

IoT活用によるものづくりのための基礎セミナー第3回
電通大学 リサーチユ3階 2017 4.19

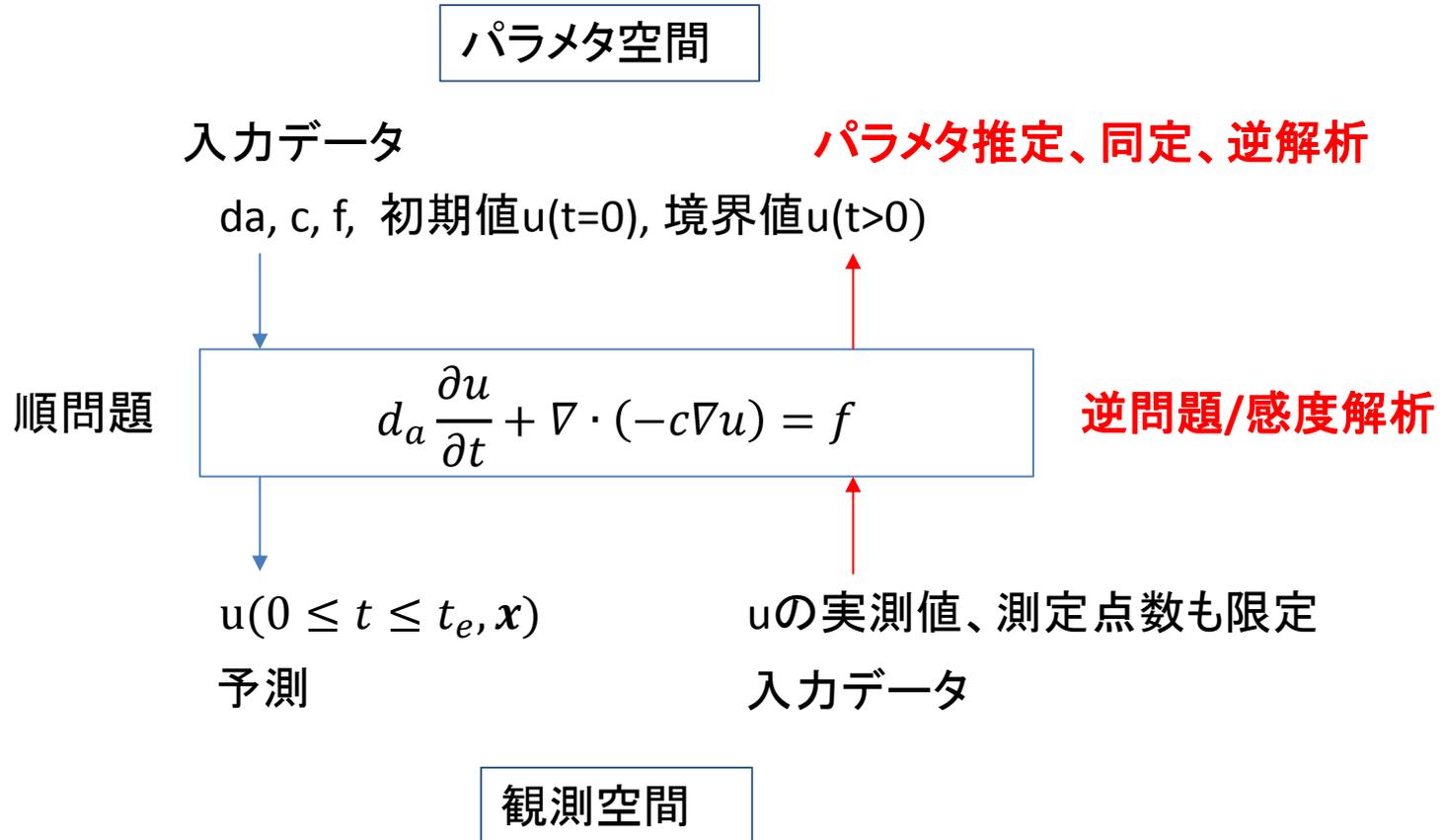
逆問題の理解のための COMSOL Multiphysics®

橋口真宜

第1技術部

計測エンジニアリングシステム株式会社

逆問題とは

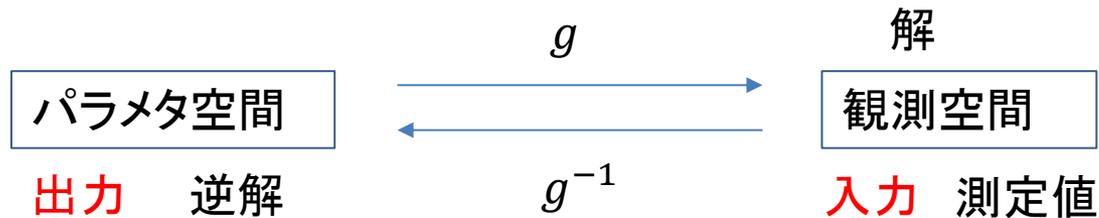


適切か非適切か

非適切問題

ill-posed problem

(適切 : well-posed)



非適切性

以下の一つでも不成立となる場合

- 逆解が存在する
- 逆解がただ一つである
- 入力データの誤差が小さければ、出力データの誤差も小さい

逆問題の例

時間依存問題

1階線形常微分方程式

数学モデル

$$\frac{dw}{dt} = u(t)w, \quad w(0) = w_0 \neq 0$$

順問題

$u(t)$ が既知の連続関数

例 $u(t) = \cos(t)$

$$w(t) = w_0 e^{\int_0^t u(\tau) d\tau}$$

$$w(t) = w_0 \exp(\sin(t))$$

逆問題

$u(t)$ が未知、 $w(t)$ が与えられる

係数決定問題

$$u(t) = \frac{1}{w} \frac{dw}{dt}$$

$w(t)$ が1階連続微分可能
である場合には適切

COMSOL Multiphysicsの利用

数学モデル

$$\frac{dw}{dt} = u(t)w, \quad w(0) = w_0 \neq 0 \quad 0 \leq t \leq 2\pi$$

順問題

$u(t)$ がわかっている。 $u(t)=\cos(t)$ とする。
 $w(0)=1$ でわかっているとする。

COMSOL Desktop

(1)空間0次元ODE, 時間依存

(2)初期値設定 $w_0=1$

グローバル定義
 パラメーター

| 名前 | 式 |
|----|---|
| w0 | 1 |

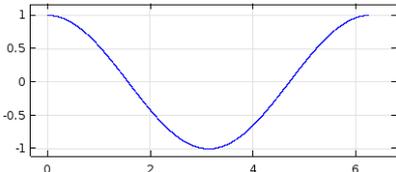
(3)コンポーネント1:定義:関数:解析的

関数名: u

定義

式: $\cos(t)$

引数: t



(4)グローバルODE

グローバル方程式

$f(u, u_t, u_{tt}, t) = 0, u(t_0) = u_0, u_t(t_0) = u_{t0}$

| 名前 | f(u, u_t, u_{tt}, t) (1) | 初期値 (u_) | 初期値 (u_) |
|----|--------------------------|----------|----------|
| w | $w_t - u(t)*w$ | w0 | 0 |
| S | $S_t - u(t)$ | 0 | 0 |

$$\frac{dw}{dt} - uw = 0$$

$$S = \int_0^t u(\tau) d\tau$$

(5) 時間依存計算

スタディ 1
 ステップ 1: 時間依存

(6) 結果

1D プロットグループ 1
 グローバル 1
 グローバル 2

| 式 |
|--------------|
| comp1.w |
| exp(comp1.S) |

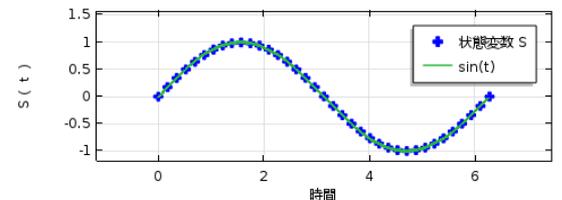
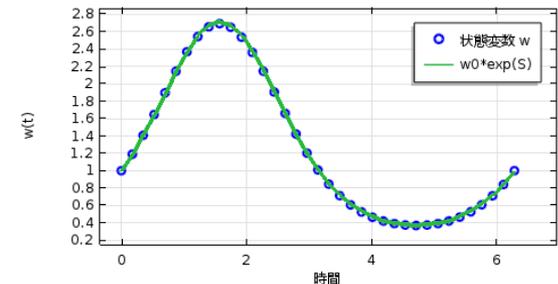
Sのチェック

スタディ設定

時間単位: s

時間: range(0, 2*pi/36, 2*pi)

解w(t)



COMSOL Multiphysicsの利用

数学モデル

$$\frac{dw}{dt} = u(t)w, \quad w(0) = w_0 \neq 0 \quad 0 \leq t \leq 2\pi$$

逆問題

$w(t)$ を与え、 $u(t)$ を未知。

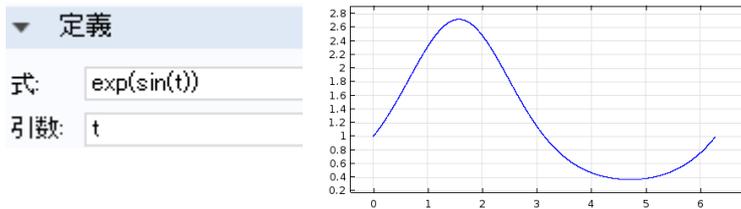
COMSOL Desktop

$$u(t) = \frac{1}{w} \frac{dw}{dt}$$

$$w(t) \in C^1[0, 2\pi]$$

(1)空間0次元ODE, 時間依存

(2)コンポーネント1: 定義: 関数: 解析的



(3) グローバルODE

| 名前 | f(u,ut,utt,t) (1) | 初期値 (u_) |
|----|---------------------------------|----------|
| u | $u - \frac{1}{w} \frac{dw}{dt}$ | 0 |

$$u(t) - \frac{1}{w} \frac{dw}{dt} = 0$$

(4) 時間依存計算

スタディ 1
ステップ 1: 時間依存

スタディ設定
時間単位: s
時間: range(0, 2*pi/36, 2*pi)

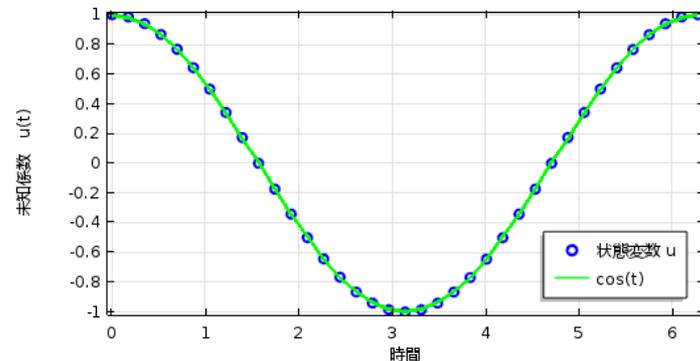
(5) 結果

1D プロットグループ 1
グローバル 1
グローバル 2

| | |
|---|---------|
| 式 | comp1.u |
| 式 | cos(t) |

未知係数 $u(t)$

求まる: 適切



逆問題の例

空間依存問題

順問題：定常1次元拡散方程式

透水係数Kを与えて、解hを求める。

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x} \right] = 0 \quad x \in [0, L]$$

| | | |
|-------|-------------------------|------------|
| h0 | 1 | 1 |
| hL | 2 | 2 |
| Q | 1 | 1 |
| K | 1e-10 | 1E-10 |
| alpha | log(K) | -23.025851 |
| L | 1 | 1 |
| b | 1 | 1 |
| C | (hL-h0)/(exp(-alpha)*L) | 1E-10 |

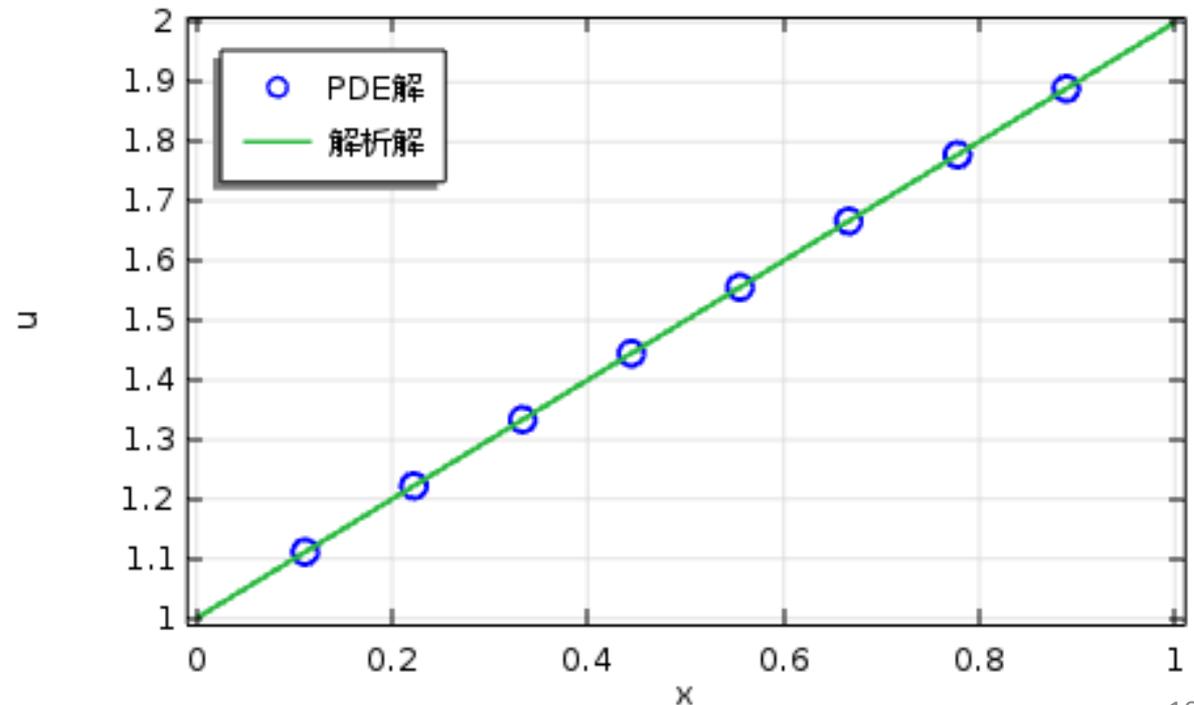
$$h(0) = h_0 \quad x = 0$$

$$h(L) = h_L \quad x = L$$

$$\alpha(x) = \ln K(x)$$

ダルシー流では
Kが $10^{(-n)}$, $n=9-14$ と
いった具合に非常に
小さいので対数を
とると便利である。

ライングラフ: 従属変数 u
ライングラフ: $h_0 + C \cdot \exp(-\alpha) \cdot x$



逆問題：両端ディリクレ条件の場合

境界条件によって不適切になる例

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x} \right] = 0$$

$$K(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x} = C$$

$$\frac{\partial h(x)}{\partial x} = \frac{C}{K(x)} = \frac{C}{e^{\alpha(x)}} = C e^{-\alpha(x)}$$

$$h(x) = h_0 + C \int_0^x e^{-\alpha(\xi)} d\xi$$

$$h_L - h_0 = C \int_0^L e^{-\alpha(\xi)} d\xi$$

$$\therefore C = \frac{h_L - h_0}{\int_0^L e^{-\alpha(\xi)} d\xi}$$

観測誤差が無い

$$h(x) = h_{data}(x)$$

$$h_{data}(x) = h_0 + C \int_0^x e^{-\alpha(\xi)} d\xi$$



$\alpha(x)$ を決められるか。

答: **いいえ**

$$h_{data}(x) = h_0 + \frac{h_L - h_0}{\int_0^L e^{-\alpha(\xi) + \beta} d\xi} \int_0^x e^{-\alpha(\xi) + \beta} d\xi$$

$$h_{data}(x) \longrightarrow \alpha(x) - \beta \quad \beta \text{ 任意定数}$$

逆問題：片側ノイマン条件：連続データ

境界条件によって適切になる例

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x} \right] = 0 \quad x \in [0, L]$$

$$h(0) = h_0 \quad x = 0$$

$$K(x) \frac{\partial h(x)}{\partial x} = Q \quad x = L$$

$$\alpha(x) = \ln K(x)$$

$$\frac{\partial h(x)}{\partial x} = \frac{Q}{K(x)} = Q e^{-\alpha(x)}$$

$$h(x) - h_0 = Q \int_0^x e^{-\alpha(\xi)} d\xi$$

$$h(x) \longleftrightarrow \alpha(x) \quad 1 \text{ 対 } 1$$

$h_{data}(x)$ 観測誤差無し、かつ1回微分可能

$$h_{data}(x) = h(x), \quad \frac{\partial h_{data}}{\partial x} = \frac{\partial h}{\partial x}$$

$$-\alpha(x) = \ln \left[\frac{1}{Q} \frac{\partial h_{data}(x)}{\partial x} \right]$$

連続データが取れる場合は
この式で計算可能

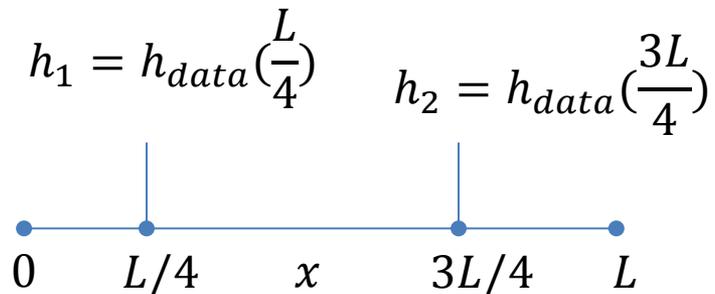
逆問題：片側ノイマン条件：離散データ（1）

離散点の観測データによって多項式で表現することで適切になる例

しかし、離散点でしかデータが無い場合はどうなるか。

$$h_{data}(x_i) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

例えば、 $N=2$ 個の観測データを考える。
各データはノイズを含まないとする。



観測データが x の連続関数であればこの式が使える。

$$-\alpha(x) = \ln \left[\frac{1}{Q} \frac{\partial h_{data}(x)}{\partial x} \right]$$

答： x の多項式で h_{data} を表現する。

$h_{data}(x)$ を連続にする。適切になる。

未知数2個

$$h_{data}(x) = h_0 + b_1 x + b_2 x^2$$

$$x = L/4 \quad h_{data} = h_1$$

$$x = 3L/4 \quad h_{data} = h_2$$

$$b_1 = \frac{2}{3L} (9h_1 - h_2 - 8h_0)$$

$$b_2 = -\frac{8}{3L^2} (3h_1 - h_2 - 2h_0)$$

$$-\alpha(x) = \ln \left[\frac{1}{Q} (b_1 + 2b_2 x) \right]$$

ただし、 $b_1 + 2b_2 x > 0$ に限る。

逆問題: COMSOL Multiphysicsでの検算

h_0 、 h_1 、 h_2 で係数 b_1, b_2 を決めた $hdata$ で α を決めてPDE解を求め、観測値と比較

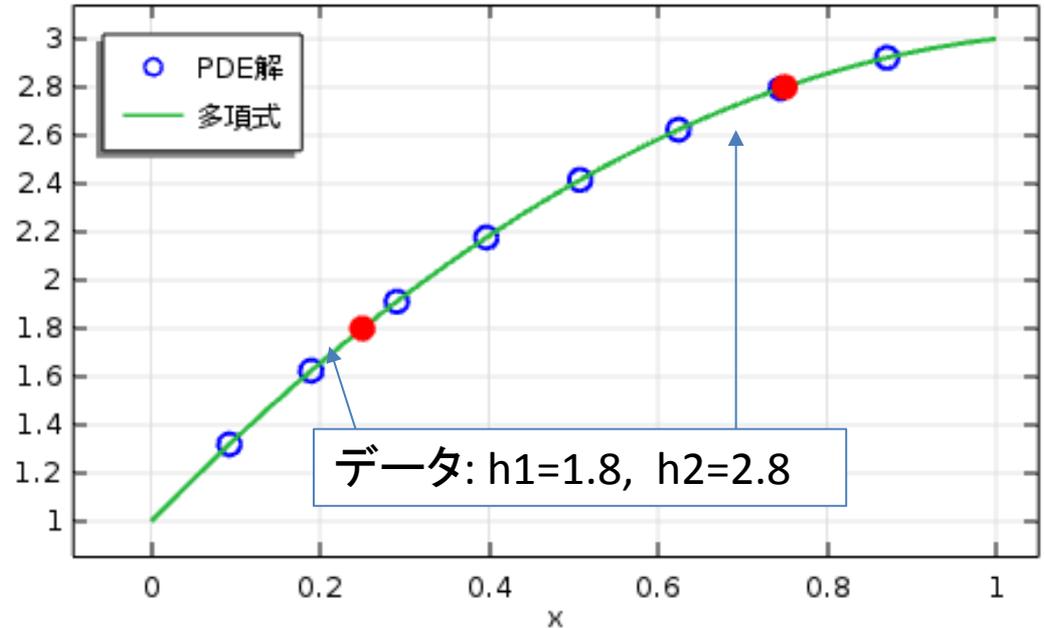
| 名前 | 式 |
|---------------|-----------------------------|
| $hdata$ | $h_0 + b_1 * x + b_2 * x^2$ |
| $d(hdata, x)$ | $d(hdata, x)$ |
| $alpha_d$ | $-\log(1/Q * dhdata/dx)$ |

多項式 $hdata$ の x 微分は
 $d(hdata, x)$ と記述すれば良い。

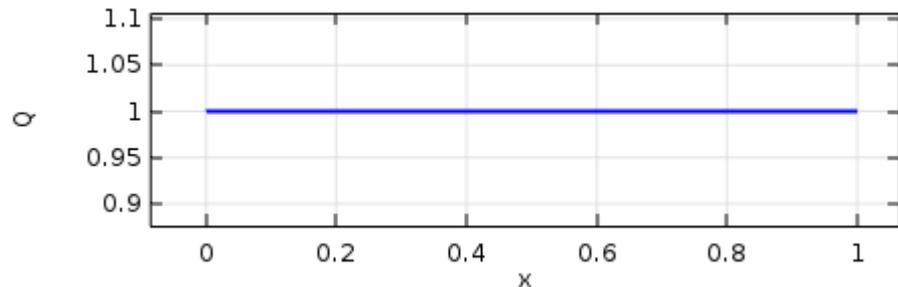
h

$Q=1$ を与えている。

- ▲ グローバル定義
 - Pi パラメーター
 - 材料
- ▲ コンポーネント 1 (comp1)
 - ▲ 定義
 - a= 変数 1
 - ビュー 1
 - ▲ ジオメトリ 1
 - 線分 1 (l1)
 - 一体化モデルで完成 (fin)
 - 材料
 - ▲ Δu 係数形式 PDE (c)
 - 係数形式 PDE 1
 - ゼロ流束 1
 - 初期値 1
 - ディリクレ境界条件 1
 - 流束 / ソース 1



流量のチェック ($Q=1$ を満たしているか)



逆問題：片側ノイマン条件：離散データ（2）

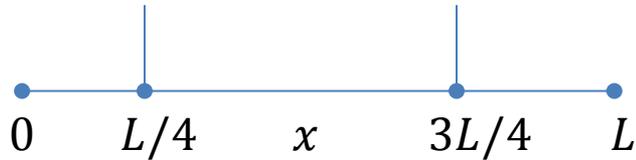
データは離散でも推定パラメタ側に制限をかけると適切になる例

しかし、離散点でしかデータが無い場合はどうなるか。

$$h_{data}(x_i) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

例えば、N=2個の観測データを考える。
各データはノイズを含まないとする。

$$h_1 = h_{data}\left(\frac{L}{4}\right) \quad h_2 = h_{data}\left(\frac{3L}{4}\right)$$



微分を含まない式を使うとすれば、 α は不連続が良い。

$$h(x) - h_0 = Q \int_0^x e^{-\alpha(\xi)} d\xi$$

$$x \in \left[0, \frac{L}{4}\right]$$

$$x \in \left[0, \frac{3L}{4}\right]$$

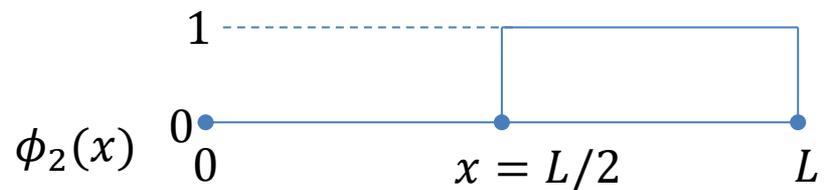
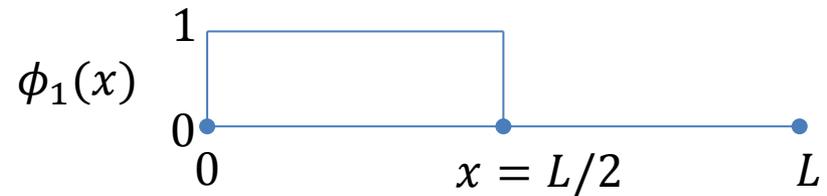
$$a_1 = \ln \left[\frac{QL}{4(h_1 - h_0)} \right]$$

$$a_2 = \ln \left[\frac{QL}{4(h_2 - 2h_1 + h_0)} \right]$$

答：2個の未知数を対応させる。

$\alpha(x)$ に制限を加える。well-posedになる。

$$a_1, a_2 \quad \alpha(x) = a_1 \phi_1(x) + a_2 \phi_2(x)$$



逆問題: COMSOL Multiphysicsによる検算

h_0 、 h_1 、 h_2 、 Q で係数 a_1 、 a_2 、 α を決めて解析解 $h(x)$ を求めて、観測値と比較

$$h(x) - h_0 = Q \int_0^x e^{-\alpha(\xi)} d\xi$$

式:

$$h_0 + Q * (\text{if}(x \leq L/2, \exp(-a_1) * x, \exp(-a_1) * L/2 + \exp(-a_2) * (x - L/2)))$$

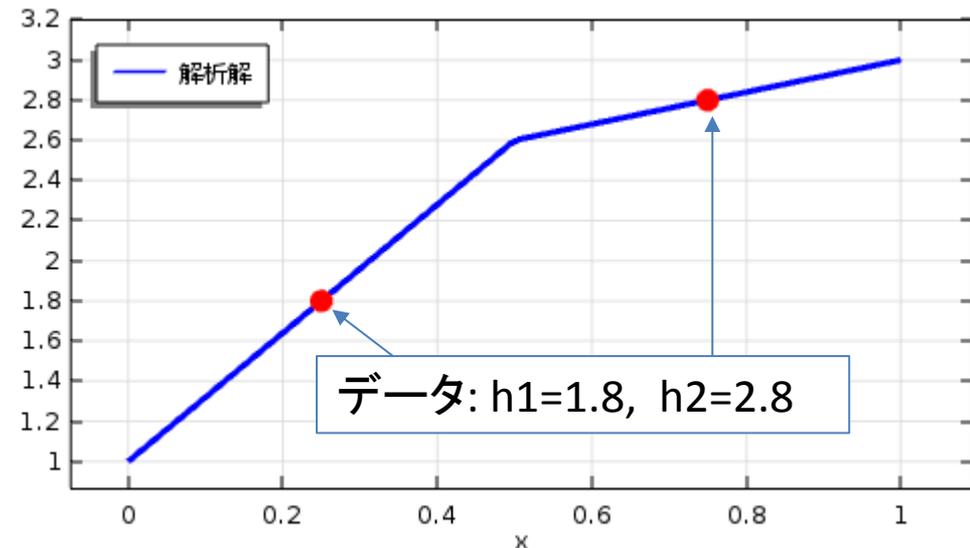
$$x \leq L/2$$

$$h(x) = h_0 + Q e^{-a_1 x}$$

$$x \geq L/2$$

$$h(x) = h_0 + Q \left\{ e^{-a_1} \frac{L}{2} + e^{-a_2} \left(x - \frac{L}{2} \right) \right\}$$

コ



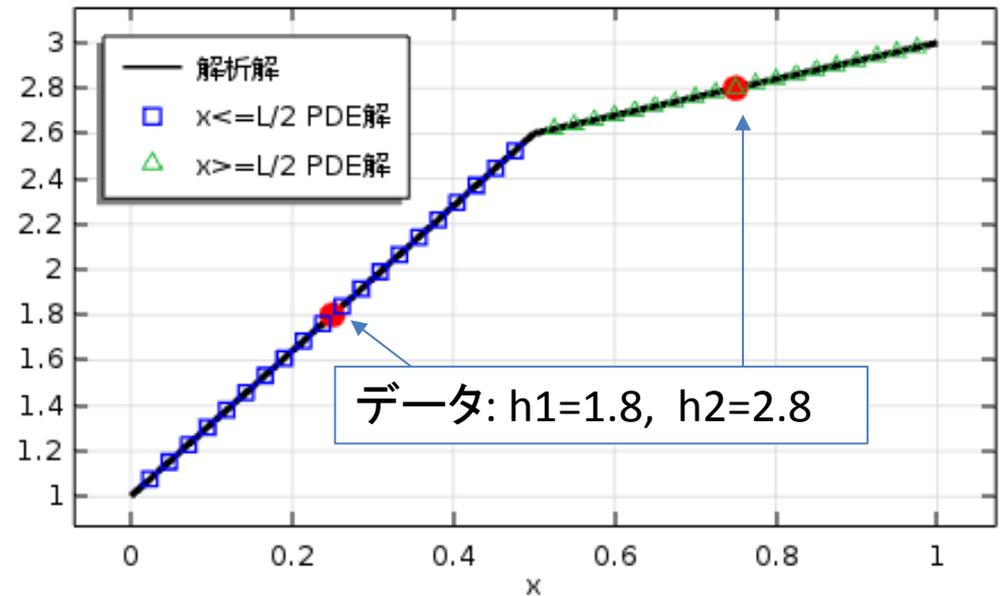
パラメタ α が不連続として推定しているので、解 h の分布も $x=L/2$ で折れ曲がっている。観測値 h_1 、 h_2 との整合は取れている。

逆問題：PDEで解く場合

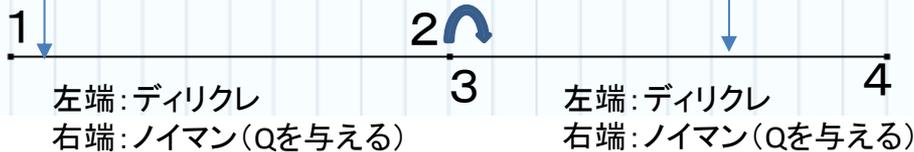
推定した a_1, a_2 から h の分布をPDEによって数値解として算出することもできる。

(解析解ではなく、数値解とした例) 実用的

- ▲ ジオメトリ 1
 - 線分 1 ($i1$)
 - 線分 2 ($i2$)
 - アセンブリモデルで完成 (fin)
- 材料
- ▲ Δu 係数形式 PDE (c)
 - ▷ 係数形式 PDE 1
 - ▷ ゼロ流束 1
 - ▷ 初期値 1
 - ▷ ディリクレ境界条件 1
 - ▷ 流束 / ソース 1
 - 方程式ビュー
- ▲ Δu 係数形式 PDE 2 ($c2$)
 - ▷ 係数形式 PDE 1
 - ▷ ゼロ流束 1
 - ▷ 初期値 1
 - ▷ ディリクレ境界条件 1
 - ▷ 流束 / ソース 1



点2の解を点3に伝える。



感度と随伴方程式

目的関数の勾配

逆問題は最適化と呼ぶこともある。観測データと解 $x(p,t)$ の差を最小化するようなパラメタ p を求める問題になるからである。

このような問題を扱う際に感度を求める必要があり、直接法と随伴法がある。

支配方程式

$$h(x, \dot{x}, p, t) = 0$$

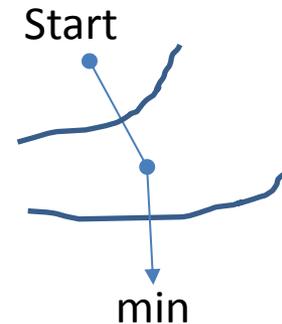
$$x(0) = x_0(p)$$

目的関数の最小化

$$\int_0^T f(x, p) dt \equiv F(x, p)$$

p : パラメタ、 x : 解、 $d/dt = \cdot$

勾配に基づく最適化アルゴリズムでは、勾配を計算する必要がある。



勾配

$$\frac{dF(x(p), p)}{dp} = \int_0^T \left(\frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial f}{\partial p} \right) dt$$

ラグランジュ関数

拘束条件2種類に対してラグランジュ乗数2種類

$$\mathcal{L} \equiv \int_0^T \{ \underset{\text{目的}}{f(x, p)} - \underset{\text{方程式}}{\lambda^T h(x, \dot{x}, p, t)} \} dt - \underset{\text{初期条件}}{\mu^T (x(0) - x_0(p))}$$

$$\frac{dF}{dp} = \frac{d\mathcal{L}}{dp}$$

微分では消えるので
実際には不要

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \int_0^T \left\{ \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial f}{\partial p} - \lambda^T \left(\frac{\partial h}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{d\dot{x}}{dp} + \frac{\partial h}{\partial p} \right) \right\} dt \quad 0$$

$$\frac{d}{dt} \left(\lambda^T \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{dx}{dp} \right) = \lambda^T \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{d\dot{x}}{dp} + \lambda^T \frac{\partial \dot{h}}{\partial \dot{x}} \frac{dx}{dp} + \frac{d\lambda^T}{dt} \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{dx}{dp} \quad \text{を使って部分積分}$$

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \int_0^T \left\{ \left(\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda^T \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{d\lambda^T}{dt} \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \right) \frac{dx}{dp} + \frac{\partial f}{\partial p} - \lambda^T \frac{\partial h}{\partial p} \right\} dt - \lambda^T \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{dx}{dp} \Big|_0^T$$

いくつかの工夫

解 x をパラメタ p で微分する(dx/dp)の計算は避けたい。

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \int_0^T \left\{ \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda^T \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{d\lambda^T}{dt} \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \right) \frac{dx}{dp} + \frac{\partial f}{\partial p} - \lambda^T \frac{\partial h}{\partial p}}_{\textcircled{2}} \right\} dt - \underbrace{\lambda^T \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{dx}{dp}}_{\textcircled{1}} \Big|_0^T$$

$\frac{dx}{dp}(T)$ の計算をしない \longrightarrow ①で $\lambda^T(t=T) = 0$ とすれば良い。

$\frac{dx}{dp}(t)$ の計算をしない \longrightarrow ②=0とすれば良い。

パラメタ p を変えて都度、解を求める必要がある。計算量大

従って、以下のアルゴリズムを得る。

(1) $h(x, \dot{x}, p, t) = 0$ $x(0) = x_0(p)$ を $t=0$ から T まで計算する。(順問題)

(2) $\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda^T \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{d\lambda^T}{dt} \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} = 0$ を $\lambda^T(t=T) = 0$ を初期値として解き、
 $t=T$ から 0 まで $\lambda^T(t)$ を求める。 λ は**随伴変数**、式を**随伴方程式**と呼ぶ。

(3) $\frac{dF}{dp} = \int_0^T \left\{ \frac{\partial f}{\partial p} - \lambda^T \frac{\partial h}{\partial p} \right\} dt + \lambda^T \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{dx}{dp} \Big|_{t=0}$ で感度を得る。

具体例による説明

支配方程式

$$h = \frac{dx}{dt} - bx = 0$$

$$x(0) - a = 0$$

勾配を求めるもの

$$F(p) = \int_0^T f(x, p) dt$$

$$f(x, p) = x$$

$$p = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

拘束ベクトルの次元=1

$$\lambda^T = \lambda \quad \text{スカラー}$$

正解 $F = \int_0^T ae^{bt} dt = \frac{a}{b}(e^{bT} - 1)$

$$\frac{dF}{da} = \frac{1}{b}(e^{bT} - 1) \quad \frac{dF}{db} = \frac{a}{b}Te^{bT} - \frac{a}{b^2}(e^{bT} - 1)$$

(1) 支配方程式を解く。

$$x(t) = ae^{bt} \quad (\text{実際は数値的に解く})$$

(2) 随伴方程式を解く。

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 1 \quad \frac{\partial h}{\partial x} = \frac{\partial(\dot{x} - bx)}{\partial x} = -b$$

$$\frac{\partial h}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial(\dot{x} - bx)}{\partial \dot{x}} = 1 \quad \text{となるので、}$$

$$\begin{cases} 1 - \lambda(-b) + \frac{d\lambda}{dt}1 = 0 \\ \lambda(T) = 0 \end{cases}$$

$$\lambda(t) = b^{-1}(e^{b(T-t)} - 1)$$

(3) 感度を計算する。

$$\frac{dF}{dp} = \int_0^T \left\{ \frac{\partial f}{\partial p} - \lambda \frac{\partial h}{\partial p} \right\} dt + \lambda \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} \frac{dx}{dp} (t=0)$$

$$\frac{dF}{da} \quad \frac{dF}{db} \quad \begin{matrix} \lambda(0)1 & (1 \ 0) \\ (0 \ 0) & \lambda(t)(0 \ -x) \\ & \downarrow \\ & -ae^{bt} \end{matrix}$$

正解と一致！

定常問題での随伴方程式(1)

支配方程式

$$g(x, p) = 0$$

感度を求めたいもの

$$f(x)$$

ラグランジュ関数

$$\mathcal{L}(x, p, \lambda) = f(x) + \lambda^T g(x, p)$$

$$f = \mathcal{L}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda^T \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{d\lambda^T}{dt} \frac{\partial g}{\partial \dot{x}} = 0$$

定常にしたものと一致する。

随伴方程式

$$\frac{df}{dp} = \frac{d\mathcal{L}}{dp} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{d\lambda^T}{dp} g + \lambda^T \left(\frac{\partial g}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial g}{\partial p} \right)$$

$$g = 0$$

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \lambda^T \left(\frac{\partial g}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial g}{\partial p} \right)$$

$$= \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial g}{\partial x} \right)}_{\textcircled{1}} \frac{dx}{dp} + \lambda^T \frac{\partial g}{\partial p}$$

①

↓
計算量大

①が0になるようにλを決めれば良い。

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \lambda^T \frac{\partial g}{\partial p}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial g}{\partial x} = 0 \iff \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)^T \lambda = - \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^T$$

定常問題での随伴方程式(2)

支配方程式

$$g(x, p) = 0$$

感度を求めたいもの

$$f(x, p)$$

ラグランジュ関数

$$\mathcal{L}(x, p, \lambda) = f(x, p) + \lambda^T g(x, p)$$

$$f = \mathcal{L}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} - \lambda^T \frac{\partial g}{\partial x} + \frac{d\lambda^T}{dt} \frac{\partial h}{\partial \dot{x}} = 0$$

定常にしたものと一致する。

随伴方程式

$$\frac{df}{dp} = \frac{d\mathcal{L}}{dp} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{d\lambda^T}{dp} g + \lambda^T \left(\frac{\partial g}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial g}{\partial p} \right)$$

$$g = 0$$

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial f}{\partial p} + \lambda^T \left(\frac{\partial g}{\partial x} \frac{dx}{dp} + \frac{\partial g}{\partial p} \right)$$

$$= \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial g}{\partial x} \right) \frac{dx}{dp} + \lambda^T \frac{\partial g}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial p}$$

①

↓
計算量大

①が0になるようにλを決めれば良い。

$$\frac{d\mathcal{L}}{dp} = \lambda^T \frac{\partial g}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial p}$$

付加項があっても良い。

$$\frac{\partial f}{\partial x} + \lambda^T \frac{\partial g}{\partial x} = 0 \iff \left(\frac{\partial g}{\partial x} \right)^T \lambda = - \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^T$$

最小二乗法による目的関数

N個の観測データ
p個のパラメタ

$$(x_{1,1}, y_{1,1}), (x_{2,1}, y_{2,1}), \dots, (x_{N,1}, y_{N,1})$$

$$(x_{1,2}, y_{1,2}), (x_{2,2}, y_{2,2}), \dots, (x_{N,2}, y_{N,2})$$

...

$$(x_{1,p}, y_{1,p}), (x_{2,p}, y_{2,p}), \dots, (x_{N,p}, y_{N,p})$$

$$X = (x_1 \dots x_p) \quad \text{独立変数}$$

$$\mathbf{b} = (b_1 \dots b_p)^T \quad \text{パラメタ}$$

$$\mathbf{f}_b = X\mathbf{b}$$

$$\mathbf{y} = (y_1 \dots y_N)^T \quad \text{観測データ}$$

$$L = \|\mathbf{y} - \mathbf{f}_b\|^2 = \|\mathbf{y} - X\mathbf{b}\|^2 \quad \text{最小化}$$

$$\frac{\partial L}{\partial b_1} = 0, \dots, \frac{\partial L}{\partial b_p} = 0$$

$$f_b(X) \equiv b_1 + Xb_2 + X^2b_3$$

$$X = (x_1 \ x_2 \ x_3) = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{100,1} & x_{100,2} & x_{100,3} \end{pmatrix}$$

$N = 100, p = 3$ の例

実問題と着目点

求めたいパラメタ数は m 個

N 回の測定

$G: N \times m$ 行列

s : 求めたいパラメタを要素にもつ $m \times 1$ ベクトル

y : 観測される $N \times 1$ ベクトル

y はノイズを含まない $\boxed{y = Gs} \rightarrow \boxed{s = G^{-1}y}$ $N \neq m$
逆行列を計算できない。

y はノイズを含む $\boxed{(y_{data} - y_{predicted})^2}$ を最小化

何を考えるか

y はノイズを含む

$$(\mathbf{y}_{data} - \mathbf{y}_{predicted})^2 \text{ を最小化}$$



$$(\mathbf{y} - G\mathbf{s})^T (\mathbf{y} - G\mathbf{s}) \text{ を最小化}$$

$N \gg m$ この時は正規方程式が求まる。→ 最良推定値 $\hat{\mathbf{s}} = (G^T G)^{-1} G\mathbf{y}$

$N \ll m$

不足決定問題
(Underdetermined problem)

正則化が必要

$$(\mathbf{y} - G\mathbf{s})^T (\mathbf{y} - G\mathbf{s}) + \alpha g(\mathbf{s}) \text{ を最小化}$$

そのために感度行列を計算する方法があるが計算量膨大
計算量を減らすために、**随伴法**を考えることになる。

PDEにおける順問題

$$\text{PDE } p_i(u, \mathbf{s}) \\ i = 1, \dots, N$$

$$\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_m)$$

境界条件などを変更
し、N回の計算を行う。



N個の計算値

$$h_1(\mathbf{s}), \dots, h_N(\mathbf{s})$$

$$h_i = \int_A p_i(u, \mathbf{s}) dA$$

定常の係数形式PDEとの関係

支配方程式

参考文献1のp.1488

$$f = \nabla \cdot (-c\nabla u - bu + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au$$

$$ju = r \quad \text{ディリクレ条件}$$

$$-n \cdot (-c\nabla u - bu + \gamma) = g - qu \quad \text{ノイマン条件}$$

COMSOL Multiphysicsの
係数形式PDE

ディリクレ条件に加えて流束条件
(ノイマン条件)Qを与えると適切な
問題となったことを思い出す。

感度を求めたいもの

$$h_i = \int_A p_i(u, v) dA \quad u: \text{PDEの解} \quad v: \text{パラメタ}$$

感度行列

$$\frac{\partial h_i}{\partial v} = \int_A \left(\frac{\partial p_i}{\partial v} + \frac{\partial p_i}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial v} \right) dA$$

パラメタ v を変更する毎にPDEを計算する必要がある。計算量が大。これを除去したい。

ラグランジュ関数と随伴方程式を考える。

感度の計算式

感度

参考文献1 p.1490

$$\frac{\partial h_i}{\partial v} = \int_A \frac{\partial p}{\partial v} dA + \int_A \psi \left[\frac{\partial a}{\partial v} u + \frac{\partial \beta}{\partial v} \cdot \nabla u - \frac{\partial f}{\partial v} \right]$$

式(28)

$$+ \nabla \psi \cdot \left[\frac{\partial c}{\partial v} \nabla u + \frac{\partial b}{\partial v} u - \frac{\partial \gamma}{\partial v} \right] dA$$

ψはパラメタvに依存しないので
随伴方程式で求めたψの値を
使いながら、各パラメタに対して
(28)式を積分すれば良い。

$$+ \int_{\Gamma_d} \frac{\partial}{\partial v} \begin{bmatrix} r \\ j \end{bmatrix} c^T \nabla \psi \cdot n d\Gamma - \int_{\Gamma_n} \psi \left(\frac{\partial g}{\partial v} - \frac{\partial q}{\partial v} u \right) d\Gamma$$

随伴変数ψに関する随伴方程式 式(29)

利点

$$-\frac{\partial p}{\partial u} = a\psi + \nabla \cdot (-c^T \nabla \psi - \beta\psi) + b \cdot \nabla \psi$$

ある観測値について、
この随伴方程式(29)を
一回だけ解けば良い。

$$\psi = 0$$

ディリクレ境界上

$$n \cdot (c^T \nabla \psi + \beta\psi) + q\psi = 0$$

ノイマン境界上

COMSOL Multiphysics® の出番

(1) 支配方程式は u を未知数として係数形式PDEで解くことができる。

(2) 随伴方程式は随伴変数 ψ を未知数として係数形式PDEで解くことができる。

$$-\frac{\partial p}{\partial u} = a\psi + \nabla \cdot (-c^T \nabla \psi - \beta\psi) + b \cdot \nabla \psi$$

$$\psi = 0 \quad \text{ディリクレ境界上}$$

$$n \cdot (c^T \nabla \psi + \beta\psi) + q\psi = 0 \quad \text{ノイマン境界上}$$

上述の(1)(2)共に、係数形式PDEインターフェースで実装できる。

参考文献1 p.1483 Table 1

パラメタ推定問題

ここではCOMSOL Multiphysics®の最適化モジュールを利用した例について検討する。

滞水層問題の再検討

支配方程式

$$h: R^n \rightarrow R^m$$

n個のパラメタsからm個のPDE解h(s)を出力する。

(m個の測定値と比較するため)

共分散行列

$R: m \times m$ 行列

誤差の共分散行列

$$R = \sigma_R^2 I$$

測定誤差は独立、偏差 σ_R^2 で一様に分布

$I \quad m \times m$

対角成分のみ1をもつ単位行列

最小化したいもの

不足決定問題 ($n > m$) ではペナルティ関数を付加する。

$$L(y, s) = L_{fitness}(y, s) + L_{penalty}(s)$$

$$L_{fitness}(y, s) = (y - h(s))^T R^{-1} (y - h(s))$$

yはm次元の測定値列ベクトル、sはn次元のパラメタ値列ベクトル

最小二乗法によるフィットネス

観測が独立性をもっており、精度 $\Delta H=1\text{cm}$ をもつとすると、

Hは圧力を水頭(ヘッド)で表現しているので単位は長さになっている。

$$L_{\text{fitness}}(y, s) = (y - h(s))^T R^{-1} (y - h(s))$$



$$L_{\text{fitness}} = \frac{\|y - h(s)\|^2}{\Delta H^2}$$

と記述できる。

滞水層問題の再検討

Kitanidisによるペナルティ項

$$L_{penalty} = (s - X\beta)^T Q^{-1} (s - X\beta)$$

$Q \equiv E[(s - X\beta)(s - X\beta)^T]$ 空間共分散関数

$E[]$: 期待値

X : 全ての要素が1のn次元列ベクトル

β : パラメタの平均値(スカラー)

$n = 2$ の例

$$s - X\beta = \begin{bmatrix} s_1 - 1\beta \\ s_2 - 1\beta \end{bmatrix}$$

$$(s - X\beta)^T = [s_1 - 1\beta \quad s_2 - 1\beta]$$

$$L_{penalty} = [s_1 - 1\beta \quad s_2 - 1\beta] Q^{-1} \begin{bmatrix} s_1 - 1\beta \\ s_2 - 1\beta \end{bmatrix}$$

滞水層問題の再検討

$$Q = (Q_{ij}) \quad n \times n \text{行列}$$

s は定常等方的ランダム場であると仮定する。

この場合、共分散行列は空間距離のみの関数とかがえられることができる。

$$Q_{ij} = q(|x_i - x_j|)$$

$$q = \exp(-h/r)$$

q の距離依存の形は、通常、バリオグラムで表現される。

$$\gamma(|x_i - x_j|) = q(0) - q(|x_i - x_j|)$$

ここでは γ 分布を次式で仮定

$$\gamma = \sigma^2(1 - e^{-h/r})$$

$q \rightarrow 0$ ($r \rightarrow \infty$)とすると、
 $1 = q(0)$ と決まる。

$1 - \exp(-h/r) = 1 - q$, つまり、 $q = \exp(-h/r)$ となる。

sillパラメタ $\sigma^2 = 1$ 、相関長さ $r = 50\text{cm}$

(このあたりの内容/仮定は適用対象に強く依存する。)

ペナルティ項の Q^{-1} をどう計算するか。

$$L_{\text{penalty}} = (\mathbf{s} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{Q}^{-1} (\mathbf{s} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

補助ベクトル \mathbf{u} の導入

$$\mathbf{u} = \mathbf{Q}^{-1} (\mathbf{s} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

この式では Q^{-1} が必要であるが、補助ベクトル \mathbf{u} を導入し、それを不要にする計算方式を利用する。

$$L_{\text{penalty}} = (\mathbf{s} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{u}$$

$$\mathbf{Q}\mathbf{u} = \mathbf{s} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

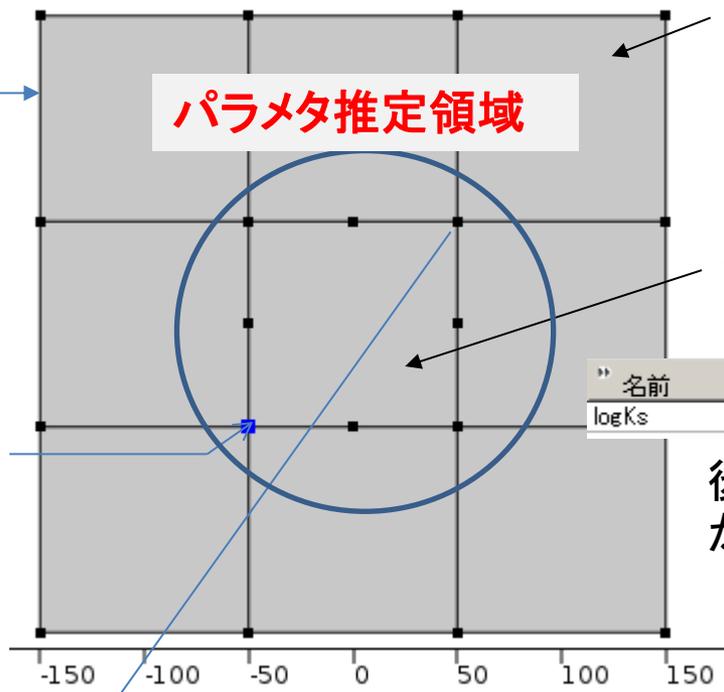
この計算では
 Q^{-1} の計算不要。

滞水層問題の再検討

300m × 300mの領域の計算(100m × 100mの領域も含む)

- ▲ Geometry 1
 - Square 1 (*sq1*)
 - ▨ Array 1 (*arr1*)
 - Point 1 (*pt1*)
 - Form Union (*fin*)
- ▶ 材料
- ▲ Darcy's Law (*dl*)
 - ▶ Fluid and Matrix Properties 1
 - ▶ No Flow 1
 - ▶ Initial Values 1
 - ▶ Fluid and Matrix Properties 2
 - ▶ Hydraulic Head 1
 - ▶ Mass Flux 1 質量流束N0を与える
 - ▶ Mass Flux 2
 - ▶ Mass Flux 3
 - ▶ Mass Flux 4
 - ▶ Mass Flux 5
 - ▶ Mass Flux 6
 - ▶ Mass Flux 7
 - ▶ Mass Flux 8 質量流束-N0
 - Equation View
- ▲ Optimization 2 (*opt2*)
 - ▶ Least-Squares Objective 1
 - ▶ Least-Squares Objective 2
 - ▶ Least-Squares Objective 3
 - ▶ Least-Squares Objective 4
 - Equation View
- ▶ Mesh 1

H=0



$10^{\log Ks0}$
固定

$10^{\log Ks}$
可変

後述の箇所から持ってくる。

4組の独立な組み合わせ(N0,-N0)に関する
実験パラメタファイルの読み込み
中央(100m)部分の箇所でのみ。

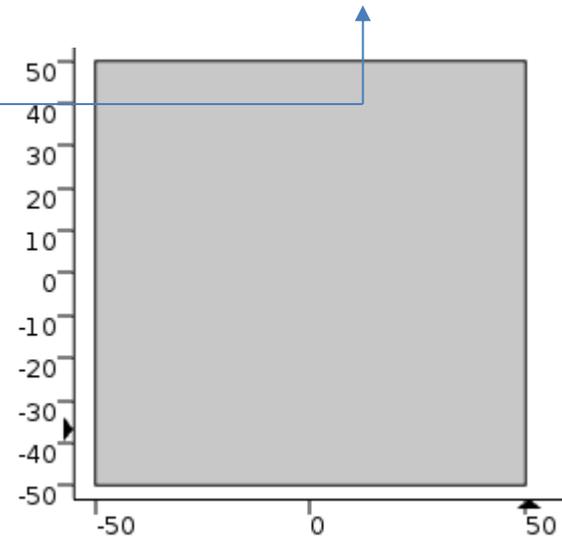
100m × 100m領域の計算

距離の計算など

| 名前 | 式 |
|------------|-----------------------------------|
| logKs_ref | logKs_ref(x,y) |
| areaFactor | 1/(elementTypeFactor*dvol) |
| dist | sqrt((x-dest(x))^2+(y-dest(y))^2) |

- Component 2 (comp2)
 - 定義
 - a= Variables, Domain
 - a= Variables, Global
 - Covariance function (Q)
 - General Extrusion 1 (genext1)
 - Average 1 (mean)
 - Integration 1 (int0)
 - Boundary System 2 (sys2)
 - View 2
 - Geometry 2
 - Square 1 (sq1)
 - Form Union (fin)
 - 材料
 - Optimization (opt)
 - Control Variable Field 1
 - Global Least-Squares Objective 1
 - Value Column 1
 - Domain ODEs and DAEs (dode)
 - Distributed ODE 1
 - Initial Values 1
 - Mesh 2

300m × 300mモデル中の
100m × 100m領域への
データの送り出し genext1



Qの計算

ラベル: Covariance function
関数名: Q

定義

式: $\sigma^2 \cdot \exp(-x/r)$
引数: x

ペナルティ項の計算含む

| | |
|------------|---|
| MSE | $\text{mean}((\log Ks - \log Ks_ref)^2)$ |
| logKs_mean | $\text{int0}(\log Ks * \text{areaFactor}) / \text{int0}(\text{areaFactor})$ |
| L_penalty | $\text{int0}((\log Ks - \log Ks_mean) * u * \text{areaFactor})$ |

滞水層問題との対応関係

順問題とLfitness部分の寄与度の算出

コンポーネント1: 4個の実験条件でのダルシー一流計算、実験との最小二乗寄与の計算

$$L_{fitness} = \frac{\|y - h(s)\|^2}{\Delta H^2}$$

値の列
 式: comp1.dl.H
 変数名:
 単位:
 列寄与重み: 1/deltaH^2

最適化ソルバー
 方法: Levenberg-Marquardt

実験データ
 ファイル名: aquifer_characterization_H1.csv

推定パラメタの定義logKsとペナルティ項からの寄与度算出

コンポーネント2: 推定パラメタの定義、観測値(0)との差の最小二乗寄与の構成

$$L_{penalty} = (s - X\beta)^T u$$

$$Qu = s - X\beta \quad u \text{ が求まる。}$$

$$f = (\log Ks - \log Ks_mean - \int_0^x (u * Q(dist) * areaFactor))$$

Global Least-Squares Objective 1
 Value Column 1

Domain ODEs and DAEs (dode)
 Distributed ODE 1

Qの計算式
 関数名: Q
 定義
 式: sigma^2 * exp(-x/r)

式: sqrt(L_penalty)

滞水層問題との対応

Study 3
 Optimization
 ステップ 1: Stationary

最適化ソルバー
 方法: レーベンバーグ・マーカート法
 Levenberg-Marquardt

コンポーネント1からの寄与

コンポーネント2からの寄与

| ” | フィジックスインターフェース由来の目的関数 | 評価対象 | アクティブ |
|---|---|------------|-------|
| | Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 1 | Stationary | ✓ |
| | Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 2 | Stationary | ✓ |
| | Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 3 | Stationary | ✓ |
| | Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 4 | Stationary | ✓ |
| | Optimization (opt)/Global Least-Squares Objective 1 | Stationary | ✓ |

タイプ:

最小化

多目的:

目的関数の総和

$$L(y, s) = L_{fitness}(y, s) + L_{penalty}(s)$$

4個の観測によるものとペナルティ項の誤差の総和による最小二乗法

最適化のアルゴリズム

カーブフィット問題での説明

<http://people.duke.edu/~hpgavin/ce281/lm.pdf>

$$\begin{aligned}\chi^2(\mathbf{p}) &= \sum_{i=1}^m \left[\frac{y(t_i) - \hat{y}(t_i; \mathbf{p})}{\sigma_{y_i}} \right]^2 \\ &= (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p}))^T \mathbf{W} (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p})) \\ &= \mathbf{y}^T \mathbf{W} \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{W} \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{y}}^T \mathbf{W} \hat{\mathbf{y}}\end{aligned}$$

$$W_{ii} = 1/\sigma_{y_i}^2.$$

アルゴリズム:最急降下法

最急降下法

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \chi^2 &= 2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p}))^T \mathbf{W} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p})) \\ &= -2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p}))^T \mathbf{W} \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \right] \\ &= -2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^T \mathbf{W} \mathbf{J}\end{aligned}$$

$$\mathbf{h}_{\text{gd}} = \alpha \mathbf{J}^T \mathbf{W} (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$$

(パラメタ \mathbf{p} における変動量 \mathbf{h} の補正方向)

アルゴリズム: ガウス・ニュートン法

ガウス・ニュートン法

$$\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p} + \mathbf{h}) \approx \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{p}) + \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{y}}}{\partial \mathbf{p}} \right] \mathbf{h} = \hat{\mathbf{y}} + \mathbf{J}\mathbf{h}$$

$$\chi^2(\mathbf{p} + \mathbf{h}) \approx \mathbf{y}^\top \mathbf{W} \mathbf{y} + \hat{\mathbf{y}}^\top \mathbf{W} \hat{\mathbf{y}} - 2\mathbf{y}^\top \mathbf{W} \hat{\mathbf{y}} - 2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^\top \mathbf{W} \mathbf{J} \mathbf{h} + \mathbf{h}^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{W} \mathbf{J} \mathbf{h}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{h}} \chi^2(\mathbf{p} + \mathbf{h}) \approx -2(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^\top \mathbf{W} \mathbf{J} + 2\mathbf{h}^\top \mathbf{J}^\top \mathbf{W} \mathbf{J}$$

$$[\mathbf{J}^\top \mathbf{W} \mathbf{J}] \mathbf{h}_{\text{gn}} = \mathbf{J}^\top \mathbf{W} (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$$

アルゴリズム

レーベンバーグ・マルカート法

最急降下法とガウス・ニュートン法の間でパラメタを適合させる。

$$\left[\mathbf{J}^T \mathbf{W} \mathbf{J} + \lambda \mathbf{I} \right] \mathbf{h}_{lm} = \mathbf{J}^T \mathbf{W} (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$$

$$\left[\mathbf{J}^T \mathbf{W} \mathbf{J} + \lambda \text{diag}(\mathbf{J}^T \mathbf{W} \mathbf{J}) \right] \mathbf{h}_{lm} = \mathbf{J}^T \mathbf{W} (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$$

λ が大きい場合： 最急降下法

λ が小さい場合： ガウス・ニュートン法

COMSOL Multiphysicsのソルバー

8. 最適化

8. 1 感度 (順方向、随伴)

定常、時間依存について利用

8. 2 最適化 (非線形計画 NLP、最小二乗法 LSQ)

勾配法：定常、時間依存に利用

SNPOPT (標準)

Levenberg-Marquardt (LSQ 用)

移動漸近法、MMA (KTH/ Stockholm)

勾配フリー：

座標探索

Nelder-Mead

信頼領域、内挿法： BOBYQA, COBYLA

非線形拘束取り扱い用の拡大ラグランジュ法

ご清聴ありがとうございました。