6章　逆問題への適用

６．１　関数近似問題

１．緒　言

逆問題の解法としては既に数多く提案されているが[(1)(2)]，多くは多大な解析を要するかまたはデータベース検索を実施する手法であり，精度を犠牲にしたリアルタイムの逆解析に適切な手法としてはニューラルネットワークによる逆問題解析[(3)(4)]が知られている程度である．このニューラルネットを使用した手法は，実験やFEM解析結果を教師信号として応答（結果）を学習させる方法であるが，基本的には多くの回帰データに非線形関数を回帰させているにすぎない．応答曲面は線形化可能な非線形関数を用いる点でニューラルネットをより汎化能力が劣る場合があるが，簡単に学習できる（逆マトリックス計算だけ）こと，実験計画が可能であることから，それにも勝る利点がある．特に，領域を分割した逆問題の推定に応答曲面を使用すれば，ニューラルネットと同じ汎化能力を有していながら作成コストが大幅に削減可能であり，なおかつ信頼性評価が統計的に可能であるという利点を有している．ここでは，関数の逆関数を求める問題を例にして，応答曲面法の逆問題への適用例を示す．

２．応答曲面法の概説

２．１水準への離散化

応答曲面法とは品質工学分野におけるプロセス最適化に適用されている手法であり，最小２乗法，実験計画法，最適化手法を含む．応答曲面とは制御因子x_iと応答yとの関係を近似する曲面であり，次式であらわわされる．

$$y = f(x_1 \cdots x_i) + \varepsilon \qquad (1)$$

ここで，εは誤差である．応答曲面の関数形としては後述する実験計画の観点から多項式近似する場合が多い．ただし，さまざまな変数変換を行うことで複雑な関数に近似可能となる．応答曲面法では制御変数を水準とよばれるレベルに離散化する．これは本来は実験計画を容易にするためであるが，逆問題では推定誤差を丸める役割をはたす．必ずしも水準化する必要はないが，誤差の多い実験データに基づく場合や，正確な予測が不要な場合に水準化は役立つ．

２．２最小2乗法

簡単のため，２次多項式近似する場合を考える．この時，近似式は次式となる．

$$y = \mathrm{b}_0 + \sum_{i=1}^{n} \mathrm{b}_i x_i + \sum_{i=1,\ j\ge i}^{n} \mathrm{b}_{ij} x_i x_j \qquad (2)$$

$x_{ij} = x_i x_j$とおきかえることで式(2)は線形重回帰式となる．k個（k＞n+1+n(n-1)/2）の実験点がある場合，p個（p=n+1）の変数の重回帰モデルは次式となる．

$$\mathrm{y} = \mathrm{X}\beta + \varepsilon \qquad (3)$$

$$\mathrm{y} = \begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_k \end{Bmatrix} \qquad \mathrm{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{k1} & x_{k2} & \cdots & x_{kp} \end{bmatrix}$$

$$\beta = \begin{Bmatrix} \mathrm{b}_1 \\ \mathrm{b}_2 \\ \vdots \\ \mathrm{b}_p \end{Bmatrix} \qquad \varepsilon = \begin{Bmatrix} \mathrm{e}_1 \\ \mathrm{e}_2 \\ \vdots \\ \mathrm{e}_k \end{Bmatrix}$$

最小２乗法からβの期待値bは次式となる．

$$\mathbf{b} = \left(\mathbf{X}^T \mathbf{X}\right)^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \qquad (4)$$

２．３実験計画法

式(4)のbの分散を小さくするには，yの分散を小さくすることとは別に$(X^T X)^{-1} X^T$を小さくするような実験点の座標を選択することで相対的にbの分散を小さくすることが可能となる．このように応答yとは無関係に近似モデルXだけに関連して近似式のbの分散を最小にする実験点の最適化を行うことができる．これが実験計画法である．実験計画法には全因子計画，直交計画，中央複合計画などの経験的な手法があるが，逆問題の場合には計算機利用が不可欠であり，しかも応答yから変数xを近似する際に応答空間が不規則形状である場合が多い．このような場合には計算機支援の実験計画としてD最適基準が用いられる．D最適基準はモーメントマトリックスMの行列式を最大化する[(10)]．

$$\mathbf{M} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} / \mathrm{k} \qquad （5）$$

判定基準には次式のDeffを用いる．

$$D_{eff} = \frac{\left(Det\left[\mathbf{X}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}\right]\right)^{1/p}}{k} \qquad (6)$$

具体的には，いくつかの実験候補点の集合からDeffを最大化する実験点の組み合わせを求める組合せ最適化問題を解いて最適な実験計画を行う．この際，各候補点では応答ｙの解析は必要なく，近似モデルと座標だけが重要となる．

３．逆問題への適用

３．１適用手順

順問題空間（y=f(x)の近似）での実験計画は逆問題空間（x=g(y)の近似）に最適である保証なない．逆問題（x=g(y)の近似）の応答曲面作成には応答ｙを座標にして実験計画を行う必要があり，これには応答ｙの全空間が既知であるかまたは膨大な応答ｙの結果が必要であり一般には困難である．そこで，まず順問題を実験計画に基づいて応答曲面y=f(x)を作成する．その応答曲面を用いて全応答空間ｙが近似的に得られる．この近似応答の集合から実験計画で逆問題の応答曲面に適した応答ｙの集合を求め，それを与える座標ｘを求める．求めたｘから順問題を解くか実験により逆問題に適した真の実験点の応答ｙを求める．この逆問題の実験計画点ｙの集合からx=g(y)の逆問題の応答曲面を求める．

３．２適用例

簡単な例として，　未知関数（ここでは $y = \tanh(x/0.2)$ ，ただし $0 \le x \le 1$ ）の逆関数を３次多項式で近似する問題を取り扱う．　3次多項式の未知係数は４個であるので経験的にその倍として実験点は８個とする．均等にｘを20分割した候補点からD最適基準で８個選択し，３次多項式で順問題の近似関数を作成する．近似した順問題の応答曲面から均等に２０分割した点を作成し，その近似応答を計算してｙの項候補点を２０個作成する．ｙの２０個の候補から逆問題の近似関数に適切な点をD最適基準で８個を選択する．選択した８個の点のｘ座標から真の応答ｙを計算し，そのｙからｘの関数を３次多項式で近似した．結果を図１に示す．比較のためｘの均等分割の８点のｙ座標から逆問題の応答曲面を近似した結果を図２に示す．図中実線は $x=\tanh^{-1}(y)$ である．図１，２から実験計画に基づく応答曲面法によって求めた結果がよい近似を与えていることがわかる．

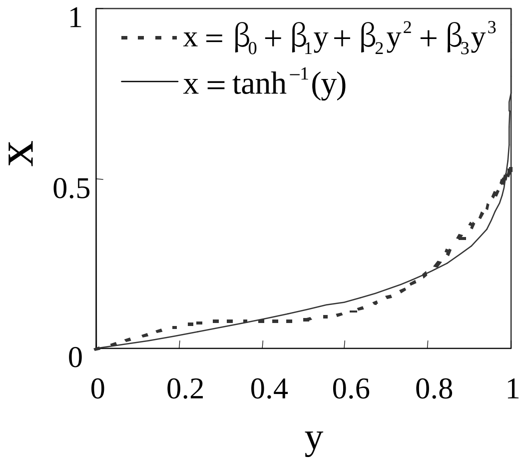

Fig.1 Application of response surface for inverse problem by Design of Experiments

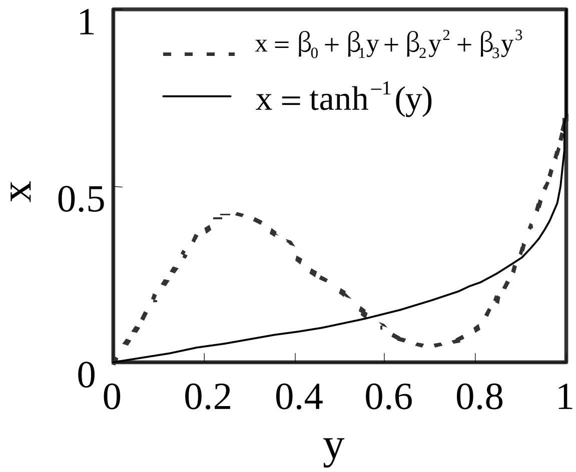

Fig.2 Application of response surface for inverse problem by equally spaced experiments

この結果からも明らかなように，順問題で数多くの実験点を取っても，逆問題には不適切な点（平坦な領域）に多くのデータが追加されるだけであり，均等にデータを収集する方法では大量のデータなしでは有効な近似関数を作成ことができない場合がある．これに対して,均等に取ったデータからまず順問題（関数y=f(x)）を近似する関数を作成し，その作成した近似関数から逆問題空間を推定して，多くのデータを得て，逆問題にふさわしい実験点を逆問題応答曲面に使用することで，少ない実験点で近似精度が向上する．ここで通常は関数が未知なので順問題を近似しているが，関数形が既知ならば，当然順問題の近似関数は必要ない．手続きをまとめて図３に示す．

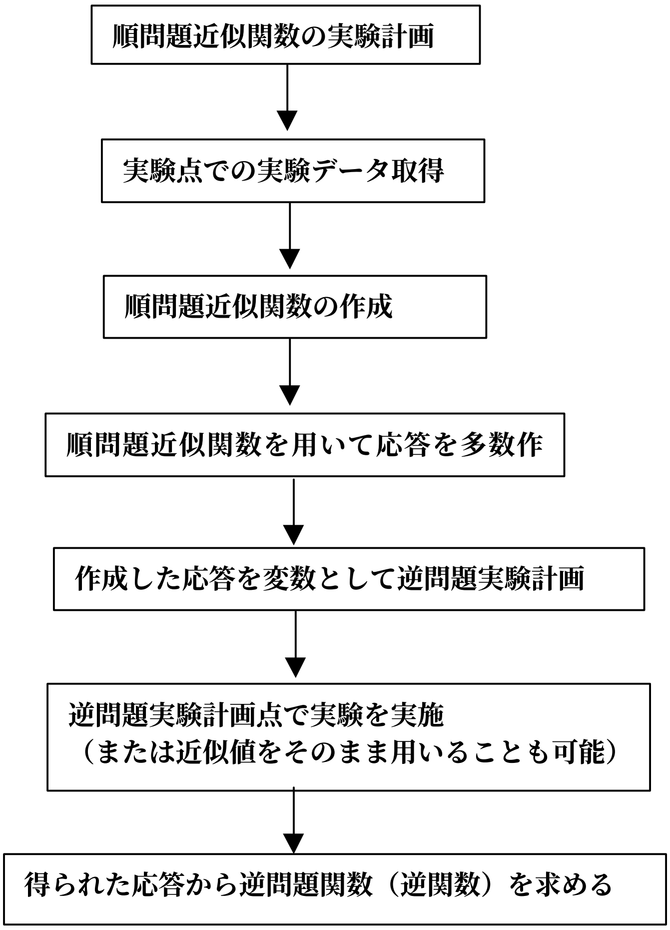

Fig.3　Flow of application of response surfaces for inverse problems

このように逆問題に適したデータ点を応答の解析なしで求めることが可能であるのは，関数形があらかじめ既知であるからであり，当然関数形が変化すれば適したデータの集合も異なるものとなる．また，実験が貴重であれば，順問題実験点を必ず含むように逆問題実験計画を行うのもよい．この場合，逆問題実験計画には順問題実験点よりも多くの点を選択するようにすることはいうまでもない．

この節の内容は日本機械学会計算力学講演会(1998)にて発表されたものです[5]．

参考文献
(1)久保司郎：逆問題　計算力学とCAEシリーズ　10，培風館(1992)
(2)H.D.Bui著，青木繁他訳：材料力学における逆問題，裳華房（1994）
(3)矢川元基：ニューラルネットワーク　計算力学とCAEシリーズ　12，培風館(1992)
(4)矢川元基，吉村忍　共編：計算力学V，材料力学のためのニューロ応用，養賢堂（1997）
(5)轟章，鈴木洋之，島村佳伸：電気ポテンシャル方による層間はく離検出への応答曲面の適用，日本機械学会第11回計算力学講演回講演論文集，98-2，(1998)475-476