

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

パラメタ推定問題へのCOMSOL活用

米大海
第1技術部
計測エンジニアリングシステム株式会社

問題の種類

順問題 (forward problem)

入力 \longrightarrow K 既知 | 境界条件 $u_1=0$ \longrightarrow 出力

逆問題 (backward problem, inverse problem)

入力推定問題

入力 \longrightarrow K 既知 | 境界条件 $u_1=0$ \longrightarrow 出力
未知

パラメタ推定問題/システム同定問題

入力 \longrightarrow K **未知** | 境界条件 $u_1=0$ \longrightarrow 出力

境界条件推定問題

入力 \longrightarrow K 既知 | 境界条件 **未知** \longrightarrow 出力

COMSOL Multiphysicsの応用

順問題

基本モジュール＋専門モジュール＋PDEインターフェース

定数/関数/変数定義、形状作成、材料設定、フィジックス設定(Kと境界条件含む)、メッシュ、スタディ、可視化

IoTのセンサー解析、フィジックス検討、動作環境との関連解析に利用可能

第1回IoTセミナー

パラメタ推定

最適化モジュールの付加

誤差を含む変量へのパラダイムシフト、統計解析

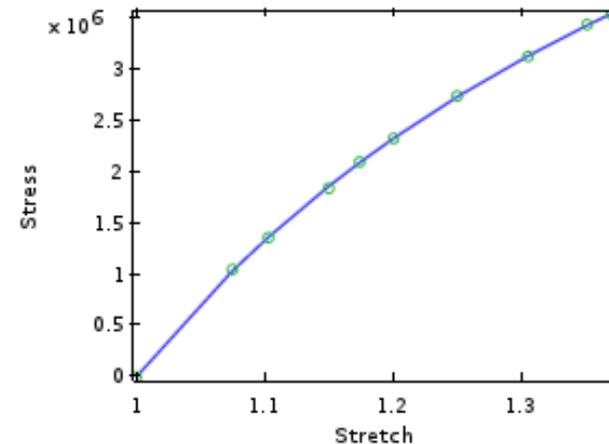
与えられたデータを使って、仮想モデルの構築、感度解析

第2回IoTセミナー

パラメタ推定の例題

COMSOL Multiphysicsに付属のアプリケーションライブラリに掲載

- ▲ Optimization Module
 - ▲ Design Optimization
 - tuning fork optimization
 - ▲ Parameter Estimation
 - curve fit mooney rivlin
 - time dependent optimization
 - ▲ Shape Optimization
 - flywheel profile
 - multistudy bracket optimization
 - ▲ Topology Optimization
 - loaded knee
 - mbb beam optimization
 - reversed flow

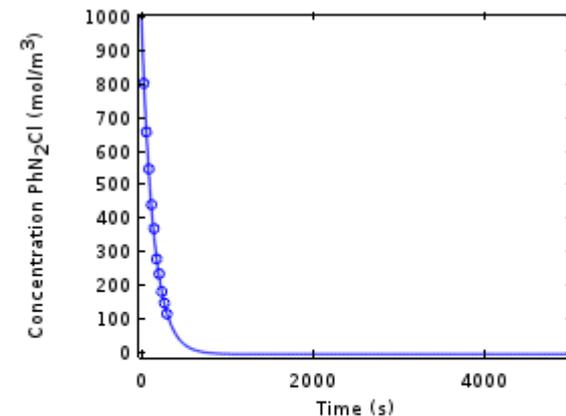


このモデルは最適化モジュールを使用して材料モデルカーブを実験データにフィットさせる方法を示しています。

パラメタ推定の例題

化学種濃度の時間履歴データから活性化エネルギーを推定

- ▲  Chemical Reaction Engineering Module
 - ▶  Applications
 - ▶  Electrokinetic Effects
 - ▶  Ideal Tank Reactors
 - ▶  Mixing and Separation
 - ▶  Reactors with Mass and Heat Transfer
 - ▶  Reactors with Mass Transfer
 - ▶  Reactors with Porous Catalysts
 - ▲  Tutorials
 - activation energy
 - cstr startup
 - monolith 3d
 - monolith kinetics
 - multicomponent tubular reactor
 - nonideal cstr
 - nonisothermal plug flow



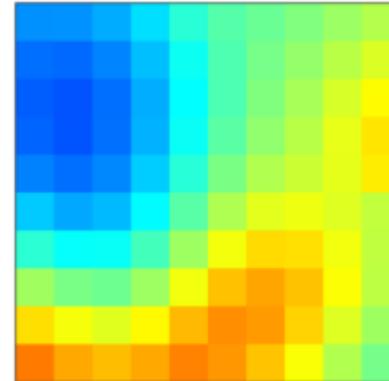
Parameter Estimation is important in experimental calibration of theoretical models. This example uses the Parameter Estimation and Experiment features in the Reaction Engineering interface. It utilizes multiple experimental data input files to find the Arrhenius parameters of a first order reaction. The reaction involves benzene diazonium chloride decomposing to benzene chloride and nitrogen.

This model requires the Optimization Module.

パラメタ推定の例題

滞水層の透水係数を推定

- Subsurface Flow Module
 - Applications
 - Flow and Solid Deformation
 - Fluid Flow
 - aquifer characterization
 - discrete fracture
 - forchheimer flow
 - pore scale flow
 - twophase flow column
 - variably saturated flow
 - Heat Transfer
 - Solute Transport



This example uses the Optimization interface to solve the inverse problem of determining the spatially variable hydraulic conductivity on a discretized quadratic grid from a number of aquifer pump tests. Because the number of observations is smaller than the number of unknown parameters, a geostatistical penalty term is used to discriminate between solutions with comparable fitness values. The measurement data is generated from a given forward model implemented using the Darcy's Law interface, making it possible to analyze the efficiency and accuracy of the inverse method as well as the optimization solver's performance.

This model requires the Optimization Module.

名前	aquifer_characterization
使用モジュール	COMSOL Multiphysics Subsurface Flow Module Optimization Module
フィジックインターフェース	ダルシー則 ドメイン ODE/DAE 最適化
作成バージョン	COMSOL 5.2a (Build: 131)
計算時間	4 分, 26 秒

パラメタ推定の必要性

モデル概要:

2D正方形領域、
地下水流問題(ダルシー則)

問題点:

ある地域の地下水流問題を解きたいが、地質不均一なため、hydraulic conductivityの空間分布が分からない ⇒ 仮想モデルが構築できない。

水頭
条件
⇒

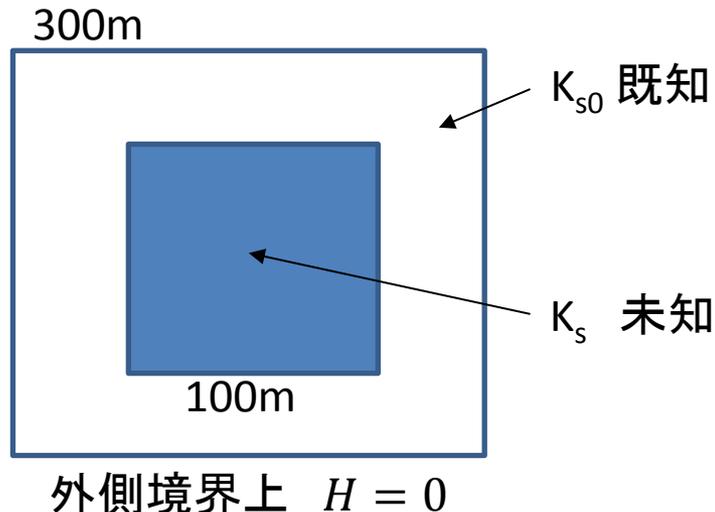
- 方程式確定:
ダルシー則
- hydraulic
conductivity不明

流出量
⇒
?

滞水層の問題設定

辺長 $b=100\text{m}$ の正方形領域内で空間的な透水性係数 $K_s(\text{m/s})$ を知りたい。
ただし、周囲(1辺 300m の正方形)は K_{s0} として既知である。

↓
推定したいパラメタ s



支配方程式

$$\nabla \cdot (-K_s \nabla H) = Q_s$$

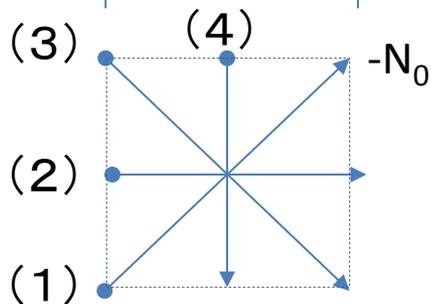
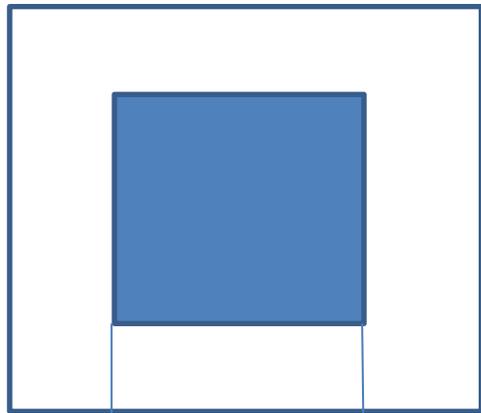
$$H \equiv \frac{p}{\rho g}$$

Q_s : 吸い込み、湧き出し

参考文献1 p.1485 (10)式

変数名は H が ϕ' , Q_s が ρ で表現されている。

観測データは何を使うか



$+N_0$

流束条件として与える。

独立な4個の観測として、押し込み(●)と吸出し(→)のペアを4組測定する。

解析手順

[1] パラメタ K_s の初期値を設定する。

[2] 観測条件(1)に対応する条件を与えて方程式の有限要素解を求める。

$$\nabla \cdot (-K_s \nabla H) = Q_s$$

[3] 観測条件(1)に対応する H の測定値との誤差を求める。

[4] 手順[2][3]を観測条件(2)~(4)についても実施。

[5] パラメタ推定用の計算を行い、[1]へ戻る。
収束すれば計算終了。

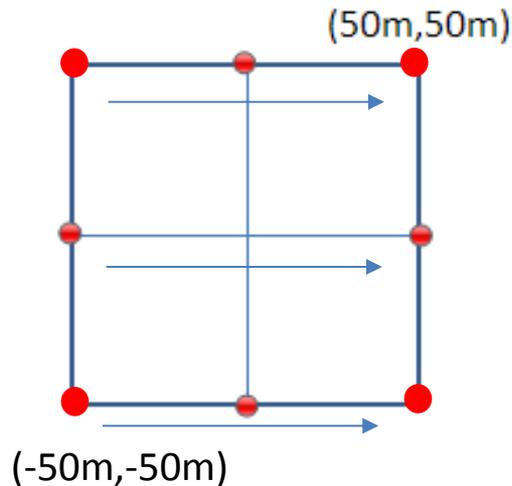
観測データの内容

観測データの準備

エクセルデータ

- (1)  aquifer_characterization_H1.csv
- (2)  aquifer_characterization_H2.csv
- (3)  aquifer_characterization_H3.csv
- (4)  aquifer_characterization_H4.csv

データの並びは左から右、下から上へ



NaNの箇所は押し込み/引き抜き位置なのでデータ不要の意味

観測(1)

	A	B	C
1	% x	y	data
2	-50	-50	NaN
3	0	-50	1.197214
4	50	-50	0.333231
5	-50	0	1.425438
6	50	0	-0.71834
7	-50	50	-0.02828
8	0	50	-1.3301
9	50	50	NaN

観測(2)

	A	B	C
1	%x	y	data
2	-50	-50	0.567955
3	0	-50	-0.64055
4	50	-50	-1.17574
5	-50	0	NaN
6	50	0	NaN
7	-50	50	1.425121
8	0	50	-0.68882
9	50	50	-1.57582

観測(3)

	A	B	C
1	% x	y	data
2	-50	-50	-0.80064
3	0	-50	-1.56457
4	50	-50	NaN
5	-50	0	1.186659
6	50	0	-1.4142
7	-50	50	NaN
8	0	50	0.958474
9	50	50	-0.43913

観測(4)

	A	B	C
1	% x	y	data
2	-50	-50	1.636021
3	0	-50	NaN
4	50	-50	1.250913
5	-50	0	0.500773
6	50	0	0.452506
7	-50	50	-1.27214
8	0	50	NaN
9	50	50	-0.89129

Ksデータ

テキストデータ

aquifer_characterization_logKs_ref.txt

エクセルによる内容確認

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1	%(x,y)-grid									
2	-45	-35	-25	-15	-5	5	15	25	35	45
3	-45	-35	-25	-15	-5	5	15	25	35	45
4	%	data								
5	-4.12063	-4.21547	-3.9612	-4.34689	-3.93279	-4.17351	-4.28662	-4.45733	-4.71566	-5.18118
6	-3.72102	-4.17941	-4.15149	-4.83285	-4.15603	-3.98246	-4.13373	-4.5448	-4.075	-4.7563
7	-4.43994	-5.01321	-5.4584	-4.9738	-4.8464	-4.12833	-3.89153	-4.15535	-4.65337	-4.42107
8	-5.95772	-5.30674	-5.96558	-5.30926	-4.32459	-4.43011	-4.70863	-4.2494	-4.45782	-4.47519
9	-5.71585	-5.90923	-6.06284	-5.68321	-4.93879	-5.3493	-4.70917	-4.57846	-4.65278	-4.66443
10	-6.01174	-5.95439	-5.63519	-5.66967	-5.6532	-5.06903	-4.8424	-4.95011	-5.04129	-4.23777
11	-5.59254	-6.4073	-5.77622	-5.35086	-4.94419	-5.12247	-4.39946	-4.23703	-4.77037	-4.28751
12	-6.39919	-6.53726	-5.67818	-5.82182	-5.57421	-5.24566	-4.91773	-4.36568	-4.46779	-3.94807
13	-6.31868	-6.25807	-5.88663	-5.65053	-5.28792	-5.48007	-5.58251	-5.47982	-4.98507	-4.48698
14	-6.26173	-6.5788	-6.12435	-5.33521	-5.14393	-5.02492	-5.07505	-4.62549	-5.07681	-5.07423

テキストデータとしては、2列の縦長のデータになっている。ここでは表示を見やすくするためエクセル形式で表示している。

設定手順

モデルウィザード

- 1) 空間2次元、流体流れ: 多孔質および地下水流: ダルシー則
- 2) 追加
- 3) スタディ、定常、完了
- 4) ジオメトリ作成 (300m正方形、100m正方形、点の作成)

グローバル定義: パラメタ設定

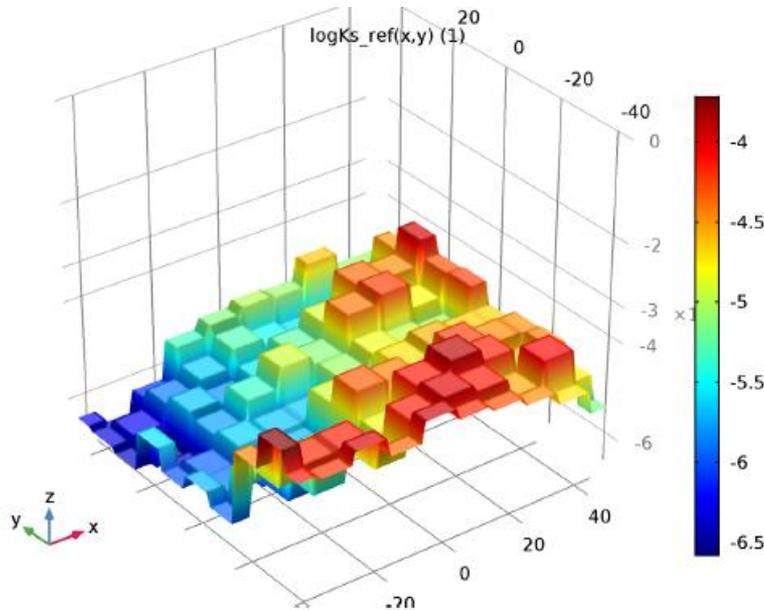
- 1) 下記を入力

Name	Expression	Description
NO	0.1[kg/(m*s)]	Pump source strength
deltaH	1[cm]	Hydraulic head measurement error
logKs0	-5	Hydraulic conductivity, initial log10 value
th	1	Measurement-series index
sigma	1	Sill parameter
r	50[m]	Range parameter
elementTypeFactor	1	1 for quads, 0.5 for triangles

順問題の作成手順

関数設定

- 1) コンポーネント1: 定義: 右クリック、関数: 補間、関数名 logKs Reference
- 2) aquifer_characterization_logKs_ref.txt
- 3) データフォーマット: グリッドを選択し、インポート
- 4) 関数名 logKs_ref ファイル位置 1



先ほどエクセル表で表示したファイルの内容をインポートしている。

順問題の作成手順

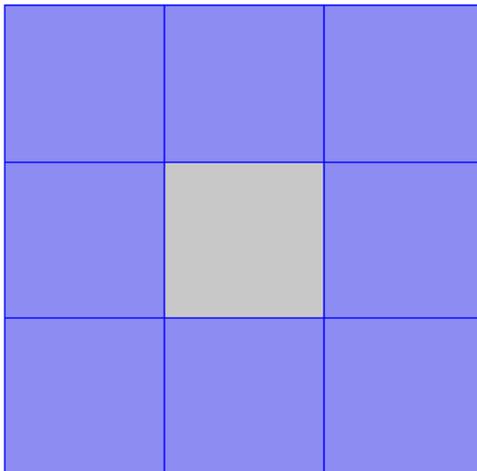
定義:変数

1) 変数名logKsとして以下を設定

Name	Expression	Description
logKs	logKs_ref(x,y)	Hydraulic conductivity, log 10 value

無限要素ドメインの指定

1) 領域1-4、6-9を無限要素ドメインに指定する。



順問題の作成手順

材料設定

- 1) 材料に $10^{\log Ks0}$ を設定
- 2) ドメイン5(中央部分100m正方形)には $10^{\log Ks}$ を設定

外側境界条件(H=0)

- 1) 外側(無限要素領域外側境界)で $H=0$ とする。

順問題の作成手順

thによって後程、制御される。

押し込み側の設定

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点6を選択
- 3) if(th==1, N0, 0)を設定する。

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点7を選択
- 3) if(th==2, N0, 0)を設定する。

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点8を選択
- 3) if(th==3, N0, 0)を設定する。

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点10を選択
- 3) if(th==4, N0, 0)を設定する。

引き抜き側の設定

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点6を選択
- 3) if(th==11, -N0, 0)を設定する。

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点13を選択
- 3) if(th==3, -N0, 0)を設定する。

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点14を選択
- 3) if(th==2, -N0, 0)を設定する。

質量流束

- 1) ポイントの質量流束設定を選択
- 2) 点15を選択
- 3) if(th==1, -N0, 0)を設定する。

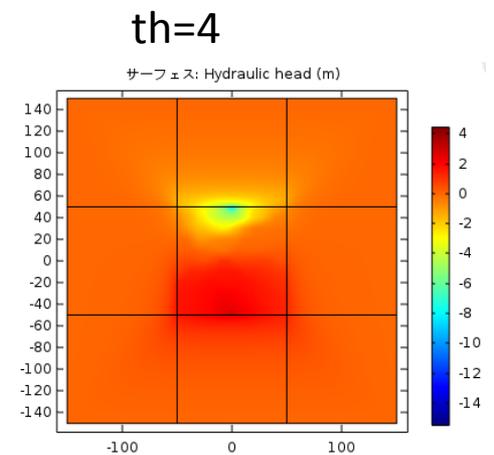
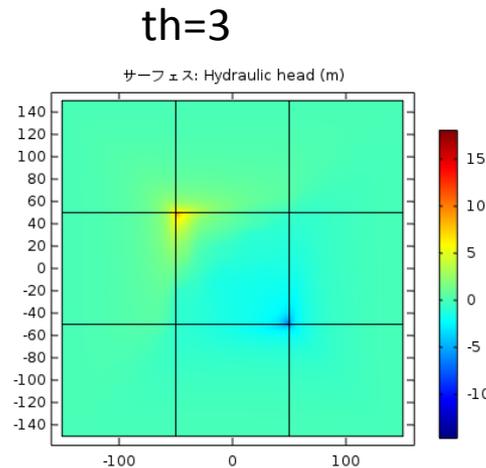
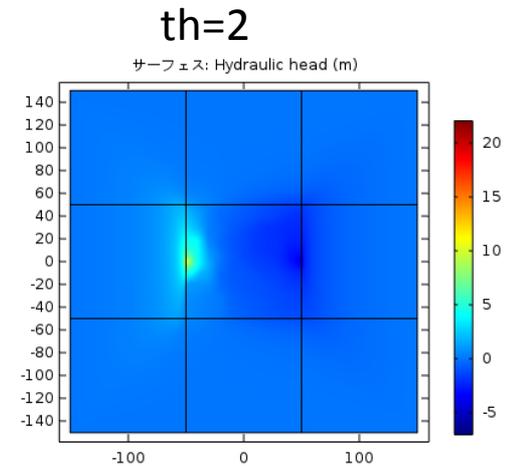
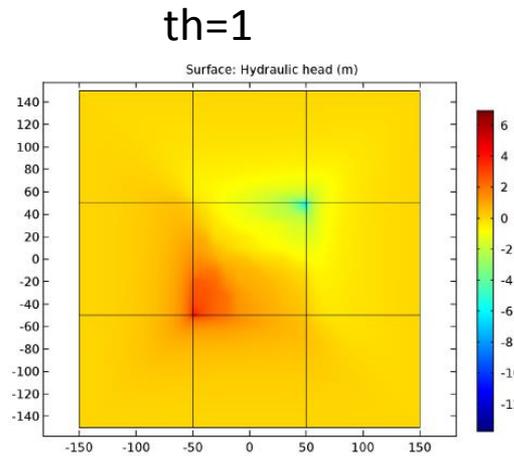
順問題の作成手順

メッシュの作成

スタディで計算実行

結果の確認

手動でthの数値を変更し
計算を繰り返す。



補助計算の作成手順

コンポーネントの追加

- 1) モデルウィザードに2Dのコンポーネントを追加
- 2) コンポーネント2にジオメトリ2を指定
- 3) フィジックス追加で数学:最適化と感度:最適化を選択、コンポーネントへ追加
- 4) 数学:ODEとDAE:ドメインODEとDAEを選択、コンポーネントへ追加

スタディの追加

- 1) スタディを追加、定常選択、追加

ジオメトリ作成

- 1) 100m正方形作成

補助計算の手順

一般押し出し

- 1) コンポーネント2: 定義: 右クリック、コンポーネントカップリング:
一般押し出し選択

平均演算の定義 `mean()`

- 1) 平均を演算する演算子の設定

積分演算の定義 `int0()`

- 1) 積分演算子の設定
- 2) 次数を0にする。

要素座標系から全体座標系への変換

	dvol
矩形メッシュ	1
三角メッシュ	1/2

変数の設定

Name	Expression	Description
logKs_ref	<code>logKs_ref(x,y)</code>	Hydraulic conductivity, reference model
areaFactor	<code>1/(elementTypeFactor*dvol)</code>	Summation compensation factor
dist	<code>sqrt((x-dest(x))^2+(y-dest(y))^2)</code>	Distance between points inside summation

補助計算の手順

変数の定義

Name	Expression	Description
MSE	$\text{mean}((\log K_s - \log K_{s_ref})^2)$	Area-weighted mean squared error
logKs_mean	$\text{int0}(\log K_s * \text{areaFactor}) / \text{int0}(\text{areaFactor})$	Discrete control variable mean
L_penalty	$\text{int0}((\log K_s - \log K_{s_mean}) * u * \text{areaFactor})$	Penalty function

補助計算の手順

解析関数の定義

- 1) コンポーネント2: 定義: 関数、解析
- 2) 名前をCovariance functionにする。
- 3) 関数名 Q
- 4) 式に、 $\sigma^2 \exp(-x/r)$
- 5) 引数の単位をm、関数の単位を1にする。

補助計算の手順

最適化(opt)の内容設定

- 1) ドメインの制御変数フィールドを選択
- 2) ドメインに全てのドメインを選択
- 3) 制御変数名をlogKsにする
- 4) 初期値に対して、logKs_refを設定する
- 5) 離散化セクションで、不連続ラグランジュを選択
- 6) 要素次数は一定とする。

グローバル最小二乗目的関数

- 1) グローバル最小二乗目的関数を選択
- 2) 実験データセクションに行く
- 3) ファイル参照
- 4) aquifer_characterization_zero.csvを読み込む

補助計算の手順

ペナルティ項の組み込み

これはLevenberg-Marquardt ソルバーを使う場合に必要である。
観測データがないものと比較するためのもの。

- 1) 数値列を選択
- 2) 数値列セクションへ行く
- 3) 式に、`sqrt(L_penalty)` を入力

ドメインODEとDAE

- 1) コンポーネント2のドメインODEとDAEをクリック
- 2) 単位で、ソース項の次元を次元無にする
- 3) 離散化セクションで、要素次数を一定にする

分布ODE

- 1) ソース項に次式を設定する。

```
(logKs - logKs_mean - int0(u*Q(dist)*areaFactor))
```

補助計算の手順

メッシュ

- 1) 10等分割のマッピングメッシュを作成

順問題への追加項目の設定

定義

- 1) コンポーネント1: 変数を複製
- 2) 変数に以下を設定

Name	Expression	Description
logKs	comp2.genext1(comp2.logKs)	Hydraulic conductivity, log 10 value

補助計算の手順

最適化の追加

測定データはコンポーネント1(順問題)の解と比較されるため、
最小二乗目的寄与を定義する。

フィジックスの追加

1) 数学:最適化と感度:最適化を追加

最適化2(opt2)

1) 最小二乗目的関数を選択

2) ドメイン5を選択

3) 実験データセクションに行く

4) 観測(1)の実験ファイルを読み込む

aquifer_characterization_H1.csv

5) テーブルに以下を設定

Name	Expression
th	1

6) 座標系列を設定

7) comp1.dl.Hを設定(この観測データと比較の意味)

8) 重み係数に、 $1/\Delta H^2$ を設定

ここを観測データ
数分繰り返す。
ここでは4つの観
測データについ
て繰り返す。

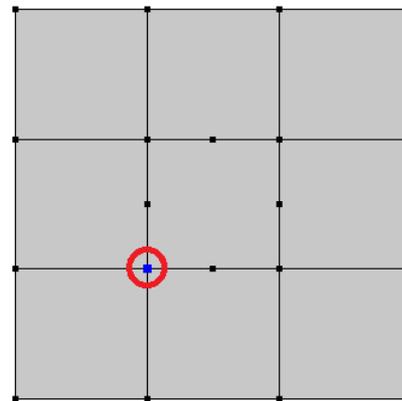
スタディの手順

Study 1では、定常、順問題の計算を行う
300 × 300mの全ドメインでDarcy則を解く。
この時logKsの定義は下記の式を使う。

Name	Expression	Unit	Description
logKs	logKs_ref(x,y)		Hydraulic conductivity, log 10 value

変数thで、押し出すと吸い込む4ペアの実験条件を分けて実装。

- Component 1 (comp1)
 - Definitions
 - Geometry 1
 - Materials
 - 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
 - Mass Flux 2
 - Mass Flux 3
 - Mass Flux 4
 - Mass Flux 5
 - Mass Flux 6
 - Mass Flux 7
 - Mass Flux 8



Inward mass flux:

N_0 if(th==1,N0,0)

kg/(m·s)

スタディの手順

Study 2では、最適化と定常になる

定常計算では、300×300mの全ドメインでDarcy則を解く時に、logKsはペナルティを考慮して決める。具体的には、中心の100×100m上のドメインODE計算で決める。

Name	Expression	Unit	Description
logKs	comp2.genext1(comp2.logKs)		Hydraulic conductivity, log 10 value

- Component 2 (comp2)
 - Definitions
 - Geometry 2
 - Materials
 - Optimization (opt)
 - Control Variable Field 1
 - Global Least-Squares Objective 1
 - Equation View
 - Domain ODEs and DAEs (dode)
 - Distributed ODE 1 →
 - Initial Values 1

Equation

Show equation assuming:
Study 1, Stationary

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} = f$$

Source Term

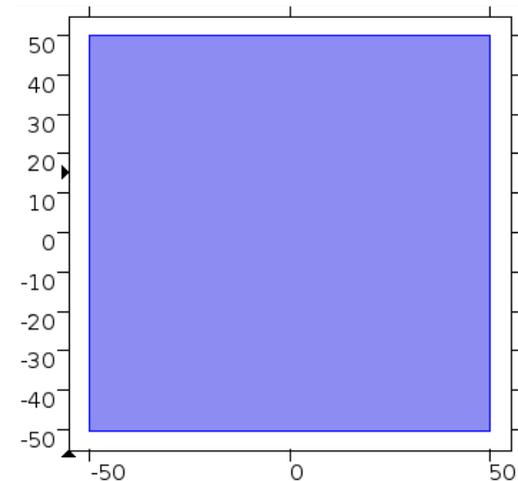
f (logKs-logKs_mean-int0(u*Q(dist)*areaFactor))

Damping or Mass Coefficient

d_a 1

Mass Coefficient

e_a 0



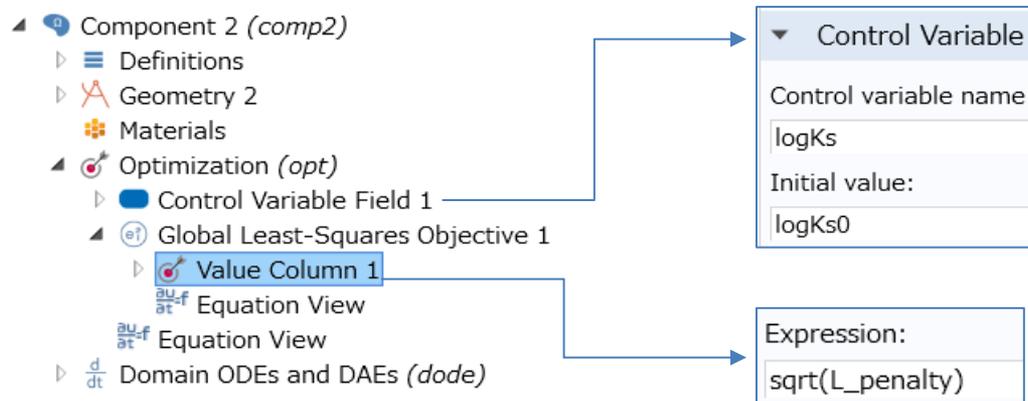
スタディの手順

Study 2での最適化計算

以下「Least-Squares Objective 1」と「Global Least-Squares Objective 1」の和の最小を計算する。

Objective functions from physics interface	Evaluate for	Active
Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 1	Stationary	<input checked="" type="checkbox"/>
Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 2	Stationary	<input type="checkbox"/>
Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 3	Stationary	<input type="checkbox"/>
Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 4	Stationary	<input type="checkbox"/>
Optimization (opt)/Global Least-Squares Objective 1	Stationary	<input checked="" type="checkbox"/>

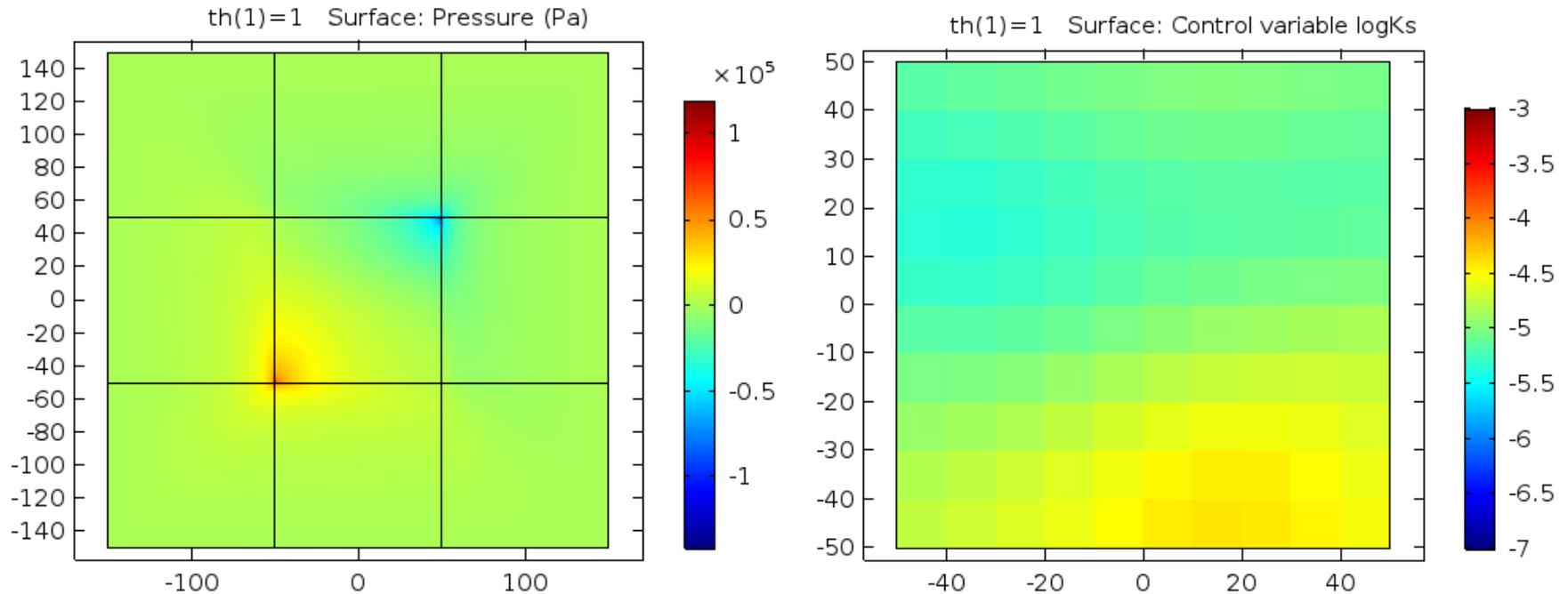
Least-Squares Objective 1は $th=1$ 時の最小二乗への寄与になる。
Global Least-Squares Objective 1はペナルティから最小二乗への寄与になる。全体の最適化をする制御変数を $\log K_s$ とした。



スタディの手順

Study 2の計算結果

th=1の1ケース、即ち観測データが6個場合の圧力分布及びlogKsの分布



スタディの手順

Study 3では、最適化と定常になる

定常計算については、Study 2と同じ。

最適化計算の目的関数は以下のようにになる。th=1~4の4ケースを考慮。

▶▶	Objective functions from physics interface	Evaluate for	Active
	Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 1	Stationary	<input checked="" type="checkbox"/>
	Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 2	Stationary	<input checked="" type="checkbox"/>
	Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 3	Stationary	<input checked="" type="checkbox"/>
	Optimization 2 (opt2)/Least-Squares Objective 4	Stationary	<input checked="" type="checkbox"/>
	Optimization (opt)/Global Least-Squares Objective 1	Stationary	<input checked="" type="checkbox"/>

スタディの手順

Study 3の計算結果

th=1~4の4ケース計24個水頭実測データを用いた時に算出されたlogKs分布

