

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИНФОРМАТИКИ

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

**«РЕКОНСТРУКЦИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ПОРИСТЫХ СРЕД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ»**

Выполнил студент
235М группы:
Будакян Я. С.

Научный руководитель:
к.т.н., доц. Грачев Е. А.

Допущена к защите
Зав. кафедрой _____

Москва

2019

Содержание

ВВЕДЕНИЕ	3
1 Нейронные сети	8
1.1 Математическая модель нейрона	8
1.2 Метод обратного распространения ошибки	9
1.3 Сверточные нейронные сети	10
1.4 Генеративные состязательные сети	11
1.4.1 Общая структура	11
1.4.2 Обучение GAN	13
1.4.3 Модификации “DCGAN” и “3D-DCGAN”	14
1.4.4 Модификация процедуры обучения	15
2 Градиентные методы оптимизации	17
2.1 Градиентный спуск	17
2.2 Стохастический градиентный спуск	17
2.2.1 RMSprop	17
2.2.2 Adam	18
3 Верификация	19
3.1 Функционалы Минковского	19
3.1.1 Расчет для дискретного случая	19
3.2 Двухточечная корреляционная функция	19
4 Результаты вычислительного эксперимента	20
4.1 Набор данных Berea	20
4.2 Обучение нейросети	21
4.3 Реконструкции размера 64^3	21
4.3.1 Примеры	21
4.3.2 Анализ	22
4.4 Реконструкции размера 200^3	23
4.4.1 Примеры	23
4.4.2 Анализ	23
4.5 Реконструкции размера 400^3	24
4.5.1 Примеры	24

4.5.2 Анализ	24
ВЫВОДЫ	31
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	32
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	33
ПРИЛОЖЕНИЕ	35

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время для эффективной добычи полезных ископаемых (в частности, нефти и газа) широко применяется математическое моделирование для симуляции процессов переноса, происходящих в пласте. При этом, прямое моделирование невозможно как минимум из-за неполноты данных о среде, в которой эти процессы протекают (знаний о структуре и геометрии пласта). Эти данные доступны только в некотором количестве точек (скважин), из которых забирают пробу среды - керн. Керны представляют собой очень небольшой объем среды; если же говорить о данных компьютерной томографии керна, то она доступна на ещё более мелких масштабах - порядка микрометров. Получение дополнительных данных (например, новых кернов, компьютерной томографии) связано с большими затратами; при этом, многие эксперименты в реальности с керном можно провести только один раз, поскольку они необратимо влияют на керн. Таким образом, возникает проблема “апскейлинга” - правдоподобного переноса знаний о локальной структуре среды на большие масштабы, а так же проблема переиспользования керна для проведения разных экспериментов.

В последнее время исследуется возможность применения методов машинного обучения для решения задач в этой области. Одним из возможных подходов является реконструкция новых моделей геометрии среды на основе реальных образцов с использованием искусственных нейронных сетей. Керны на микромасштабе являются пористой средой, поэтому наличие устойчивого алгоритма реконструкции образцов пористой среды позволит:

- попробовать провести апскейлинг (реконструировать среду в большем размере, чем оригинальный доступный образец)
- проводить статистические эксперименты (моделировать процессы не только на оригинальном образце, но и на его реконструкциях, получая таким образом распределение а, не значение в одной точке)

Под образцом пористой среды в данном случае понимаются данные компьютерной томографии керна - трёхмерное бинарное изображение.

Широко известны подходы к задачам синтеза двухмерных изображений с

помощью искусственных нейросетей [4, 5], что мотивирует попробовать применить ИНС для задач реконструкции 3D-изображений.

Математически сформулировать постановку такой задачи реконструкции можно с помощью так называемой вероятностной постановки задачи обучения [6, 7].

Рассмотрим многомерное пространство X , содержащее множество всех трёхмерных бинарных изображений x : $X = \{x\}$. Пусть у нас есть обучающая выборка из изображений, содержащих в себе рассматриваемое множество интересующих нас образцов $D = \{x_i\}$. Тогда считается, что обучающая выборка изображений D задаёт в этом пространстве вероятностное распределение $P_X : X \rightarrow [0, 1]$, устроенное таким образом, что точки, соответствующие изображениям из выборки, имеют высокую вероятность, а остальные - низкую. Таким образом задача реконструкции образца пористой среды сводится к синтезу случайного изображения x' , принадлежащего распределению, близкому к задаваемому обучающей выборкой:

$$P_{X'} \approx P_X, \quad x' \sim X'$$

“Классический” статистический подход к решению подобного рода задач заключается в введении параметризованного семейства распределений вероятности и его подстройке на имеющихся данных:

- Вводится семейство распределений вероятности $P_\theta(x)$ с параметром θ
- Параметр θ находится из обучающей выборки:

$$\mathcal{L}_\theta(D) = \prod_{x \in D} P_\theta(x)$$

$$\theta^* = \arg \max_{\theta} \mathcal{L}_\theta(D)$$

- Генерируется объект (изображение) из распределения P_{θ^*}

Этот подход подвержен проблемам:

- Пространство параметров θ может быть огромной размерности
- Для сложных случаев невозможно априорно задать модель распределения

Простой пример объекта со сложным пространством параметров - человеческое лицо. Задачу генерации изображения реалистичного человеческого лица долгое время не могли решить с удовлетворительным качеством. Однако последние достижения в области искусственных нейронных сетей привели к существенному улучшению качества генеративных моделей самого различного типа. В частности, впечатляющие результаты были достигнуты с помощью генеративных состязательных сетей (GAN) [8, 9, 10, 11], что мотивирует попытку применения нейросетей этой архитектуры в поставленной задаче.

Постановка задачи

Для достижения обозначенных целей, поставить задачу данной работы можно так:

- Реализовать модифицированные для реконструкции образцов пористых сред архитектуры нейронных сетей
- Провести вычислительные эксперименты, связанные с обучением нейросетей (то есть, с решением задач многопараметрической оптимизации)
- Реконструировать с помощью обученных нейросетей новые образцы и провести их верификацию

Верификация реконструированных образцов основана на сохранении их топологических и статистических характеристик, а именно:

- Топологические: 4 первых функционала Минковского:
 - Объем
 - Площадь поверхности
 - Средняя кривизна
 - Характеристика Эйлера-Пуанкаре
- Статистические: двухточечная корреляционная функция

Подробное описание процедур верификации и используемых характеристик приведено в разделе 3.

Предшествующие работы

Рассмотренный подход к задаче уже исследовался [1]. В этой статье авторы используют архитектуры DCGAN [3] и 3D-GAN [2] для решения задачи реконструкции пористых сред. Один из своих экспериментов авторы проводили на тех же данных компьютерной томографии, что и в этой работе, что позволяет сравнивать полученные результаты. Основное отличие данной работы от [1] заключается в модификации процедуры обучения сетей для автоматического управления одним из гиперпараметров обучения - шага обучения (learning rate, LR). Более подробно модификация описана в разделе 1.4.4

1 Нейронные сети

ИНС - искусственная нейронная сеть - это математическая модель, построенная по принципу организации и функционирования биологических нейронных сетей. Она представляет собой систему соединённых простых блоков - искусственных нейронов, каждый из которых имеет входы и выходы для взаимодействия с другими нейронами. Главное преимущество нейронных сетей перед традиционными алгоритмами в том, что они обучаются на некотором наборе данных, а не программируются в классическом смысле этого понятия. Процесс обучения заключается в нахождении оптимальных весовых коэффициентов между нейронами. С математической точки зрения, процесс обучения - это задача многопараметрической нелинейной оптимизации.

1.1 Математическая модель нейрона

Одиночный нейрон обычно представляет собой взвешенный сумматор с нелинейной функцией активации на выходе:

$$x_{out} = \phi(\vec{w} \cdot \vec{x}_{in}),$$

где \vec{w} - вектор весовых коэффициентов связей, \vec{x}_{in} - входной вектор, ϕ - нелинейная функция активации (Рис. 1).

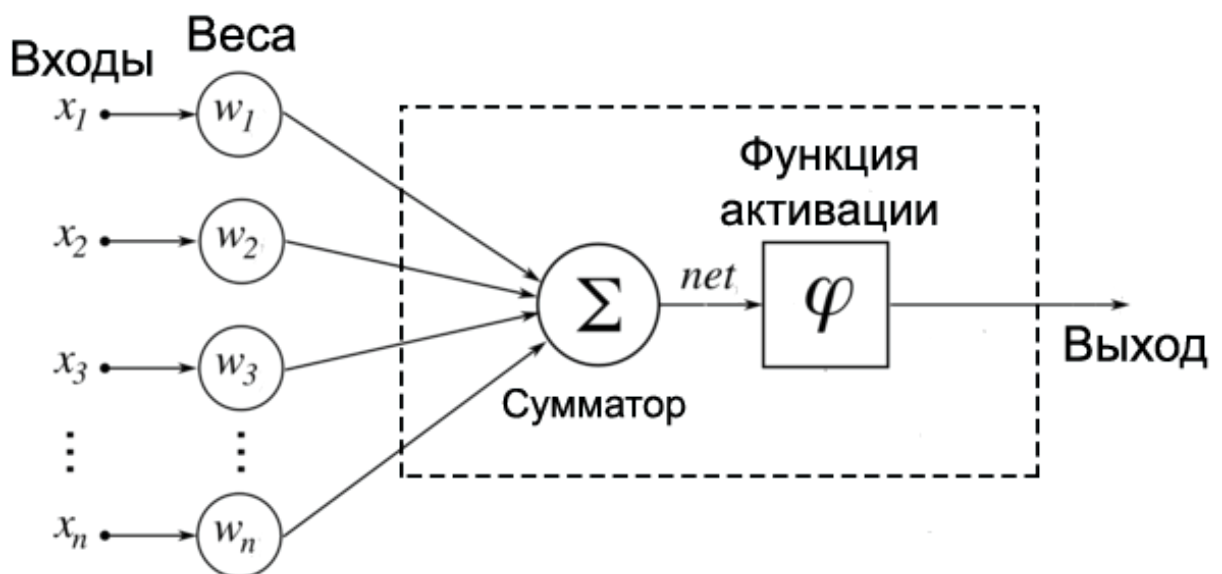


Рис. 1: Математическая модель нейрона

Функции активации могут выбираться разными в зависимости от задачи. Наиболее часто используемые функции:

- Сигмоида (логистическая функция)

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

- Гиперболический тангенс

- ReLU

$$ReLU(x) = \max(0, x)$$

- softmax

$$\sigma(\vec{x})_j = \frac{e^{x_j}}{\sum_{k=1}^N e^{z_k}}$$

Множество подобных нейронов соединяется в сеть и обучается с помощью метода обратного распространения ошибки вкупе с каким-либо методом численной оптимизации.

1.2 Метод обратного распространения ошибки

Метод обратного распространения ошибки (backpropagation) - самый широко используемый и успешный алгоритм обучения глубоких (многослойных) нейронных сетей. Суть метода заключается в распространении сигналов ошибки от выходов сети к ее входам в обратном к распространению сигнала в сети направлении. Это позволяет вычислить производные функционала ошибки по весам сети, которые потом можно использовать в любом градиентном алгоритме оптимизации (например, градиентном спуске).

Обозначим множество входов сети как $\{x_1, \dots, x_n\}$, множество выходов - O , w_{ij} - вес, присвоенный ребру, соединяющему i -й и j -й узлы, y_k - известные (правильные) ответы, o_i - выход i -го узла. Введём функцию ошибки (например, сумма квадратов расстояний):

$$L(\vec{x}, W) = \frac{1}{2} \sum_{k \in O} (y_k - o_k)^2,$$

где $W = \{w_{ij}\}$ - матрица весовых коэффициентов

Рассмотрим сначала нейроны последнего слоя. Весовой коэффициент w_{ij} влияет на выход сети как часть суммы $S_j = \sum_i w_{ij}x_i$. Соответственно,

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial L}{\partial S_j} \frac{\partial S_j}{\partial w_{ij}} = x_i \frac{\partial L}{\partial S_j}$$

Аналогично, S_j влияет на общую ошибку только в рамках выхода j -го узла o_j , поэтому

$$\frac{\partial L}{\partial S_j} = \frac{\partial L}{\partial o_j} \frac{\partial o_j}{\partial S_j} = \left(\frac{\partial}{\partial o_j} \frac{1}{2} \sum_{k \in Out} (y_k - o_k)^2 \right) \left(\frac{\partial \phi(S)}{\partial S} \Big|_{S=S_j} \right)$$

Если узел j не находится на последнем слое, то у него есть набор связей с нейронами следующего слоя. Обозначим их множество как K_j . Тогда

$$\frac{\partial L}{\partial S_j} = \sum_{k \in K_j} \frac{\partial L}{\partial S_k} \frac{\partial S_k}{\partial S_j}$$

$$\frac{\partial S_k}{\partial S_j} = \frac{\partial S_k}{\partial o_j} \frac{\partial o_j}{\partial S_j} = w_{jk} \frac{\partial o_j}{\partial S_j}$$

$\frac{\partial L}{\partial S_k}$ - аналогичная поправка, но для нейрона следующего слоя. В итоге, получены выражения для производных ошибки по весам для нейронов выходного слоя, а аналогичные производные для нейронов внутренних слоев выражены через нейроны следующих слоев. Это и есть процесс обратного распространения ошибки - градиенты ошибки по весам вычисляются последовательно, начиная с выходного слоя и заканчивая первым.

1.3 Сверточные нейронные сети

Сверточные нейронные сети (CNN - convolutional neural networks) - это специальная архитектура нейронной сети, нацеленная на эффективное распознавание изображений, впервые предложенная Яном Лекуном [12]. Структура такой сети имеет некоторое сходство со строением зрительной коры головного мозга. Свое название CNN получили из-за наличия сверточных слоев, в которых каждый фрагмент изображения умножается на ядро свертки, полученный результат суммируется и записывается в аналогичную позицию выходного изображения. Одно отдельное ядро свертки обычно интерпретиру-

ют как кодирование какого-либо признака изображения. При этом сами ядра выучиваются сетью самостоятельно, а не закладываются человеком. В CNN чередуются сверточные и субдискретизирующие слои, таким образом более глубокие сверточные слои могут выделять абстрактные детали изображения, вплоть до общих понятий, таких как “кошка”, “собака”, и т.п. На данный момент CNN являются наиболее популярным алгоритмом машинного обучения при работе с изображениями.

1.4 Генеративные состязательные сети

Архитектура нейронной сети, получившая название генеративной состязательной сети (generative adversarial network - GAN), впервые была описана в 2014 году [7]. За последнее время сети такого типа добились больших успехов в задачах синтеза объектов из сложных распределений. Этим объясняется мотивация попытки применения данной архитектуры для решения поставленной задачи.

1.4.1 Общая структура

Переформулируем изначальную задачу нахождения процедуры синтеза X' такой что $P_{X'} \approx P_X$:

$$\rho(P_{X'}, P_X) \longrightarrow \min_{P_{X'}}$$

Введём параметризованную процедуру генерации:

$$X' = g_{\theta}(\cdot)$$

Получаем:

$$\rho(P_{X'}, P_X) \longrightarrow \min_{P_{X'}}$$

$$\rho(g_{\theta}(\cdot), P_X) \longrightarrow \min_{g_{\theta}(\cdot)}$$

$$\rho(g_{\theta}(\cdot), P_X) \longrightarrow \min_{\theta}$$

В данном случае ρ выступает некоторой метрикой похожести двух вероятностных распределений. Идея GAN заключается в том, что в качестве такой метрики используется функционал ошибки другой нейросети - обученного

классификатора: чем чаще ошибается обученный классификатор, тем больше одно распределение похоже на другое. Тогда задача принимает вид:

$$\rho(P_{X'}, P_X) \longrightarrow \min \Leftrightarrow L \longrightarrow \max,$$

где L - функция потерь обученного классификатора. Соответственно, вводятся две нейросети:

- $d_\zeta(x)$ - классификатор для оценки ρ , “дискриминатор”
- $g_\theta(x)$ - сеть, трансформирующая шум в элементы множества X' , “генератор”

Суть использования двух сетей состоит в том, что они обучаются совместно, конкурируя друг с другом: генератор пытается имитировать целевое распределение, а дискриминатор классифицирует поступающие от генератора и из обучающей выборки изображения на 2 класса: реальные (из изначального распределения P_X) и ложные (из $P_{X'}$, т.е. синтезированные генератором). Сигнал от дискриминатора возвращается в генератор и используется для обучения генератора “обману” дискриминатора. Для дальнейшего рассмотрения введём функцию потерь дискриминатора (BCE - binary cross-entropy, logloss):

$$l_1 = l(d_\zeta(x), 1)$$

$$l_2 = l(d_\zeta(x'), 0)$$

$$\begin{aligned} L(X, X') &= \frac{1}{2} \mathbb{E}_X l_1 + \frac{1}{2} \mathbb{E}_{X'} l_2 = -\frac{1}{2} (\mathbb{E}_X \log d_\zeta(x) + \mathbb{E}_{X'} \log(1 - d_\zeta(x'))) = \\ &= -\frac{1}{2} (\mathbb{E}_X \log d_\zeta(x) + \mathbb{E}_V \log(1 - d_\zeta(g_\theta(v)))) = L(\zeta, \theta). \end{aligned}$$

Функция потерь обученного классификатора:

$$L^*(\theta) = \min_{\zeta} L(\zeta, \theta)$$

Соответственно,

$$\begin{aligned} \min_{\zeta} L(\zeta, \theta) &\longrightarrow \max_{\theta} \\ \theta^* &= \arg \max_{\theta} \left[\min_{\zeta} L(\zeta, \theta) \right] \end{aligned}$$

Определим оптимальный дискриминатор:

$$d_{\theta}^* = d_{\zeta^*(\theta)}$$

$$\zeta^*(\theta) = \arg \min_{\zeta} L(\zeta, \theta)$$

1.4.2 Обучение GAN

Итак, задача обучения GAN свелась к нахождению оптимальных весов генератора

$$\theta^* = \arg \max_{\theta} \left[\min_{\zeta} L(\zeta, \theta) \right]$$

Процесс обучения такой системы сетей принимает итеративный вид:

- Обучается дискриминатор при фиксированном генераторе
- Обучается генератор при фиксированном дискриминаторе
- Повторяется до сходимости параметров обеих моделей

Описанный процесс схематично изображён на (Рис. 2).

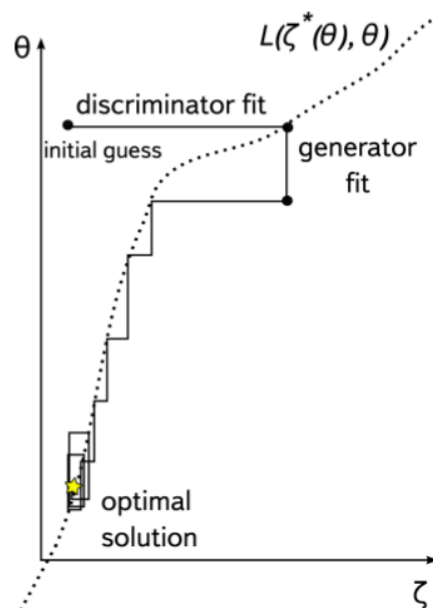


Рис. 2: Схематическое изображение процесса обучения GAN

1.4.3 Модификации “DCGAN” и “3D-DCGAN”

Модификация архитектуры GAN под названием DCGAN [3] была предложена в 2015 году и совершила прорыв в области синтеза изображений. Суть архитектуры заключается в нескольких принципах построения сетей и их обучения. Во-первых, использование свёрточных слоев и пакетной нормализации (batch normalization) как в генераторе, так и дискриминаторе. В генераторе, при этом, используются специальные обратные свёрточные слои (transposed convolution, deconvolution). Во-вторых, использование специальной функции активации в дискриминаторе - *LeakyReLU*:

$$LeakyReLU(x) = \begin{cases} 0.01x & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases}$$

Все эти идеи позволяют стабилизировать сложный процесс обучения GAN и увеличить качество синтезируемых объектов.

Архитектура 3D-DCGAN совмещает в себе идеи [3] и [2]. Основное отличие от обычной DCGAN состоит в том, что вместо двумерных свёрток во всех свёрточных слоях сетей используются трёхмерные, что и позволяет реконструировать трёхмерные среды.

Авторы [1] используют 3D-DCGAN для реконструкции пористых сред. Схема процесса обучения показана на (Рис. 3)

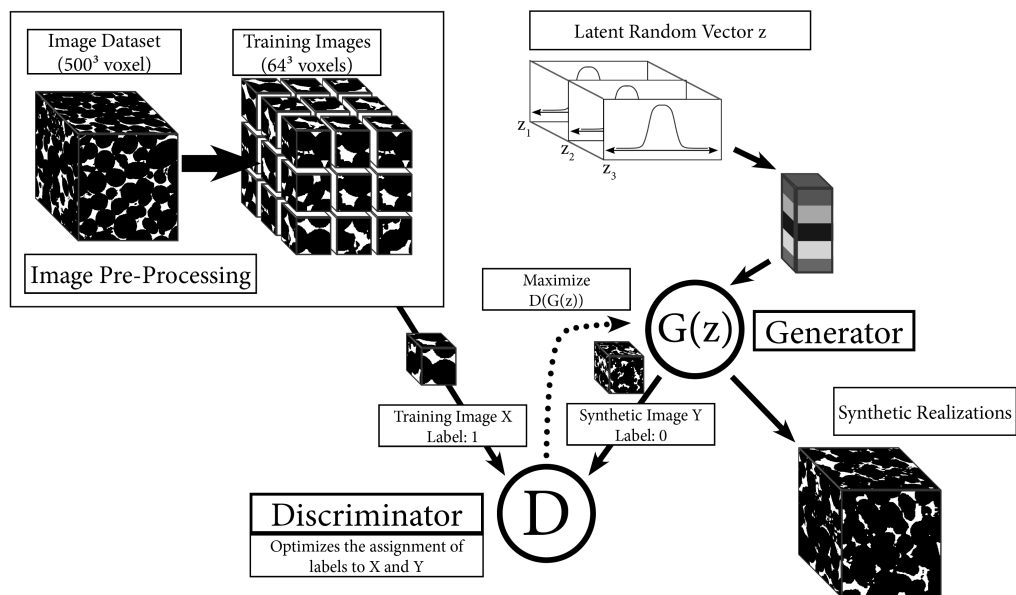


Рис. 3: Схема процесса обучения

Обучение 3D-GAN сводится к минимизации функционала:

$$\min_{\theta} \max_{\zeta} \mathbb{E}_{x \sim p_{data}} \log D_{\zeta}(x) + \mathbb{E}_{z \sim p_z} \log(1 - D_{\zeta}(G_{\theta}(z)))$$

1.4.4 Модификация процедуры обучения

Сеть, использованная в этой работе, полностью повторяет архитектуру сетей [1], однако в процедуру обучения сетей внесена модификация.

Скорость обучения - один из наиболее важных гиперпараметров (параметров, которые задаются человеком, а не оптимизируются в ходе процесса обучения). Её значение может радикально влиять на весь процесс сходимости сети [20]. В [1] авторы вручную управляют значением скорости обучения, изменяя её в зависимости от рассчитанных функционалов Минковского и визуальной структуры реконструируемых образцов. Это видно на графике профиля обучения сетей, приведённом в [1] (Рис. 4):

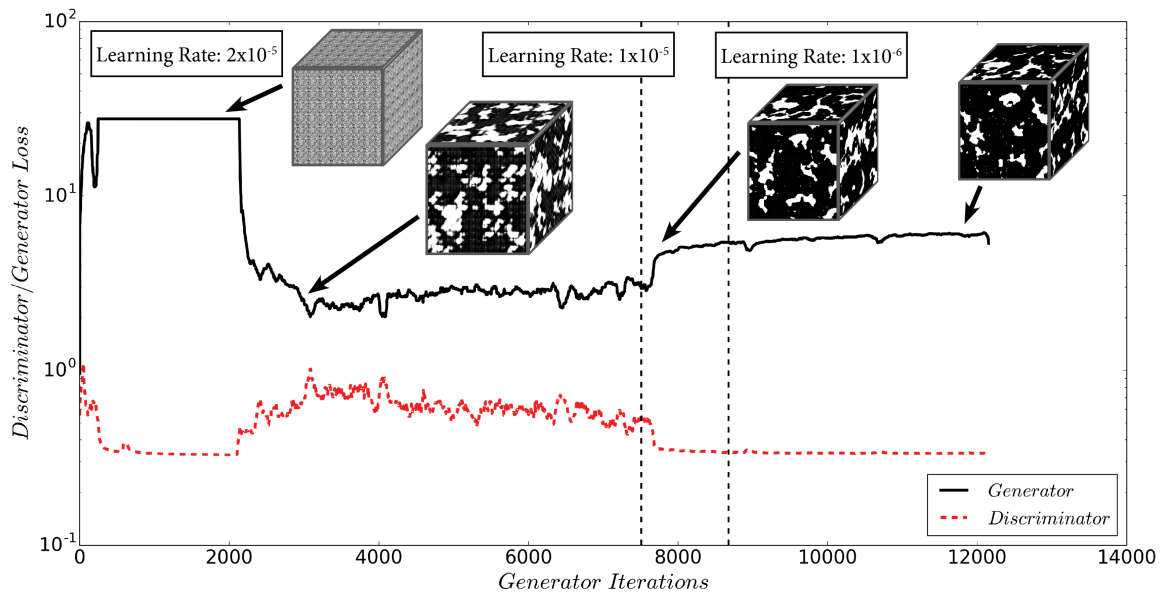


Рис. 4: Схема процесса обучения [1]

В этой работе исследуется применение модификации процедуры обучения,

которая состоит в том, что:

- Значения функционалов Минковского рассчитываются для реконструированных образцов на каждой итерации процесса обучения, что позволяет отслеживать текущее состояние сети-генератора с точки зрения совпадения топологических характеристик образцов с желаемыми;
- Это позволяет после каждого шага обучения оценить невязку Δ_i :

$$\Delta_i = |B_i - B_{berea}| + |\xi_i - \xi_{berea}|,$$

где B_i , ξ_i - это значения соответствующих функционалов Минковского для реконструированного образца с помощью генератора на текущем шаге обучения, а B_{berea} и ξ_{berea} - значения этих функционалов для исходного образца.

Если значение Δ_i не меняется более 3000 итераций, то скорость обучения уменьшается в 10 раз.

2 Градиентные методы оптимизации

Для обучения глубоких нейросетей применяется метод обратного распространения ошибки, который позволяет рассчитать градиенты весов, и различные алгоритмы стохастической оптимизации. В данной работе для обучения моделей применялось два алгоритма оптимизации под названиями “RMSprop” и “Adam”, являющихся некоторыми модификациями стохастического градиентного спуска (SGD).

2.1 Градиентный спуск

TODO

2.2 Стохастический градиентный спуск

Описание стохастического градиентного спуска есть в [?]. Стохастический градиентный спуск обновляет каждый параметр путем вычитания градиента целевой функции по соответствующему параметру и умножая его на гиперпараметр λ - шаг обучения. Градиент целевой функции подсчитывается не на всем наборе данных, а на его случайном подмножестве.

$$i \sim \mathcal{U}\{1, 2, \dots, n\}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \lambda \nabla L_i(\theta_t),$$

где L_i - целевая функция, вычисленная на i -ой части данных (mini-batch), индекс i выбирается случайно.

2.2.1 RMSprop

RMSprop (root mean square propagation) описан в [?]. Идея заключается в том, что для каждого параметра градиент перемасштабируется, учитывая прошлые значения градиентов для этого параметра. Производится это путем деления градиента на нормировочный множитель, который является корнем из среднего квадрата градиентов.

$$g_{t+1} = \gamma g_t + (1 - \gamma)(\nabla L_i(\theta_t))^2$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\lambda \nabla L_i(\theta_t)}{\sqrt{g_{t+1}} + \epsilon}$$

ϵ - это небольшая константа, введенная для численной стабильности.

2.2.2 Adam

Adam (adaptive moment estimation, описан в [?]). Этот алгоритм, помимо перемасштабирования, использует инерцию градиента, что позволяет смягчить быстрое изменение градиента, присущее стохастическому градиентному спуску.

$$m_{t+1} = \beta_1 m_t + (1 - \beta_1) \nabla L_i(\theta_t)$$

$$v_{t+1} = \beta_2 g_t + (1 - \beta_2) (\nabla L_i(\theta_t))^2$$

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t}$$

$$\hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t}$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\lambda \hat{m}_t}{\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon}$$

Авторы статьи [?] пишут, что этот алгоритм достаточно устойчив к неоптимальному выбору параметров, поэтому во многих статьях в начале для обучения пробуют применить именно Adam.

3 Верификация

Верификация синтеза

3.1 Функционалы Минковского

Функционалы Минковского для трехмерных тел вводятся следующим образом:

- $V = M_0 = \int_X dV$
- $S = M_1 = \frac{1}{3} \int_{\delta X} dS$
- $B = M_2 = \frac{1}{6} \int_{\delta X} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) dS$
- $\xi = M_3 = \frac{1}{3} \int_{\delta X} \frac{1}{R_1 R_2} dS$

+ теория

3.1.1 Расчет для дискретного случая

Алгоритм расчета функционалов Минковского в дискретном случае: []

3.2 Двухточечная корреляционная функция

+ теория

4 Результаты вычислительного эксперимента

Архитектуры нейронных сетей, а также модификация процедуры обучения, описанные в пунктах 1.4.3 и 1.4.4 были реализованы в виде комплекса программ на языке Python с помощью библиотеки для глубокого обучения PyTorch. Используемые версии программных пакетов указаны в Приложении 1. Обучение проводилось на наборе данных Berea.

4.1 Набор данных Berea

Исходные данные - изображение компьютерной томографии песчаника, объёмом 400^3 вокселей, бинарно сегментированная на породу и поры, в формате TIFF. Разрешение томограммы равно 3 микронметрам. Для обучения сетей из этого кубика был вырезан набор кубиков размером 64^3 вокселей, с перекрытием в 16 вокселей (всего 10648 различных образцов размера 64^3), они и представили собой обучающую выборку. Оригинальный образец размером 400^3 вокселей представлен на (Рис. 5). Некоторые примеры из получившейся обучающей выборки представлены в (Таб. 1).

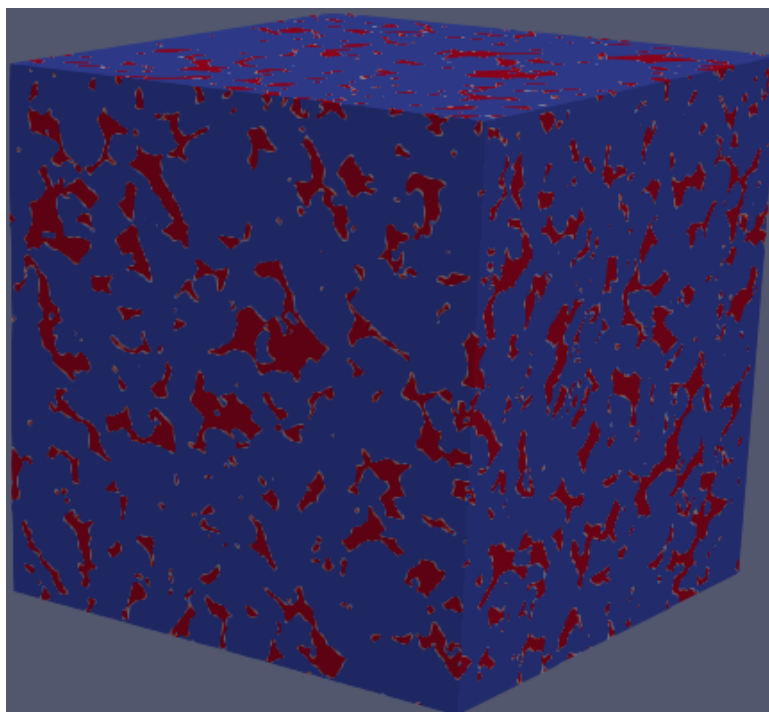


Рис. 5: Оригинальный образец

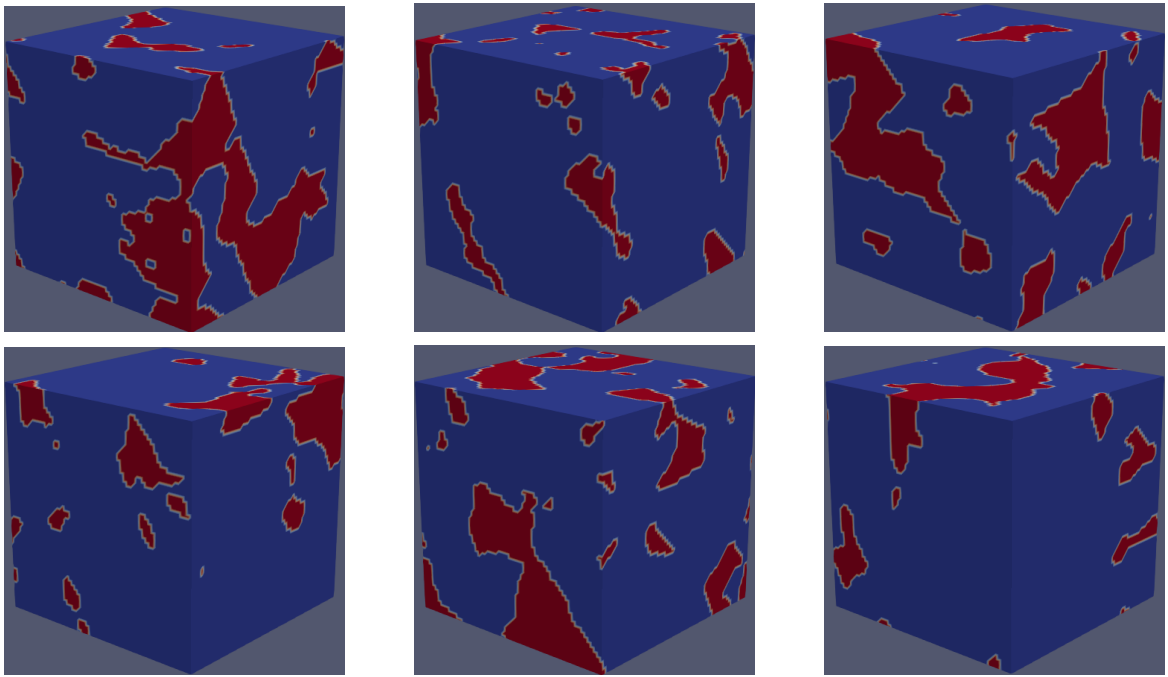


Таблица 1: Примеры из обучающей выборки

4.2 Обучение нейросети

Было проведено обучение нейросети со следующими параметрами (число сверточных фильтров указано для первого слоя):

Число фильтров G, D	Размерность z	Размер пакета	Начальный LR
64, 32	512	64	2e-4

Таблица 2: Гиперпараметры нейросети и процесса обучения

Графики функций ошибок сетей генератора и дискриминатора, а также графики сходимостей функционалов Минковского в процессе обучения приведены на (Рис. 6, 7, 8, 9, 10).

4.3 Реконструкции размера 64^3

4.3.1 Примеры

Примеры реконструкции размера 64^3 , приведены в (Таб. 3). Дополнительные примеры реконструкций приведены в Приложении 2 (Таб. 6)



Рис. 6: График функций ошибок сетей дискриминатора и генератора

4.3.2 Анализ

Было реконструировано 1000 образцов размера 64^3 . На основе этого набора были получены распределения интересующих функционалов Минковского. Так же, используя предоставленную обученную сеть [1], было реконструировано 1000 образцов того же размера для сравнения распределений функционалов. Графики полученных распределений (вместе с соответствующим распределением на обучающей выборке) приведены на (Рис. 11, 12, 13, 14). Также были рассчитаны двухточечная функция вероятности и соответствующая функция корреляции для реконструированных образцов, образцов, полученных с помощью предобученной сети [1] и образцов из обучающей выборки. Их графики приведены на (Рис. 15, 16).



Рис. 7: График сходимости функционала Минковского V

4.4 Реконструкции размера 200^3

4.4.1 Примеры

Примеры реконструкции размера 200^3 , приведены в (Таб. 4). Дополнительные примеры реконструкций приведены в Приложении 2.

4.4.2 Анализ

Было реконструировано 1000 образцов размера 200^3 . На основе этого набора были получены распределения интересующих функционалов Минковского. Так же, используя предоставленную обученную сеть [1], было реконструировано 1000 образцов того же размера для сравнения распределений функционалов. Графики полученных распределений приведены на (Рис. 17, 18, 19, 20). Также были рассчитаны двухточечная функция вероятности и соответствующая функция корреляции для реконструированных образцов, образцов, полученных с помощью предобученной сети [1] и образцов из обучающей выборки. Их графики приведены на (Рис. 21, 22).



Рис. 8: График сходимости функционала Минковского S

4.5 Реконструкции размера 400^3

4.5.1 Примеры

Примеры реконструкции размера 400^3 , приведены в (Таб. 5). Дополнительные примеры реконструкций приведены в Приложении 2.

4.5.2 Анализ

Было реконструировано 1000 образцов размера 400^3 . На основе этого набора были получены распределения интересующих функционалов Минковского. Так же, используя предоставленную обученную сеть [1], было реконструировано 1000 образцов того же размера для сравнения распределений функционалов. Графики полученных распределений приведены на (Рис. 23, 24, 25, 26). Также были рассчитаны двухточечная функция вероятности и соответствующая функция корреляции для реконструированных образцов, образцов, полученных с помощью предобученной сети [1] и образцов из обучающей выборки. Их графики приведены на (Рис. 27, 28).

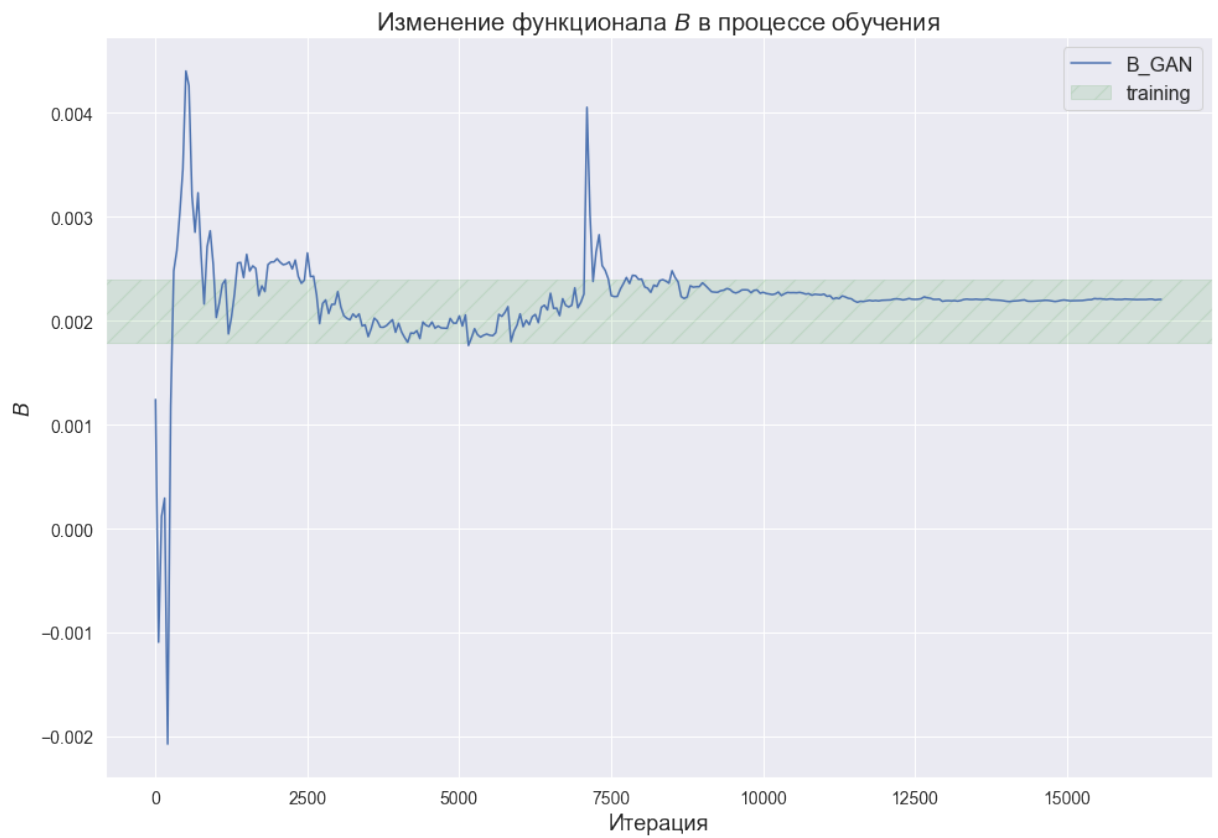


Рис. 9: График сходимости функционала Минковского B



Рис. 10: График сходимости функционала Минковского ξ

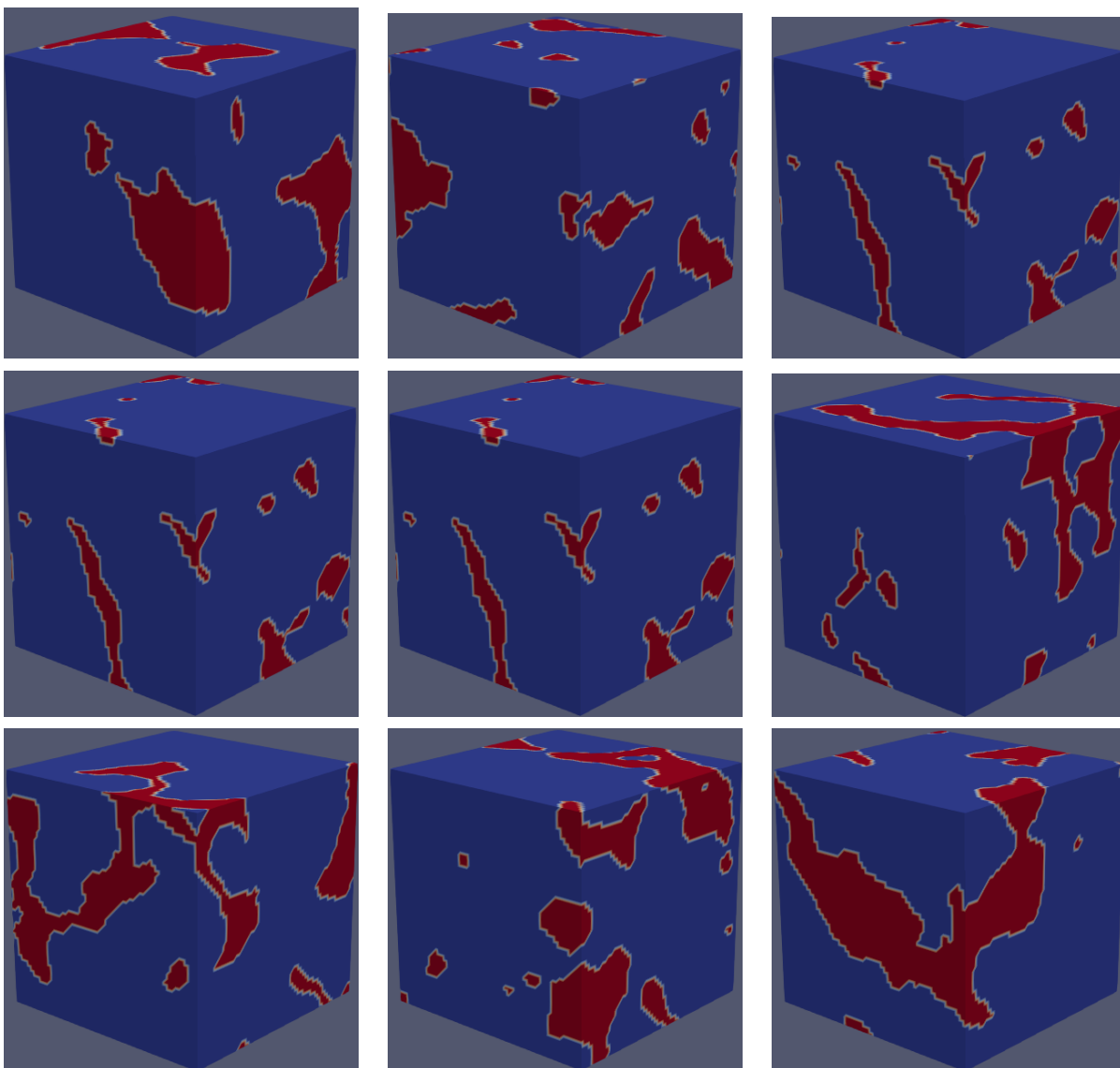


Таблица 3: Примеры реконструкции 64x64x64

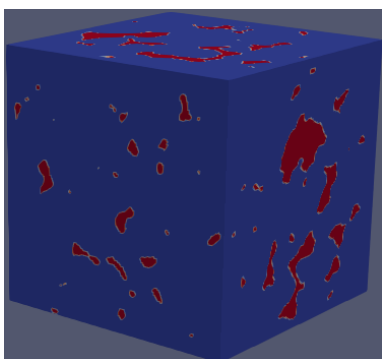


Таблица 4: Примеры реконструкции 200x200x200



Обученная сеть

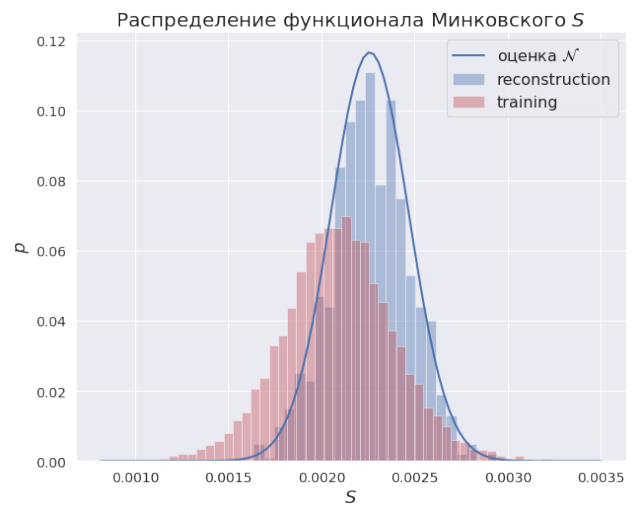


Mosser et al. [1]

Рис. 11: Распределения функционала Минковского V для реконструкций размера 64^3

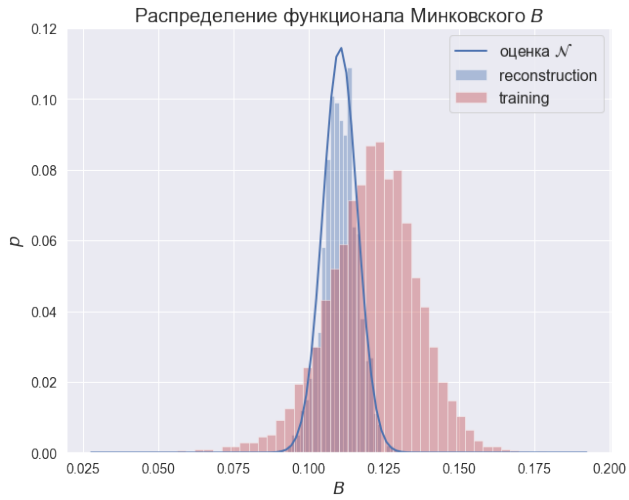


Обученная сеть

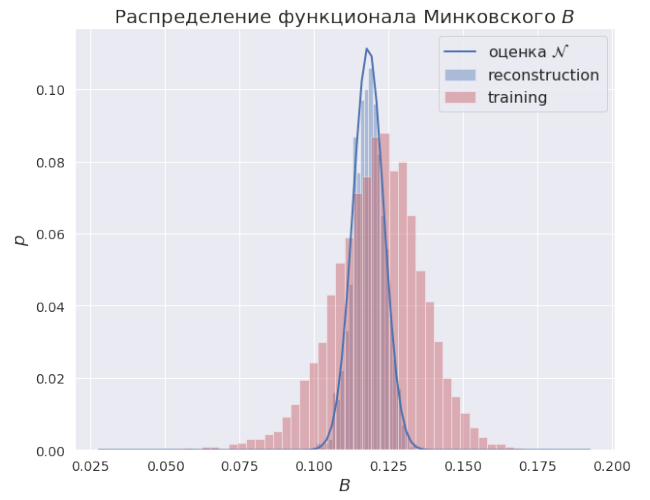


Mosser et al. [1]

Рис. 12: Распределения функционала Минковского S для реконструкций размера 64^3



Обученная сеть



Mosser et al. [1]

Рис. 13: Распределения функционала Минковского B для реконструкций размера 64^3

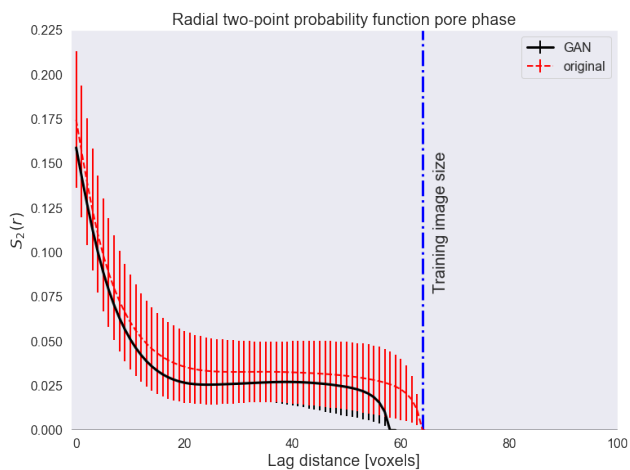


Обученная сеть

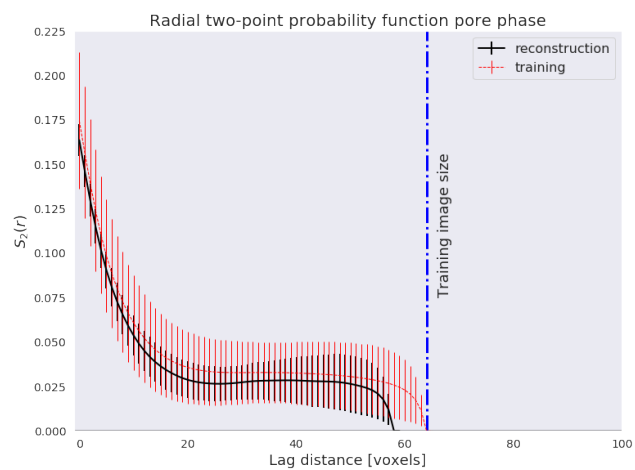


Mosser et al. [1]

Рис. 14: Распределения функционала Минковского ξ для реконструкций размера 64^3

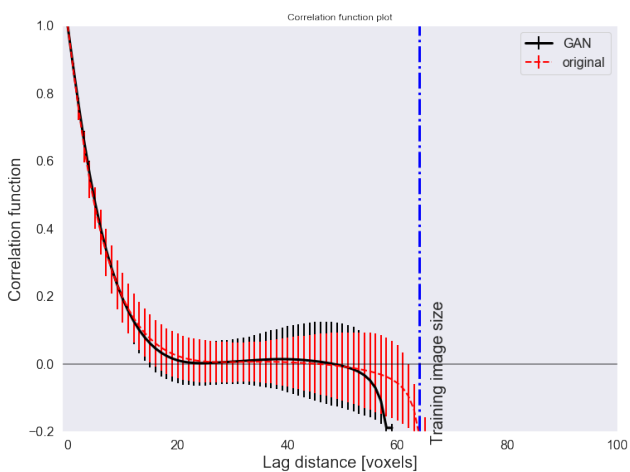


Обученная сеть

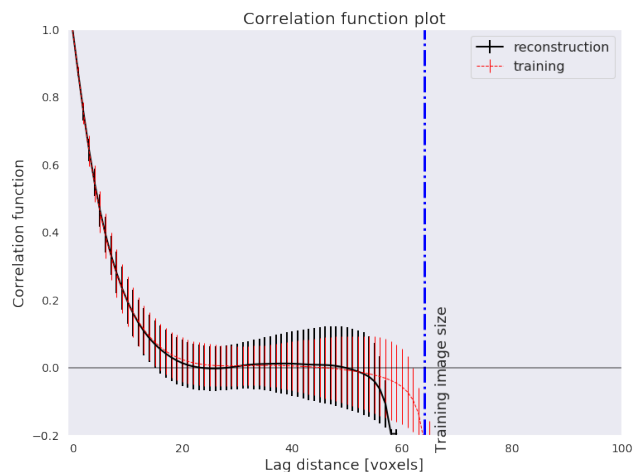


Mosser et al. [1]

Рис. 15: Двухточечная функция вероятности для реконструкций размера 64^3



Обученная сеть



Mosser et al. [1]

Рис. 16: Двухточечная функция корреляции для реконструкций размера 64^3

Рис. 17: Распределения функционала Минковского V для реконструкций размера 200^3

Рис. 18: Распределения функционала Минковского S для реконструкций размера 200^3

Рис. 19: Распределения функционала Минковского B для реконструкций размера 200^3

Рис. 20: Распределения функционала Минковского ξ для реконструкций размера 200^3

Рис. 21: Двухточечная функция вероятности для реконструкций размера 200^3

Рис. 22: Двухточечная функция корреляции для реконструкций размера 200^3

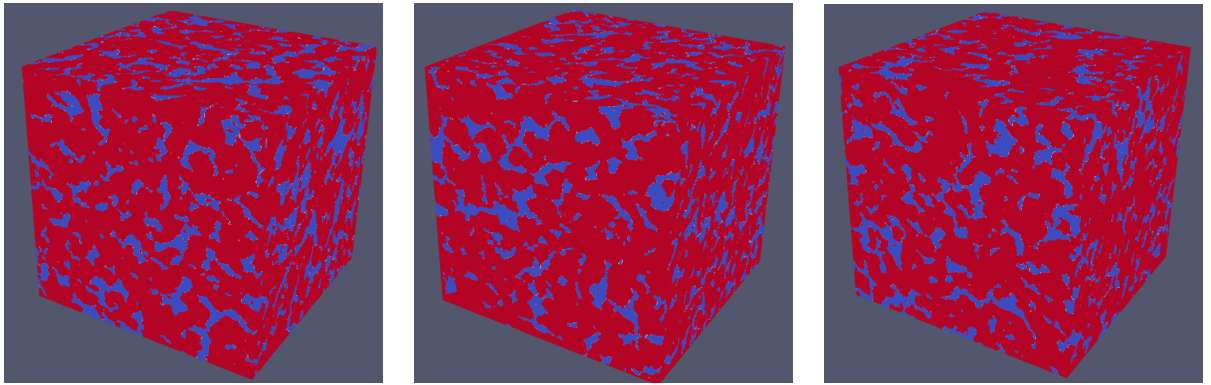


Таблица 5: Примеры реконструкции $400 \times 400 \times 400$

Рис. 23: Распределения функционала Минковского V для реконструкций размера 400^3

Рис. 24: Распределения функционала Минковского S для реконструкций размера 400^3

Рис. 25: Распределения функционала Минковского B для реконструкций размера 400^3

Рис. 26: Распределения функционала Минковского ξ для реконструкций размера 400^3

Рис. 27: Двухточечная функция вероятности для реконструкций размера 400^3

Рис. 28: Двухточечная функция корреляции для реконструкций размера 400^3

ВЫВОДЫ

TODO

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

TODO

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Lukas Mosser, Olivier Dubrulle, Martin J. Blunt: “Reconstruction of three-dimensional porous media using generative adversarial neural networks” // arXiv: 1704.03225 [cs.CV], 2017
- [2] Jiajun Wu, Chengkai Zhang, Tianfan Xue, William T. Freeman, Joshua B. Tenenbaum: “Learning a Probabilistic Latent Space of Object Shapes via 3D Generative-Adversarial Modeling” // arXiv: 1610.07584 [cs.CV], 2016
- [3] Alec Radford, Luke Metz, Soumith Chintala: “Unsupervised Representation Learning with Deep Convolutional Generative Adversarial Networks” // arXiv: 1511.06434 [cs.LG], 2015
- [4] Leon A. Gatys, Alexander S. Ecker, Matthias Bethge: “Texture Synthesis Using Convolutional Neural Networks” // arXiv: 1505.07376 [cs.CV], 2015.
- [5] Dmitry Ulyanov, Vadim Lebedev, Andrea Vedaldi, Victor Lempitsky: “Texture Networks: Feed-forward Synthesis of Textures and Stylized Images” // arXiv: 1603.03417 [cs.CV], 2016.
- [6] Воронцов К. В.: “Математические методы обучения по прецедентам (теория обучения машин)”.
- [7] Ian J. Goodfellow, Jean Pouget-Abadie, Mehdi Mirza, Bing Xu, David Warde-Farley, Sherjil Ozair, Aaron Courville, Yoshua Bengio: “Generative Adversarial Nets” // arXiv: 1406.2661 [stat.ML], 2014.
- [8] Mehdi Mirza, Simon Osindero: “Conditional Generative Adversarial Nets” // arXiv: 1411.1784 [cs.LG], 2014.
- [9] Jon Gauthier: “Conditional generative adversarial nets for convolutional face generation”, Tech. rep., 2015.
- [10] Junbo Zhao, Michael Mathien, Yann LeCun: “Energy-based Generative Adversarial Networks” // arXiv: 1609.03126 [cs.LG], 2016.
- [11] David Berthelot, Thomas Schumm, Luke Metz: “BEGAN: Boundary Equilibrium Generative Adversarial Networks” // arXiv: 1703.10717 [cs.LG], 2017.

- [12] LeCun, Y., Boser, B., Denker, J.S., Henderson, D., Howard, R.E., Hubbard, W., Jackel, L.D.: “Backpropagation applied to handwritten zip code recognition” // Neural Comput. 1(4), 541–551, 1989.
- [13] Phillip Isola, Jun-Yan Zhu, Tinghui Zhou, Alexei A. Efros: “Image-to-Image Translation with Conditional Adversarial Networks” // arXiv: 1611.07004 [cs.CV], 2016.
- [14] Pedro Costa, Adrian Galdran, Maria Inês Meyer, Michael David Abràmoff, Meindert Niemeijer, Ana Maria Mendonça, Aurélio Campilho: “Towards Adversarial Retinal Image Synthesis” // arXiv: 1701.08974 [cs.CV], 2017.
- [15] Olaf Ronneberger, Philipp Fischer, Thomas Brox: “U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation” // arXiv: 1505.04597 [cs.CV], 2015.
- [16] Amari, Shunichi: “A theory of adaptive pattern classifiers” // Electronic Computers, IEEE Transactions on 3, стр. 299-307, 1967.
- [17] Tieleman, Tijmen, Geoffrey Hinton: “Lecture 6.5-rmsprop: Divide the gradient by a running average of its recent magnitude” // Coursera: Neural Networks for Machine Learning 4: 2, 2012.
- [18] Diederik P. Kingma, Jimmy Lei Ba: “Adam: A method for stochastic optimization” // arXiv:1412.6980 [cs.LG], 2014.
- [19] Martin Arjovsky, Soumith Chintala, Léon Bottou: “Wasserstein GAN” // arXiv: 1701.07875 [stat.ML], 2017
- [20] Leslie N. Smith: “A disciplined approach to neural network hyper-parameters: Part 1 – learning rate, batch size, momentum, and weight decay” // arXiv: 1803.09820 [cs.LG], 2018

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приложение 1. Использованные версии основных пакетов

- python=3.7.3
- cudatoolkit=10.0.130
- pytorch=1.1.0
- ignite=0.2.0
- h5py=2.9.0
- numpy=1.16.3
- scipy=1.2.1
- tifffile=0.15.1

Приложение 2. Дополнительные примеры реконструкций

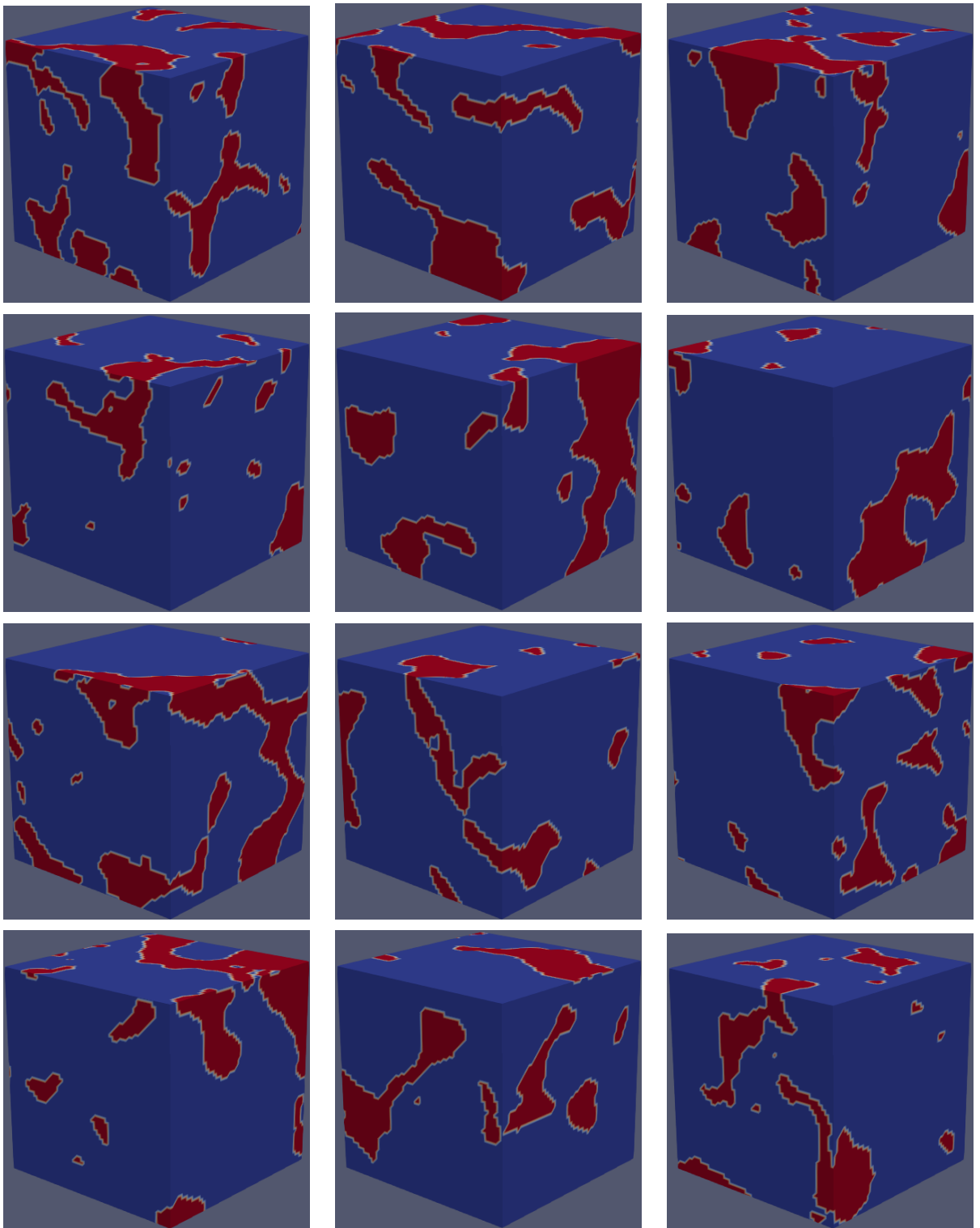


Таблица 6: Дополнительные реконструкции 64x64x64

Таблица 7: Дополнительные реконструкции 200x200x200

Таблица 8: Дополнительные реконструкции 400x400x400