(\theta) - \mathbf{Y})}{2\sigma^2}\right), & 0 < \alpha < 1, 0 < D < 5; \\ 0, & \text{其他。} \end{cases} \quad (19)$$

这里  $\lambda = \frac{1}{5(2\pi\sigma^2)^{\frac{n}{2}} p(\mathbf{Y})}$ 。

通过(19)式即可计算出参数的后验概率密度函数。然而,由于正演关系  $F(\theta)$  较为复杂难以解析表达,使得后验概率密度  $p(\theta | \mathbf{Y})$  很难直观表示出来。为了获得参数估计值,需要采用特定的随机抽样方法去获得待估参数的近似分布,再利用这个近似分布的统计量作为待估参数的估计值。常用的随机抽样方法是马尔可夫链蒙特卡洛方法。

### 3.2 MCMC 方法

目前,MCMC 方法已成为贝叶斯推理中后验抽样的标准方法。在 MCMC 方法应用中,有两个较为重要的算法:Metropolis-Hasting 算法(简称 M-H 算法)和 Gibbs 算法。本研究采用 M-H 算法对后验状态空间进行抽样,算法步骤如下:

- 1) 在模型参数先验范围内,设定初始值  $\theta^i (i=1)$ ;
- 2) 利用当前参数计算正问题,获得该参数对应的条件概率密度  $p(\theta^i | \mathbf{Y})$ ;
- 3) 根据参数的建议分布,在当前参数状态下提取新的测试参数  $\theta^*$ ,并计算该参数对应的条件概率密度  $p(\theta^* | \mathbf{Y})$ ;
- 4) 生成  $[0,1]$  区间均匀分布的随机数  $\alpha$ ;如果  $\alpha < \min\{1, \frac{p(\theta^* | \mathbf{Y}) \cdot q(\theta^i | \theta^*)}{p(\theta^i | \mathbf{Y}) \cdot q(\theta^* | \theta^i)}\}$ ,则接受该测试参数并设为当前模型参数,即  $\theta^{i+1} = \theta^*$ ;否则不接受,即  $\theta^{i+1} = \theta^i$ ;
- 5) 重复步骤 3) 和 4),直至达到迭代次数。

## 4 数值反演

本节应用上述 Bayesian-MCMC 算法对参数反问题进行数值反演。不失一般性,取微分阶数真值为  $\alpha = 0.8$ ,扩散系数真值  $D = 1.5$ ,即  $\theta = (0.8, 1.5)$ 。利用该参数真值及差分格式(6)求解正问题,得到附加数据向量  $\mathbf{Y}$ ,另取待估参数的建议分布为均匀分布:  $q(\theta^* | \theta^i) = U(\theta^i - \Delta\theta, \theta^i + \Delta\theta)$ ,且设步长为先验范围的 5%。

对于本研究的双参数反演问题,有两个参数的选取值得关注,一是向量  $\mathbf{Y}$  的维数,即附加数据的个数  $n$ ;二是似然函数的标准差  $\sigma$ 。此外,若无特殊说明,反演中的参数初始值均在先验限定范围内随机产生,反演

迭代总次数取为 10 000 次。首先考察使用较多附加数据情况下,似然函数的标准差对反演算法的影响。

#### 4.1 $n=100$ , 似然函数标准差的影响

设附加数据向量  $Y$  的维数  $\dim(Y)=100$ , 即  $n=100$ 。又设似然函数的标准差  $\sigma \in [2 \times 10^{-5}, 5 \times 10^{-3}]$ , 对于不同的标准差分别进行反演计算得到微分阶数与扩散系数的后验均值。图 1 绘制了联合反演误差 error 随似然函数的标准差  $\sigma$  的变化曲线, 这里联合反演误差表示为:

$$error = \frac{1}{2} \left( \frac{|E(\alpha) - \alpha_{true}|}{\alpha_{true}} + \frac{|E(D) - D_{true}|}{D_{true}} \right). \quad (20)$$

其中  $E(\cdot)$  表示后验均值。

分析图 1 发现, 标准差取  $8 \times 10^{-5} \sim 1.5 \times 10^{-3}$  时, 反演参数的均值误差在较小的范围内波动, 反演结果较好。取  $\sigma = 1 \times 10^{-4}$  进行反演计算, 图 2(a)、图 2(b) 分别绘制了反演值随迭代次数的变化曲线与反演参数的后验直方图。

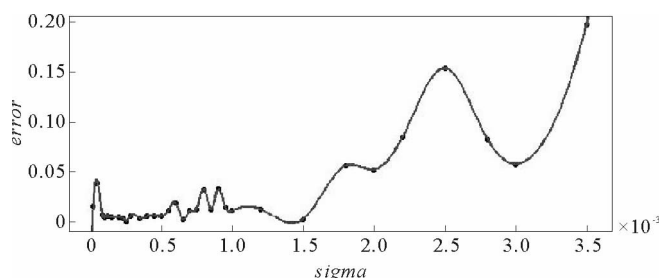


图 1 反演误差与似然函数的标准差

Fig. 1 Inversion error and standard deviation of likelihood function

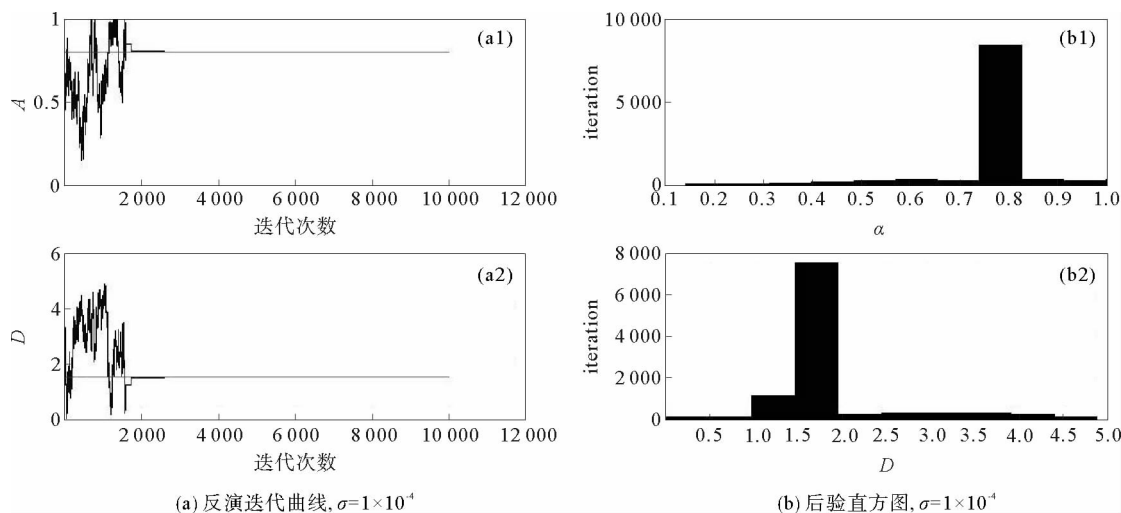


图 2  $\sigma = 1 \times 10^{-4}$  时反演迭代曲线与后验直方图

Fig. 2 Inversion iterative curve and posterior histogram, when  $\sigma = 1 \times 10^{-4}$

从图 2(a)可以看出, 马尔可夫链在经历了 2 000 次迭代后即达到收敛状态, 微分阶数与扩散系数均收敛到真值左右。从图 2(b)看出, 参数反演值分别出现在 0.8 和 1.5 左右的概率最大, 这与参数真值吻合。此外, 采用后 8 000 次的反演数据统计计算两个参数的中位数和均值, 统计结果列于表 1。从表 1 看出, 中位数和均值反演值均收敛于参数真值, 微分阶数反演的最大误差不超过 0.204 3%, 扩散系数反演的最大误差不超过 0.778 8%。

#### 4.2 $\sigma = 8 \times 10^{-5}$ , 附加数据向量维数的影响

取定  $\sigma = 8 \times 10^{-5}$ , 其他参数及符号表示同上, 考察附加数据向量维数变化对反演算法的影响。为了均衡计算过程的随机性, 计算结果取 5 次反演的平均值。表 2 给出了附加数据向量维数  $n=100, n=40, n=20$  与  $n=10$  时的平均反演结果, 其中  $Err$  表示平均反演误差,  $T_{cpu}$  表示平均的 CPU 运行时间。

从表 2 的计算结果看出, 附加数据向量的维数对反演算法的影响较小。随着附加数据的减少, 反演误差与运算时间的变化幅度均不大。同时表明, 附加数据的个数不宜取得过多, 这表现出与最佳摄动量算法等梯

度型反演方法相似的特点。

表 1  $\sigma=1\times 10^{-4}$  时的反演统计结果

Tab. 1 Inversion statistical results, when  $\sigma=1\times 10^{-4}$

迭代次数	参数	真值	后验均值	均值误差/%	后验中位数	中位数误差/%
10 000	$\alpha$	0.8	0.801 635	0.204 3	0.801 329	0.166 2
	$D$	1.5	1.488 318	0.778 8	1.490 479	0.634 7

## 5 结论

本研究应用 Bayesian-MCMC 方法给出了时间分数阶扩散方程微分阶数与扩散系数的统计反演,并探讨了似然函数标准差与附加数据向量维数的不同选取对反演算法的影响。模拟计算结果表明,贝叶斯反演方法不依赖误差泛函的梯度计算和未知量的初值选取,对于相对复杂模型的多参数反演是有效的。反演计算中似然函数的方差既不能太小也不能太大。当方差落在一个可行区间时,反演结果较好。此外,附加数据向量的维数对反演算法几乎没有影响,但附加数据的个数不宜过多。

### 参考文献:

- [1] HATANO Y, HATANO N. Dispersive transport of ions in column experiments: An explanation of long-tailed profiles[J]. Water Resources Research, 1998, 34(5): 1027-1033.
- [2] HILFER R. Applications of fractional calculus in physics[M]. Singapore: World Scientific, 2000: 377-463.
- [3] MAGIN R. Fractional calculus in bioengineering[M]. Redding: Begell House Inc, 2006: 137-155.
- [4] MAINARDI F. Fractional calculus and waves in linear viscoelasticity: An introduction to mathematical models[M]. London: Imperial College Press, 2010: 57-74.
- [5] TATAR S, ULUSOY S. A uniqueness result for an inverse problem in a space-time fractional diffusion equation[J]. Electronic Journal of Differential Equations, 2013, 258: 1-9.
- [6] 贾现正, 张大利, 李功胜, 等. 空间-时间分数阶变系数对流扩散方程微分阶数的数值反演[J]. 计算数学, 2014, 36(2): 113-132.
- [7] JIA Xianzheng, ZHANG Dali, LI Gongsheng, et al. Numerical inversion of the fractional orders in the space-time fractional advection-diffusion equation with variable coefficients[J]. Mathematica Numerica Sinica, 2014, 36(2): 113-132.
- [8] ZHANG Z D. An undetermined coefficient problem for a fractional diffusion equation[J]. Inverse Problems, 2016, 32: 015011.
- [9] CHENG J, NAKAGAWA J, YAMAMOTO M, et al. Uniqueness in an inverse problem for a one-dimensional fractional diffusion equation[J]. Inverse Problems, 2009, 25(11): 115002.
- [10] BONDARENKO A N, IVASCHENKO D S. Numerical methods for solving inverse problems for time fractional diffusion equation with variable coefficient[J]. Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, 2009, 17(5): 419-440.
- [11] LI G S, ZHANG D L, JIA X Z, et al. Simultaneous inversion for the space dependent diffusion coefficient and the fractional order in the time-fractional diffusion equation[J]. Inverse Problems, 2013, 29(6): 065014.
- [12] LI Z Y, YAMAMOTO M. Uniqueness for inverse problems of determining orders of multi-term time-fractional derivatives of diffusion equation[J]. Applicable Analysis, 2015, 94(3): 570-579.
- [13] LI Z Y, IMANUVILOV O Y, YAMAMOTO M. Uniqueness in inverse boundary value problems for fractional diffusion equations[J]. Inverse Problems, 2016, 32(1): 015004.
- [14] WANG J B, ZABARAS N. Hierarchical Bayesian models for inverse problems in heat conduction[J]. Inverse Problems, 2005, 21(1): 183-206.
- [15] KAIPPIO J, SOMERSALO E. Statistical and computational inverse problems[M]. New York: Springer, 2005: 49-112.

表 2  $\sigma=8\times 10^{-5}$ , 附加数据向量维数与反演结果

Tab. 2 Inversion results with dimension of additional data vector, when  $\sigma=8\times 10^{-5}$

$n$	$Err/\%$	$T_{CPU}/s$
100	0.785 61	744.87
40	0.582 19	657.86
20	0.652 95	735.38
10	0.812 17	713.67

- [15] JIN B T, ZOU J. A Bayesian inference approach to the ill-posed Cauchy problem of steady-state heat conduction[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2008, 76(4): 521-544.
- [16] YAN L, YANG F L, FU C L. A Bayesian inference approach to identify a Robin coefficient in one-dimensional parabolic problems[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2009, 231(2): 840-850.
- [17] 朱嵩, 刘国华, 王立忠, 等. 水动力-水质耦合模型污染源识别的贝叶斯方法[J]. 四川大学学报(工程科学版), 2009, 41(5): 30-36.  
ZHU Song, LIU Guohua, WANG Lizhong, et al. A Bayesian approach for the identification of pollution source in water quality model coupled with hydrodynamics[J]. Journal of Sichuan University (Engineering Science Edition), 2009, 41(5): 30-36.
- [18] 陈海洋, 滕彦国, 王金生, 等. 基于 Bayesian-MCMC 方法的水体污染识别反问题[J]. 湖南大学学报(自然科学版), 2012, 39(6): 74-79.  
CHEN Haiyang, TENG Yanguo, WANG Jinsheng, et al. Event source identification of water pollution based on Bayesian-MCMC[J]. Journal of Hunan University (Natural Science Edition), 2012, 39(6): 74-79.
- [19] YAN L, GUO L. Stochastic collocation algorithms using  $L_1$  minimization for Bayesian solution of inverse problems[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2015, 37(3): A1410-A1435.
- [20] JIA J X, PENG J G, GAO J H. Bayesian approach to inverse problems for functions with a variable-index Besov prior[J]. Inverse Problems, 2016, 32(8): 085006.
- [21] FAN W P, JIANG X Y, CHEN S Z. Parameter estimation for the fractional fractal diffusion model based on its numerical solution[J]. Computers & Mathematics with Applications, 2016, 71(2): 642-651.
- [22] HU Z X, YAO Z W, LI J L. On an adaptive preconditioned Crank-Nicolson MCMC algorithm for infinite dimensional Bayesian inference[J]. Journal of Computational Physics, 2017, 332: 492-503.
- [23] YAN L, ZHANG Y X. Convergence analysis of surrogate-based methods for Bayesian inverse problems[J]. Inverse Problems, 2017, 33(12): 125001.
- [24] IGLESIAS M, PARK M, TRETYAKOV M V. Bayesian inversion in resin transfer molding[J]. Inverse Problems, 2018, 34(10): 105002.
- [25] ZHANG Y X, JIA J X, YAN L. Bayesian approach to a nonlinear inverse problem for a time-space fractional diffusion equation[J]. Inverse Problems, 2018, 34(12): 125002.
- [26] HOANG V H, QUEK J H. Bayesian inverse problems for recovering coefficients of two scale elliptic equations[J]. Inverse Problems, 2019, 35(4): 045005.
- [27] YAN L, ZHOU T. Adaptive multi-fidelity polynomial chaos approach to Bayesian inference in inverse problems[J]. Journal of Computational Physics, 2019, 381: 110-128.
- [28] 于强, 刘发旺. 时间分数阶反应-扩散方程的隐式差分近似[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2006, 45(3): 315-319.  
YU Qiang, LIU Fawang. Implicit difference approximation for the time-fractional order reaction-diffusion equation[J]. Journal of Xiamen University (Natural Science Edition), 2006, 45(3): 315-319.

(责任编辑: 刘西奎)