

コンピュータ・シミュレーション入門

偏微分方程式 (PDE) とパラメータ推定・随伴・変量

— 帯水層問題を例として —

電気通信大学名誉教授

林 茂雄

要点

前回セミナーのおさらい

- シミュレーション・モデル・IoT

PDEで記述できるモデル

- Advection-Diffusion
- 変数とパラメータ・順問題と逆問題

統計学の手法

- カイ二乗を一般化
- 共分散行列

帯水層の透水率分布の推定

- 前回米大海氏のレクチャーを敷衍

前回セミナーのまとめ. (1)

シミュレーションの意味と意義: 入力パラメータの組 X_i と出力(変数・パラメータ)の組 Y_j を数
理的モデルに基づいて関係づける ($i = 1, 2, \dots, n; j = 1, 2, \dots, m$)

- コンピュータ上で実現 順問題
- 実験との比較が可能

多様なコンピュータ・シミュレーション

- 知りたいことは... Why or How?

コンピュータ・シミュレーションを活かすために

- 境界条件をなめてはいけない

前回セミナーのまとめ. (2)

モデルについて

- 決定論的モデル
 - 入力条件を定めれば結果は確か
 - 例えば力学系
- 確率論的モデル
 - 現在の状態から未来を予測することはできない
 - 多数回の試行で統計的性質(確率分布)が明らかになる
 - 例えば、ゲーム、経済活動、誤差
 - 決定論の枠組みの中でも不確かさがある
 - 例えば、非線形力学、カオス

前回セミナーのまとめ. (3)

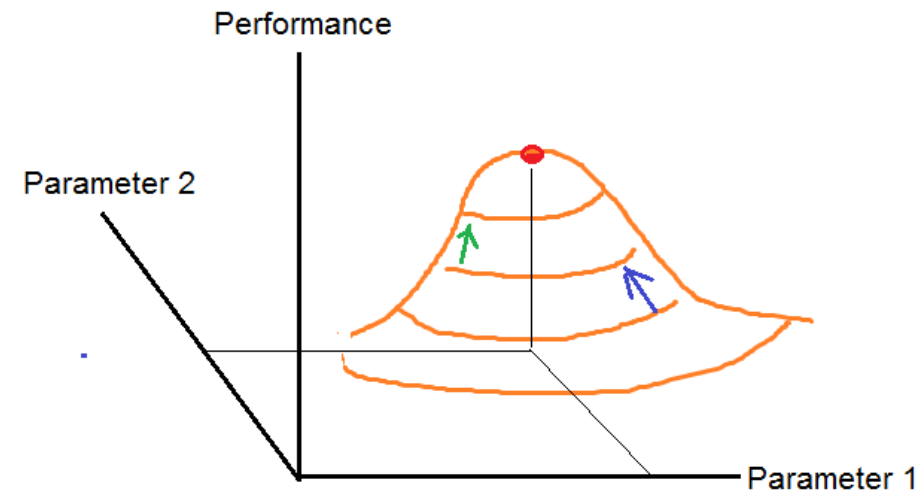
IoT 用センサーの最適な設置場所をコンピュータ・シミュレーションに基づいて決めることができる (KESCO 橋口真宜氏)

前回セミナーのまとめ. (4)

帯水層の水圧分布 Y_j ($j = 1, 2, \dots, m$) を生ずるような区分的透水性率 X_i ($i = 1, 2, \dots, n$) の組を COMSOL Multiphysics を用いて推定することができる [1] (KESCO 米大海氏)

非線形最適化で決定

- ターゲット (Objective function, Performance measure) はカイ二乗 (残差)
- $m \ll n$ であれば underdetermined なので数学的な工夫が必要
- Sensitivity analysis と Parameter estimation



変数とパラメータ $f(x, t, a) = 0$

物理学ではゆっくり変化する変数

- (例) 振り子の長さ l をゆっくり上下させる

統計学では、採用する統計モデルでパラメータが決まる(平均、標準偏差)

シミュレーションでは、パラメータを固定して方程式を解く

分野ごとに意味が異なるが、おおむね・・・

- パラメータは系の状態を特徴づける
 - 離散値を取っても構わない
 - 物理量でなくても構わない(色、香り、味)
 - 人為的に制御できる
- 変数は系の状態またはその変化を記述する(決定論的であれば予測できる)
 - 物理量がふつう(独立変数=位置、時間; 従属変数=圧力、スペクトル強度、物質濃度)
 - 連続値を取る(とみなせる)ことが多い
 - 自然法則に従う

熱力学の定積比熱・定圧比熱では、 V, P をパラメータとみなしているが、温度 T は変数。

時間 t は変数になるのがふつう。

変量へのパラダイムシフト

理工学では変数・パラメータにランダム性がないものとして扱う

変数・パラメータが取る値にランダム性があると認識した時点で変量 Variate に切り替わる

Variate \doteq Random variable

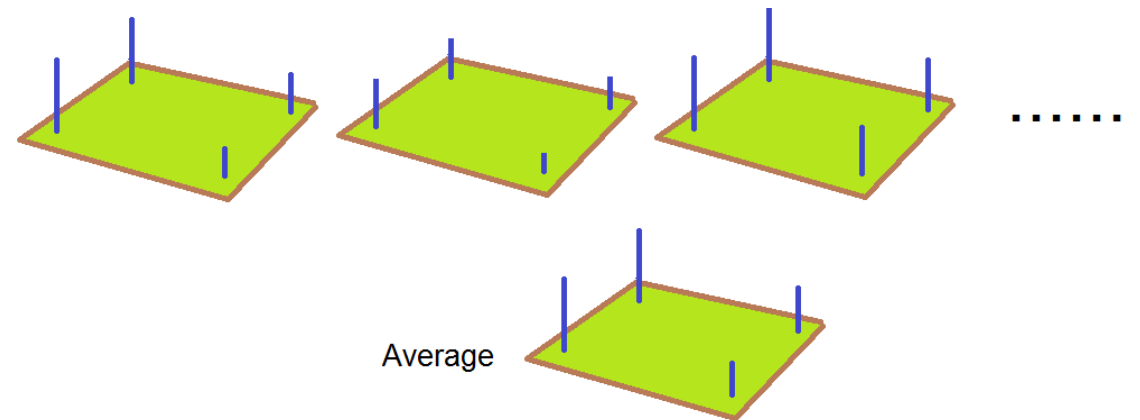
(例1) 地下水位 $u(\mathbf{r}_i)$ ($i = 1, 2, 3, 4$)

最確値からのずれ $\Delta u_i = u(\mathbf{r}_i) - \overline{u(\mathbf{r}_i)}$

分散 $\sigma_i^2 = \overline{(\Delta u_i)^2}$

共分散 $\sigma_{ij} = \overline{\Delta u_i \Delta u_j}$

⇒シミュレーションでは $u(\mathbf{r}_i)$ が計算値、 $\overline{u(\mathbf{r}_i)}$ が測定値



(例2) 不均一な透水性 T_i ($i = 1, \dots, n; n = 100$)

$$\mathbf{T}^T = (T_1, \dots, T_n)$$

最確値からのずれ $\Delta T_i = T_i - \bar{T}_i$

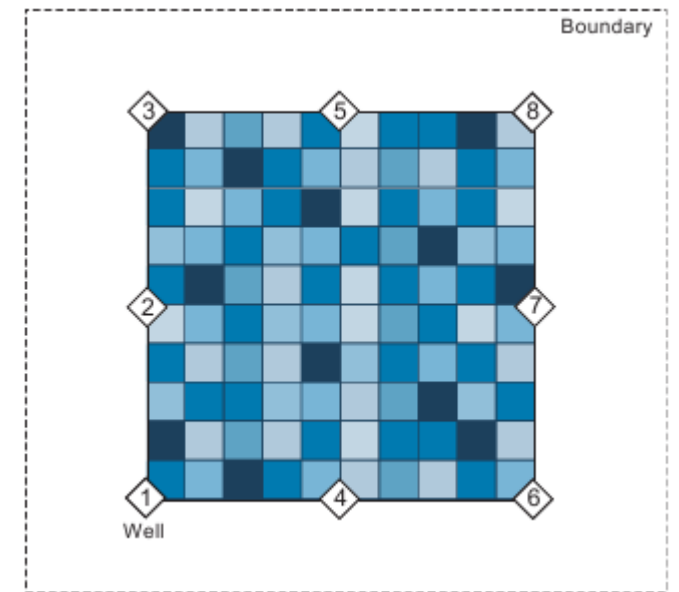
$$\text{分散 } \sigma_i^2 = \overline{(\Delta T_i)^2}$$

$$\text{共分散 } \sigma_{ij} = \overline{\Delta T_i \Delta T_j} \Rightarrow \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \cdots & \sigma_{1n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \sigma_{n1} & \cdots & \sigma_n^2 \end{pmatrix} \quad \boxed{\text{後出}}$$

Variogram [1],[Wikipedia] $\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

$$\gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2} \overline{[\Delta T(\mathbf{r}_1) - \Delta T(\mathbf{r}_2)]^2} = \frac{1}{2} \overline{[T(\mathbf{r}_1) - T(\mathbf{r}_2)]^2} \quad \begin{matrix} \text{Const mean} \\ \Rightarrow \gamma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}) = \gamma_s(\mathbf{r}) \end{matrix} \quad \text{Stationary}$$

$$\text{Empirical } \tilde{\gamma}(r) = \frac{1}{2N(r)} \sum_{i,j \in N(r)} [T(\mathbf{r}_i) - T(\mathbf{r}_j)]^2$$



分散・共分散・相関係数 [2, 6]

$$\text{共分散 } \sigma_{XY} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (X_{\alpha} - \bar{X})(Y_{\alpha} - \bar{Y}) \Rightarrow \overline{\Delta X \Delta Y} \Rightarrow \text{cov}(X, Y)$$

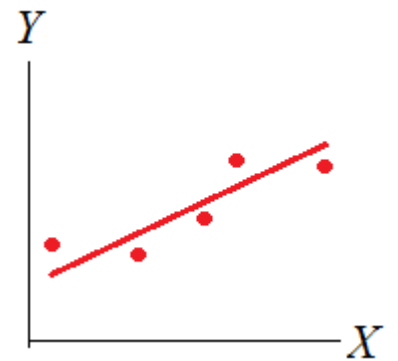
$$\text{分散 } \sigma_X^2 = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (X_{\alpha} - \bar{X})^2 \Rightarrow \overline{(\Delta X)^2}, \quad \sigma_Y^2 = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N (Y_{\alpha} - \bar{Y})^2 \Rightarrow \overline{(\Delta Y)^2} \Rightarrow \text{cov}(X, X) = \text{var}(X)$$

$$\text{相関係数 } r = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (-1 \leq r \leq 1)$$

- X & Y が同一・単一の要因のもとに増減すれば $r = \pm 1 \iff \Delta Y = a \Delta X$

$$\text{ベクトル表記 } \Delta \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \Delta X_1 \\ \vdots \\ \Delta X_N \end{pmatrix}, \quad \Delta \mathbf{X}^T = (\Delta X_1, \dots, \Delta X_N)$$

$$\text{共分散行列 } \mathbf{C} = \overline{\Delta \mathbf{X} \Delta \mathbf{X}^T} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \cdots & \sigma_{1N} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \sigma_{N1} & \cdots & \sigma_{NN} \end{pmatrix} \quad [2](\text{p.97}), [3] (\text{pp.106, 169})$$

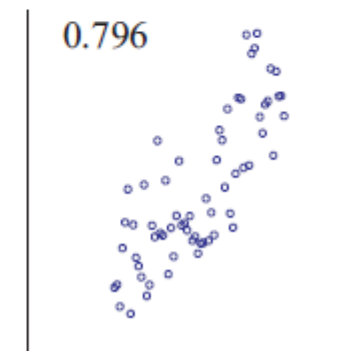
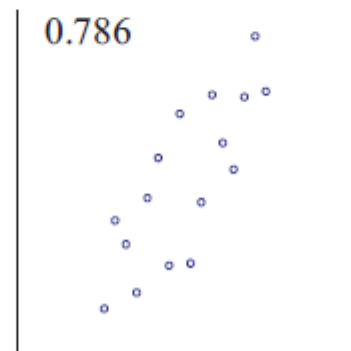
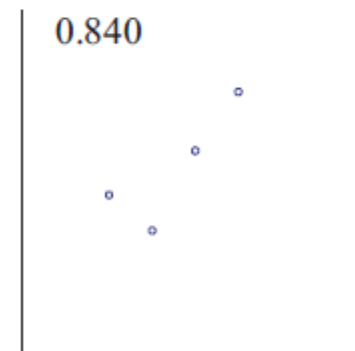
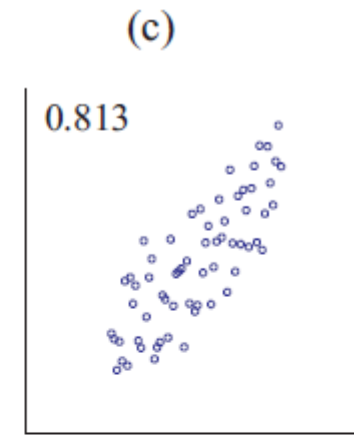
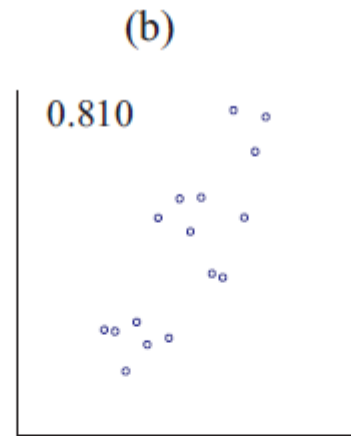
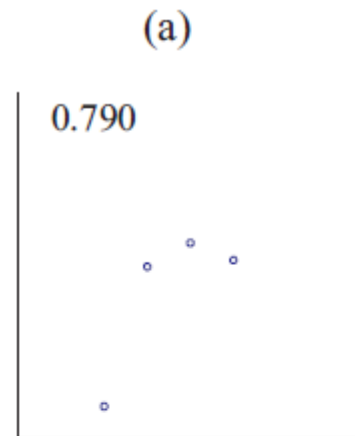


$$X = u_i, Y = u_j$$

相関係数の例 (1)

$r \sim 0.8$

データ数が増えると

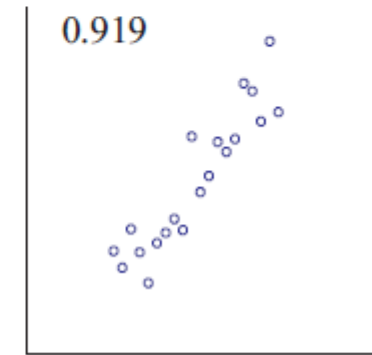
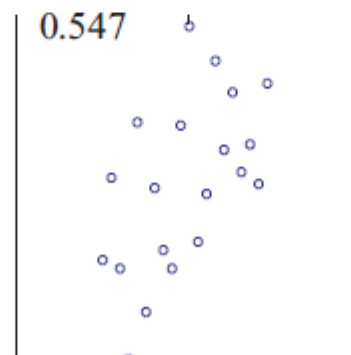
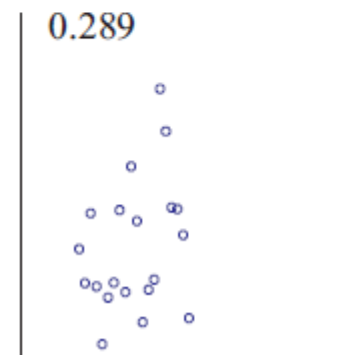
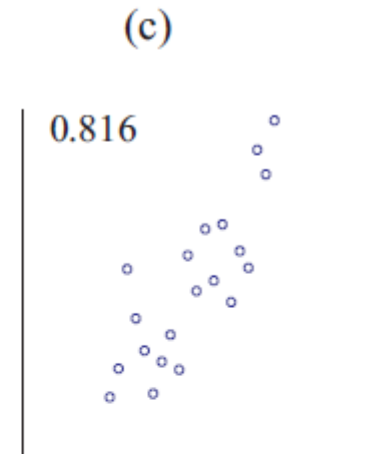
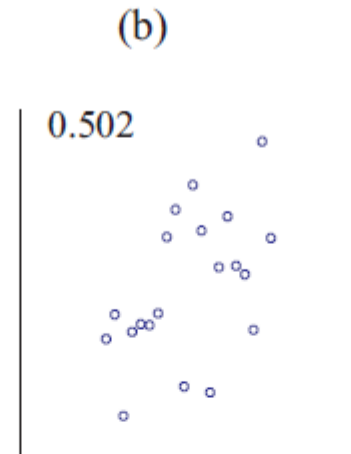
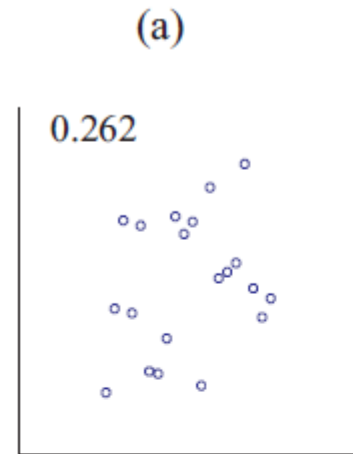


相関係数の例 (2)

20個

値が小さくなるのは

- 規則性が弱い(ランダム性が強い)
 - 多数の要因が関与する
- 非直線的な規則性
 - 例えば反比例



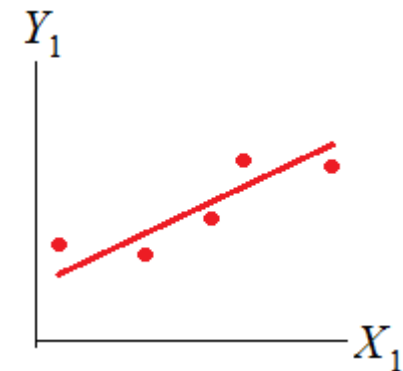
フィッティングの「平均誤差」 $\sigma_{y,fit}$

$$\sigma_{y,fit}^2 = \min_{A,B} \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i; A, B)]^2 \right\} \propto \text{残差}$$

- データ点と回帰直線との間の「平均距離」(テキストでは $n-2$ で割る [2](p.106), [6] (p.193))
- 点がすべて直線上にあれば $\sigma_{y,fit}^2=0$
- 各点の誤差 σ_i^2 が $\sigma_{y,fit}^2$ に等しいとみなしてよい

$$\sigma_{y,fit}^2 = \sigma_y^2(1 - r^2) \text{ が成り立つ}$$

- r の大きいほうがフィッティング誤差が小さいとは限らない
- Excel でモンテカルロ・シミュレーションができる
 - 乱数を用いて (x, y) の組をどんどん作る



PDEで記述できるモデル (1) 線形2変数

双曲線型 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$

放物線型 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad i \frac{\partial u}{\partial t}$

楕円型(Laplace) $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

楕円型(Poisson) $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = F(x, y)$

$= i \frac{\partial u}{\partial t}$

COMSOL
Multiphysics

1次元波動

1次元熱伝導、1次元Schrödinger

境界条件: Dirichlet, Neumann

2次元Schrödinger

固有値問題 : $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \lambda u = 0, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + V(x, y) + \lambda u = 0$

PDEで記述できるモデル (2) 移流・拡散

速度 v の流れに乗った拡散 Advection-Diffusion

$$f = \nabla \cdot (D\nabla u - vu) + q = \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} \\ 0 \end{cases}$$

多くの分野で活躍

順問題: パラメータが既知で u を得る \Rightarrow PDEを「解く」

逆問題: u から情報を引き出す \Rightarrow パラメータの値は?

どのパラメータに敏感か?

Source位置はどこか?

系	u	c	D
移流+拡散	濃度	流速	拡散係数
地下水	水圧	0	透過率
熱伝導	温度	0	熱伝導率
静電場	静電ポテンシャル	0	誘電率

PDEで記述できるモデル (3) 簡単な例

一次元拡散 [5]

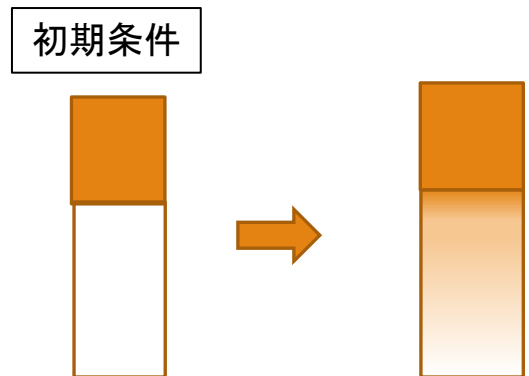
$$f = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (D \text{ は濃度 } u \cdot \text{場所 } x \text{ に依存してよい})$$

順問題: D が定数であれば $u(x, t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$

定常状態であれば $D \frac{du}{dx} = ax + b$ (a, b は境界条件から)

逆問題: u の測定データから D を求める

- ポリマー溶液では濃度依存性あり、不均一材料では場所に依存



PDEで記述できるモデル (4) パラメータ依存性

多変量カイ二乗(目的関数) $\chi^2 = \Delta \mathbf{u}^T \mathbf{C}^{-1} \Delta \mathbf{u} = \sum_{i,j} \Delta u_j (\mathbf{C}^{-1})_{ij} \Delta u_i$

$$u = u(\mathbf{r}; \alpha_1, \alpha_2, \dots)$$

- $\mathbf{C} = \overline{\Delta \mathbf{u} \Delta \mathbf{u}^T}$ は共分散行列、 $\Delta u_i = u(\mathbf{r}_i)|_{\text{calc}} - u(\mathbf{r}_i)|_{\text{obs}}$, u は $\nabla \cdot (D\nabla u) - \nabla v u = 0$ を満足
- 最適化には、パラメータ α_k に対する u の変化率 $\frac{\partial u}{\partial \alpha_k}$ の情報が必要 \Rightarrow sensitivity matrix \mathbf{H}
 - 直接計算は愚策 $\frac{\partial u}{\partial \alpha_k} \approx \frac{u(\alpha_k + \Delta \alpha_k) - u(\alpha_k)}{\Delta \alpha_k}$

目的関数を汎関数 $P[h] = \iint h(u, \alpha) dr dt$ で表すことができる

$P[h]$ のパラメータ依存率は [4]

$$\frac{\partial P}{\partial \alpha_k} = \iint \left[\frac{\partial h(u, \alpha)}{\partial \alpha_k} + \frac{\partial h(u, \alpha)}{\partial u} \psi \right] dr dt$$

- $\frac{\partial P}{\partial \alpha_k} =$ marginal sensitivity, $\psi = \frac{\partial u}{\partial \alpha_k} =$ state sensitivity \Rightarrow sensitivity matrix \mathbf{H}
- u の随伴adjoint ψ^* を用いると第2項が効率的に計算できる

Adjoint 随伴の定義 $(\mathbf{y}, A\mathbf{x}) = (A^*\mathbf{y}, \mathbf{x})$

PDEで記述できるモデル (5) Adjointの活用

Neupauer & Wilson による説明 [4]

例えば、演算子 $P = \frac{\partial}{\partial t} - \nabla \cdot (D\nabla - \mathbf{v})$ に対して $Pu = 0$ が Advection-Diffusion 方程式

sensitivity $\psi = \frac{\partial u}{\partial \alpha_k}$ が満足する方程式は $Q\psi = 0$ の形

汎関数 $J[\psi^*] = \iint \psi^* (Q\psi) drdt = 0$ を変形して $J[\psi^*] = \iint (R\psi^*) \psi drdt = 0$

よって adjoint が満足する PDE は $R\psi^* = 0$ の形

$\frac{\partial P}{\partial \alpha_k}$ に含まれる $\iint \left[\frac{\partial h(u, \alpha)}{\partial u} \psi \right] drdt$ を変形して、 ψ を含まず ψ^* を含む積分にできる

- ψ^* の計算は一度でよい！

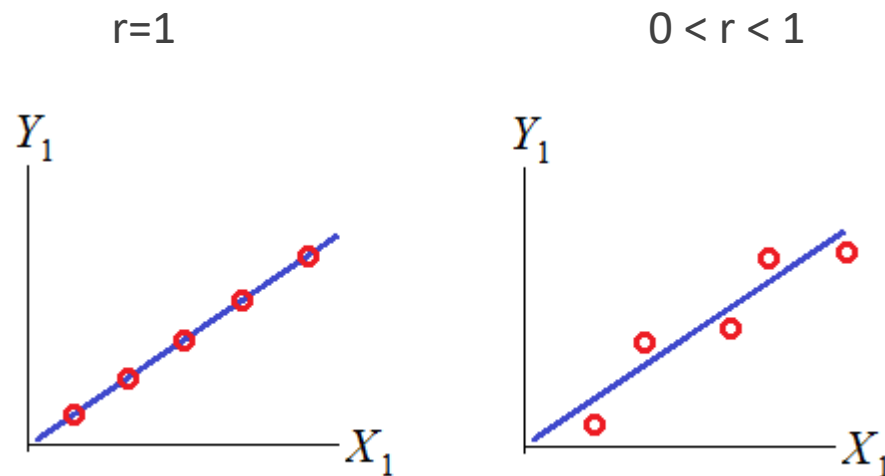
比例関係 (1)

理工学ほかあらゆる分野で最も基本的な関係

- 例1: 外界からの刺激と系の応答 \Rightarrow 電気回路の I と V
- 例2: 差分で考えるともっと広く適用できる \Rightarrow 気体の温度変化 dT と密度変化 $d\rho$

(x,y) をグラフ表現すると直感的に把握できる

- 回帰直線を調べる
- フィットの不確かさ $\sigma_{Y,fit}$



比例関係 (2) $y = ax$

この関係を実証するには (x,y) の組を測定する

常に誤差が含まれる \Rightarrow たいていは x が正確で y があやしい

y/x の値を平均すればよいか？

最も合理性があるのは最小二乗法 (ミスマッチを最小に)

- 正規分布からのサンプリング仮説に基づく

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - ax_i)^2}{\sigma_i^2} \geq 0$$

$$\Rightarrow \text{最適化で } a \text{ を決める} \Rightarrow \frac{\partial \chi^2}{\partial a} = 0 \Rightarrow a = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}$$

物理量としては y/x

ベクトルの線形関係 (1) $y = Ax$

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \cdots \\ x_n \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \cdots \\ y_m \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ A_{m1} & \cdots & A_{mn} \end{pmatrix}$$

A が分かっている中で (x, y) を求めることは順問題

- 刺激に対する応答

y と A が分かっている中で x を求めることは逆問題

- 形式上 $x = A^{-1}y$
- $m < n$ なら情報不足

(x, y) が分かっている中で A を求めることは逆問題

- 一般に $m \ll mn$ なので極めて困難

もっともらしい解がみつければそれでよし

ベクトルの線形関係 (2) $y = Ax$

最適化によって逆問題を解く

$$\chi^2 = (\mathbf{y} - A\mathbf{x})^T C^{-1} (\mathbf{y} - A\mathbf{x}) \quad (\geq 0)$$

χ^2 が0であれば数学的な解、最小値を取れば統計的な解

$$\Rightarrow \frac{\partial \chi^2}{\partial x_k} = 0 \text{ によって最適な } x \text{ が決定できる} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{x} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{y} \quad (C = I \text{ の場合})$$

$\Rightarrow m \ll n$ であれば非現実的な解を排除するための工夫が必要 [1]

$$\chi^2 = (\mathbf{y} - A\mathbf{x})^T C^{-1} (\mathbf{y} - A\mathbf{x}) + \alpha g(x)$$

penalty項
常識が働く

- 解法はさまざま
 - 例) 目的地付近で線形近似を採用して非線形問題の解を得る [1]・・・Newton法 of 精神

帯水層問題 (1a) 定常状態 [1]

帯水層の不均一な透過率(透水率) transmissivity T の空間分布を知りたい

- T の次元は拡散係数と同じく「面積/時間」(m^2/day)

Sourceから水を流し込み、Sinkから汲みだす

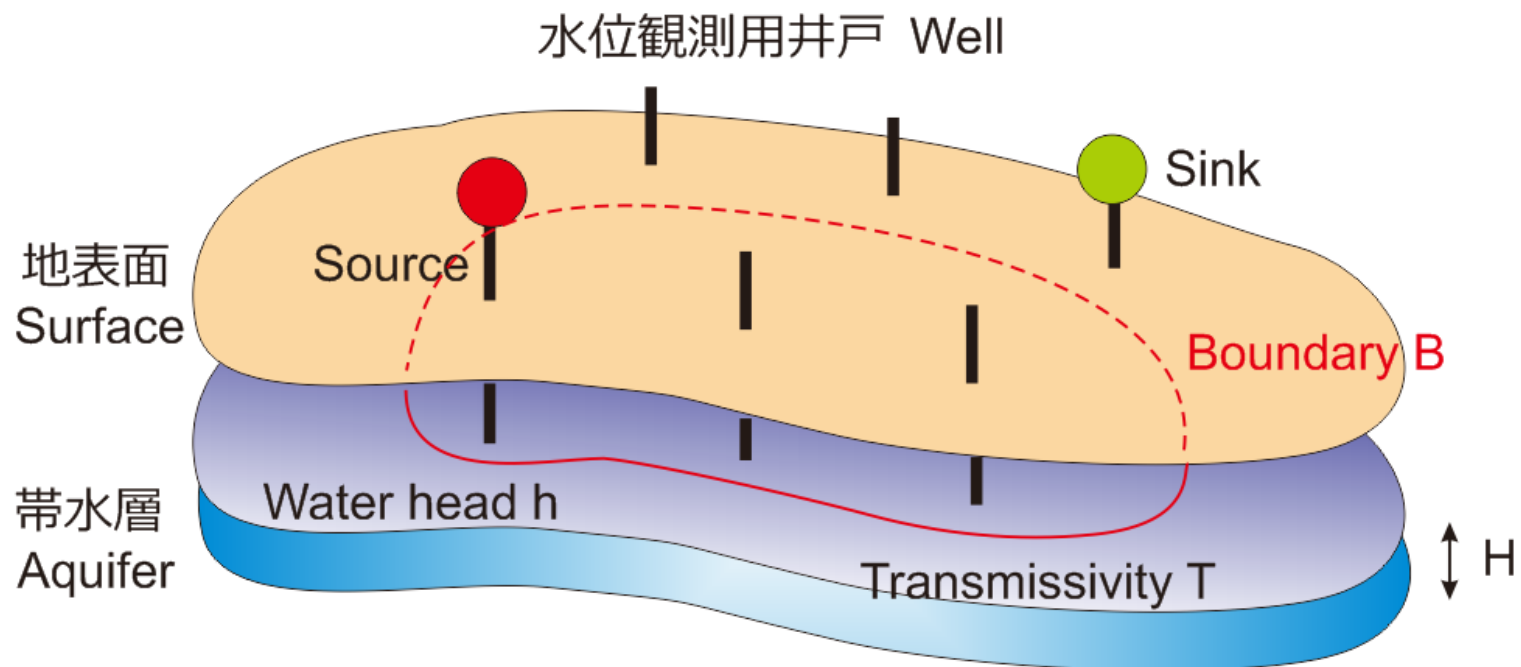
- Boundary内部の水量は一定

Darcyの法則

- 体積フラックスが圧力勾配に比例
- 圧力は井戸の水位から判断
 - 比例係数が透過率

現代性

- IoT で T を長期観測
- 地下水汚染への対応



帯水層問題 (1b) 時間依存 [4]

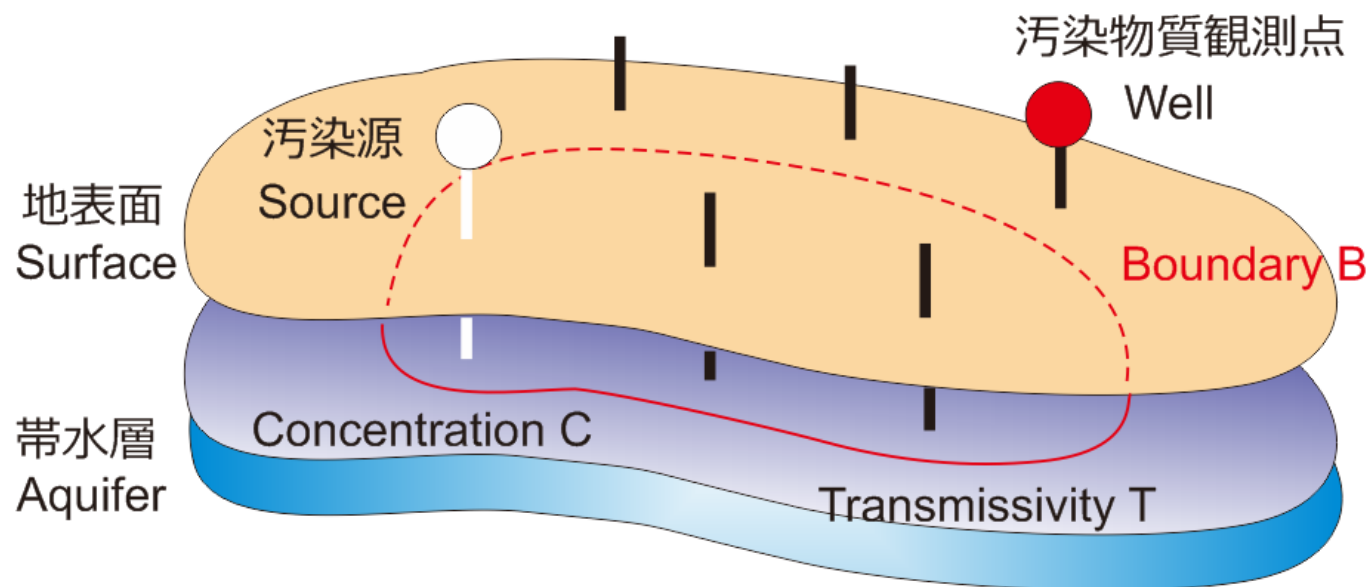
環境汚染物質が検出された。汚染源をどう特定するか？

⇒ 上流地点 j から当該地点 k に流れ込む確率 P_{jk} を順に求める

- 上流のsourceに観測物質(ラジオアイソトープ等)を瞬間的に投入
- 早く観測されれば確率は大きい
- 観測時間が短ければ確率は大きい

現代性

- 地下水汚染への対応



帯水層問題 (2) 不均一な透水性

Cardiff & Kitanidis の定常状態問題 [1]

$$\nabla \cdot (T \nabla h) = \begin{cases} \pm q \\ 0 \end{cases}$$

$$\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_{24}), \mathbf{T} = (T_1, \dots, T_n) \quad (m = 4 \times 6, n = 10 \times 10)$$

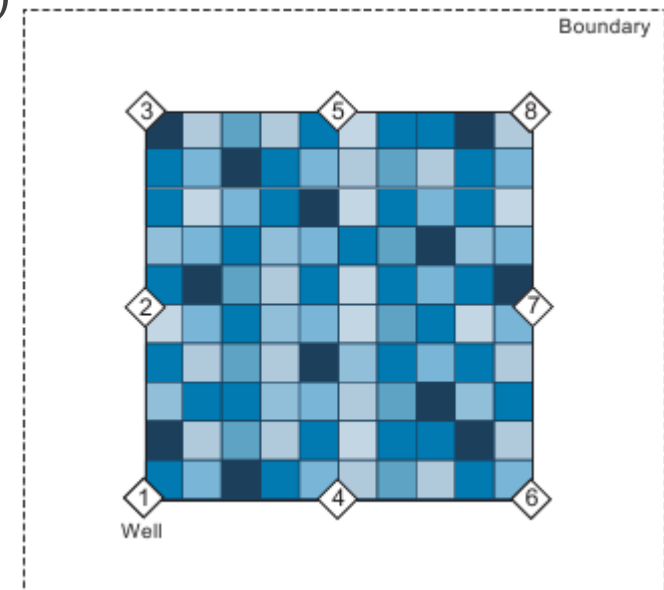
fitting

$$\text{目的関数 } L = \Delta \mathbf{h}^T \mathbf{C}^{-1} \Delta \mathbf{h} + \Delta \mathbf{T}^T \mathbf{Q}^{-1} \Delta \mathbf{T}$$

$$\Delta \mathbf{h} = \mathbf{h}_{\text{calc}} - \mathbf{h}_{\text{obs}}, \quad \Delta \mathbf{T} = \mathbf{T} - \beta \mathbf{T}_{\text{ref}}$$

- 逐次近似で最適化
- Adjoint法で \mathbf{H} を計算

$m \ll n$ なので追加
スムーズな結果



COMSOL Multiphysicsの出番

関数形と境界条件をメニューから指定してPDEの解が得られる

Adjoint ψ^* の方程式も同様にして解ける

$$g = \nabla \cdot (D\nabla\psi^* + \mathbf{v}\psi^*) \quad (\mathbf{r} \in \Omega)$$
$$\mathbf{n} \cdot (D\nabla\psi^* + \mathbf{v}\psi^*) = q \quad (\mathbf{r} \in \Gamma_\Omega), \quad g = 0 \quad (\mathbf{r} \in \partial\Omega)$$

具体的な H_{ij} の計算式はCardiff & Kitanidis [1]にある。

- 総説は[8]。

まとめ

advection-diffusion type PDEで記述できる系の逆問題

- 目的関数を作る
 - 少ない情報から知見を得るために数学的工夫が必要
- 目的関数の最適化を行う
- 勾配の計算に随伴 adjoint を用いると効率的
- 帯水層問題に適用できた
- 拡散問題、熱伝導問題等多くの理工学的問題に応用できる

参考資料 [8]

参考文献

- [1] M. Cardiff and P.K. Kitanidis, *Computers & Geosciences* **34** (2008) 1480-1491.
“Efficient solution of nonlinear, underdetermined inverse problems with a generalized PDE model”
- [2] 林 茂雄, *Excellによる理工系のための統計学* (東京化学同人, 2016)
- [3] H.J.C. Berendsen (林・馬場 訳), *データ・誤差解析の基礎* (東京化学同人, 2013)
- [4] R.M. Neupauer and J.L. Wilson, *Water Resources research* **35** (1999) 3389-3398.
“Adjoint method for obtaining backward-in-time location and travel time probabilities of a conservative groundwater contaminant”
- [5] J. Crank, *The Mathematics of Diffusion*, 2nd Ed. (Oxford, 1975)
- [6] R.E. Taylor (林・馬場 訳), *計測における誤差解析入門* (東京化学同人, 2000)
- [7] 林 茂雄, *移動現象論入門* (東洋書店, 2007)
- [8] N.-Z. Sun, *Inverse Problems in Groundwater Modeling* (Kluwer, 1994)
N.-Z. Sun and A.Y. Sun, “Inverse methods for parameter estimations” (paper2005_1.pdf、インターネット検索)