

連續型Karhunen-Loève展開と Hamiltonian Monte Carlo法を用いた 形状と物性の同時逆解析

Simultaneous inversion of geometry and spatial field by using
continuous Karhunen-Loève expansion and Hamiltonian Monte Carlo

柴田達哉¹⁾, Koch Michael Conrad¹⁾, 藤澤和謙¹⁾

Tatsuya Shibata, Michael Conrad Koch and Kazunori Fujisawa

1) 京都大学 農学研究科 (〒606-8502 京都市左京区北白川追分町)

The method proposed by Koch *et al.* (2021) for simultaneous estimation of geometry and physical property using HMC utilizes a discrete KL expansion to reduce the number of physical property parameters, but the eigenvalue problem solved to construct discrete KL expansion depends on discrete points. Therefore, the eigenvalue problem must be solved again every time the discrete points move due to changes in the domain in the process of geometry estimation. On the other hand, (continuous) KL expansion has domain independence property, which means that the shape of the physical domain in a random field does not affect the realizations of the field estimated using (continuous) KL expansion. This property allows for only one eigenvalue problem to be handled.

Key Words : Inverse analysis, Karhunen-Loève expansion, Hamiltonian Monte Carlo

1. はじめに

一般に物理探査は物性値の推定により行われるが、対象領域内部に空洞や亀裂など特異な領域が存在する場合、それらの存在を無視したモデルを用いて逆解析を行うことになり、特異領域を鮮明に可視化することが難しい。この問題は、Koch *et al.* [1]により提案された形状と物性の同時推定法（同時推定法と呼ぶ）により解決可能である。同時推定法は、特異領域の境界位置に関するパラメータ（形状パラメータと呼ぶ）を明示的に定め、物性パラメータと一緒に推定を行う手法である。また、同時推定法はベイズ推論に基づく逆解析法であり、Hamiltonian Monte Carlo (HMC) 法[2]による効率の良いサンプリングと、離散型 Karhunen-Loève (KL) 展開[3,4]を利用した物性パラメータ数の削減により、次元の呪いを克服することで、確率的な逆解析を実現している。一方で、同手法では、離散型KL展開に起因し、HMCでの勾配計算で大きな計算コストが生じることが問題であった。本研究では、連続型KL展開とその領域独立性[5]を利用し、この高負荷計算を回避する新たな同時推定法を提案する。また、物性のみを推定する手法（物性推定と呼ぶ）との比較を行い、同時推定法の優位性について検討する。

2. 対象とする逆問題

土層 \mathcal{D} と特異領域 \mathcal{D}_s の 2 領域からなる領域 \mathcal{D}_t を考える ($\mathcal{D} = \mathcal{D}_t \setminus \mathcal{D}_s$)。土層 \mathcal{D} では連続式とダルシー則

$$\nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{z}) = Q(\mathbf{z}) \quad (1)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{z}) = -k(\mathbf{z})\nabla h(\mathbf{z}) \quad (2)$$

により支配された定常浸透流が発生しているとする。ここで、 $\mathbf{z} \in \mathcal{D}$, h は全水頭、 \mathbf{q} は流束、 Q は湧出量、 k は透水係数分布である。また、境界条件は Dirichlet 境界か Neumann 境界のいずれかであるとする。

以上の定常浸透流に関して、水頭・流量の観測から領域 \mathcal{D}_t を可視化する逆問題を設定する。通常の逆解析では、特異領域 \mathcal{D}_s の存在は仮定せず、領域 \mathcal{D}_t 内が全て土層であるとして、透水係数分布 $k(\mathbf{z})$ の推定を行うが、同時推定では特異領域 \mathcal{D}_s の存在を仮定し、特異領域と土層の境界 Γ_s と土層 \mathcal{D} の透水係数分布 $k(\mathbf{z})$ を推定する。なお、解析過程で土層 \mathcal{D} は有限要素に分割されるが、それと同時に透水係数 $k(\mathbf{z})$ は空間離散化され、 $\mathbf{k} = [k(\mathbf{z}_1^c), \dots, k(\mathbf{z}_N^c)]^T$ のようにベクトルとして表せる。ここで $\{\mathbf{z}_i^c\}_{i=1}^N$ は各有限要素の中心座標である。物性推定では、透水係数ベクトル \mathbf{k} が推定対象となる。 \mathbf{k} は後述の KL 展開によって、より低次元のベクトル ${}^1\boldsymbol{\theta}$ で表される。また、形状推定では Γ_s を ${}^2\boldsymbol{\theta}$ でパラメータ化するが、このとき \mathcal{D} 、ひいては $\{\mathbf{z}_i^c\}_{i=1}^N$ が ${}^2\boldsymbol{\theta}$ に依存することに注意する。最終的に、推定パラメータは $\boldsymbol{\theta} = [{}^1\boldsymbol{\theta}, {}^2\boldsymbol{\theta}]^T$ とまとめられる。

3. ベイズ推論

(1) 観測モデル

観測値 \mathbf{y} は以下の観測モデルに従うとする。

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}(\boldsymbol{\theta}) + \mathbf{r} \quad (3)$$

ここで、 $\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})$ は状態ベクトル（パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を与えて順解析を行ったときに得られる値）、 \mathbf{r} はガウス分布 $\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{R})$ に従う誤差であり、観測ノイズと呼ばれる。

(2) ベイズの定理

ベイズの定理は

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})}{\int p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta}} \quad (4)$$

で表される。 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ は尤度であり、式(3)より

$$p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{N}(\mathbf{x}(\boldsymbol{\theta}), \mathbf{R}) \quad (5)$$

である。 $p(\boldsymbol{\theta})$ は事前分布であり、ガウス分布

$$p(\boldsymbol{\theta}) = \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\theta}}) \quad (6)$$

がよく用いられる。 $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$ は \mathbf{y} を観測した事後の $\boldsymbol{\theta}$ の分布（事後分布）であり、逆解析では $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$ を得ることが目標になる。式(5),(6)を式(4)に代入すれば、

$$p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) \propto \exp(-\varphi(\boldsymbol{\theta})) \quad (7)$$

と書ける。ただし

$$\begin{aligned} \varphi(\boldsymbol{\theta}) &\equiv \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{x}(\boldsymbol{\theta}))^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{x}(\boldsymbol{\theta})) \\ &+ \frac{1}{2}(\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\mu}) \end{aligned} \quad (8)$$

である。全ての Markov chain Monte Carlo (MCMC) 法において、 $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$ の定数部分は相殺されるため、 $\exp(-\varphi(\boldsymbol{\theta}))$ を考えれば十分である。

(3) Hamiltonian Monte Carlo法

Hamiltonian Monte Carlo (HMC) 法[2]は MCMC 法の一種である。HMC では補助ベクトル \mathbf{p} を導入し、

$$p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p}) = p(\mathbf{p}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) \quad (9)$$

で表される同時分布を考える。一般に、 \mathbf{p} には $\boldsymbol{\theta}$ と独立な平均 0 のガウス分布 $\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{M})$ が選択され

$$p(\mathbf{p}|\boldsymbol{\theta}) = p(\mathbf{p}) \propto \exp(-\mathcal{K}(\mathbf{p})) \quad (10)$$

となる。ただし

$$\mathcal{K}(\mathbf{p}) \equiv \frac{1}{2}\mathbf{p}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} \quad (11)$$

である。式(7),(10)を式(9)に代入すれば、

$$p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p}) \propto \exp(-\mathcal{H}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p})) \quad (12)$$

と書ける。ここで、 $\mathcal{H}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p})$ は Hamiltonian であり、

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p}) \equiv \mathcal{K}(\mathbf{p}) + \varphi(\boldsymbol{\theta}) \quad (13)$$

と定義される。これにより、 $\boldsymbol{\theta}$ の探索は以下の式で定義される Hamiltonian dynamics に基づいて行われる。

$$\frac{d\boldsymbol{\theta}}{dt} = \frac{d\mathcal{H}}{d\mathbf{p}} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p} \quad (14)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d\mathcal{H}}{d\boldsymbol{\theta}} = -\frac{\partial \varphi(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \quad (15)$$

HMC の特徴は、式(15)にて勾配の情報を利用することであり、これによって、ランダムな探索を行う従来の Metropolis-Hastings 法と比べ、サンプリング効率が飛躍的

に改善される。なお、式(14)及び(15)は Leapfrog 法によつて t 方向に数値積分を行うのが通常である。

4. Karhunen–Loève 展開

Karhunen–Loève (KL) 展開[3]とは、与えられた共分散カーネルを持つ確率ベクトル（または確率過程）を、共分散カーネルの固有値・固有ベクトル（または固有関数）を用いた線形和の形で表す手法である。固有値の小さい項を無視して近似を行い、パラメータの次元を減らす目的で用いられる。以下では 2 つの KL 展開について述べる。

(1) 離散型 Karhunen–Loève 展開

共分散カーネル $C(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ を持つ平均 $\bar{\mathbf{x}}$ の確率ベクトル \mathbf{X} に対する KL 展開（離散型 KL 展開）[3, 4] は

$$\mathbf{X} = \bar{\mathbf{x}} + \sum_{i=1}^N \sqrt{\lambda_i} \boldsymbol{\Phi}_i^{-1} \boldsymbol{\theta}_i \quad (16)$$

と書ける。ただし、 $\boldsymbol{\theta}_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$ 、 $\lambda_i, \boldsymbol{\Phi}_i$ は固有値問題

$$\mathbf{C}\boldsymbol{\Phi}_i = \lambda_i \boldsymbol{\Phi}_i \quad (17)$$

の固有値・固有ベクトルである。ここで \mathbf{C} は、 (s, t) 成分が $C(\mathbf{z}_s^c, \mathbf{z}_t^c)$ である半正定値対称行列である。上述の通り、透水係数分布 $k(\mathbf{z})$ は有限要素法を利用するに当たって、透水係数ベクトル \mathbf{k} へと離散化されるため、離散型 KL 展開は自然に導入できる[1, 5]。

さて、 \mathbf{C} は離散点 $\{\mathbf{z}_i^c\}_{i=1}^N$ に依存するが、 $\{\mathbf{z}_i^c\}_{i=1}^N$ は形状パラメータ ${}^2\boldsymbol{\theta}$ を推定する過程で移動する。すなわち、 \mathbf{C} は ${}^2\boldsymbol{\theta}$ に依存し、HMC において ${}^2\boldsymbol{\theta}$ が更新される度に、式(17)の固有値問題を解き直す必要がある。さらに、HMC では式(15)の計算に、 $\lambda_i, \boldsymbol{\Phi}_i$ の勾配を要し、それぞれ以下の式で与えられる。

$$\frac{\partial \lambda_i}{\partial {}^2\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{\Phi}_i^T \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial {}^2\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{\Phi}_i \quad (18)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_i}{\partial {}^2\boldsymbol{\theta}} = (\lambda_i \mathbf{I} - \mathbf{C})^\dagger \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial {}^2\boldsymbol{\theta}} \boldsymbol{\Phi}_i \quad (19)$$

ここで、 \mathbf{I} は単位行列、 $(\cdot)^\dagger$ は Moore–Penrose 逆行列を表す。つまり、 $\boldsymbol{\Phi}_i$ の勾配計算には、密行列 $\lambda_i \mathbf{I} - \mathbf{C}$ の Moore–Penrose 逆行列が必要であり、しかも HMC で ${}^2\boldsymbol{\theta}$ が更新される度に計算されるため、非常に高負荷な計算となる。

(2) 連続型 Karhunen–Loève 展開

$X(\mathbf{z})$ を確率過程（無限次元の確率ベクトル）とみなした場合、 $X(\mathbf{z})$ に対する KL 展開（連続型 KL 展開）は共分散カーネル $C(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 及び平均 $\bar{X}(\mathbf{z})$ を用いて

$$X(\mathbf{z}) = \bar{X}(\mathbf{z}) + \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \phi_i(\mathbf{z})^{-1} \boldsymbol{\theta}_i \quad (20)$$

と書ける。 $\boldsymbol{\theta}_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$ 、 λ_i, ϕ_i は積分方程式

$$\int_D C(\mathbf{z}, \mathbf{z}^*) \phi_i(\mathbf{z}^*) d\mathbf{z}^* = \lambda_i \phi_i(\mathbf{z}) \quad (21)$$

の固有値及び固有関数である。

連続型 KL 展開は、領域独立性という性質を持つ[6]。これは、KL 展開により生成される確率過程の 1 次・2 次モーメントが、領域変化に対して不变であるという性質である。特に、ガウス過程に対する KL 展開では、KL 展開そのものが領域変化に対し不变になる。例えば、領域 Ω に穴 Ω_h を開けたとしても、残りの領域 $\Omega \setminus \Omega_h$ での確率場は不变である(図 1)。この領域独立性より、任意の $\mathcal{D}(\theta)$ を包括する仮想領域 \mathcal{D}' (つまり $\mathcal{D}' \supseteq \mathcal{D}(\theta)$)での KL 展開によって、任意の $\mathcal{D}(\theta)(=\mathcal{D}(\theta) \cap \mathcal{D}')$ での KL 展開を扱える。つまり、固有値問題は、 \mathcal{D}' 上での KL 展開を構築するためにただ一度解けば十分であり、 $\mathcal{D}(\theta)$ の変化に応じて繰り返し解く必要はない。また、ここで扱う固有値問題は θ に依存せず、固有値問題の変化に起因する HMC での勾配計算も回避できる。なお、本研究では、式(21)の固有値問題は Nyström 法によって数値的に解くこととした。また、連続型 KL 展開で表された $k(z)$ は、離散点 $\{\mathbf{z}_i^c\}_{i=1}^N$ を代入することで、直ちに透水係数ベクトル \mathbf{k} に変換できる。

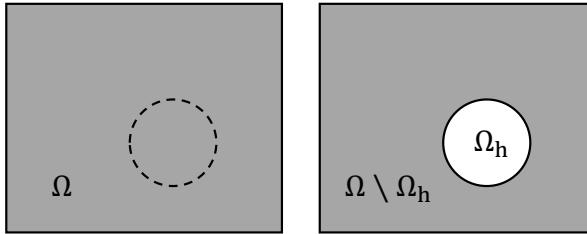


図 1 領域独立性 ($\Omega \setminus \Omega_h$ でのガウス確率場は、 Ω_h の有無によらず不变)

5. 数値解析

(1) 3つの逆解析法の比較

a) 問題設定

図2の1次元浸透流について透水係数分布を推定する逆問題を考える。逆解析は、本論文で提案する同時推定、Koch *et al.*の同時推定[1]、及びKL展開を用いた物性推定の3つの逆解析法により遂行した。なお、物性推定には[5]を用いた。提案手法がKoch *et al.*の同時推定法の結果を損なわずに高速化を達成すること、同時推定と物性推定の結果を比較し同時推定の優位性を示すことが目的である。

推定対象となる透水係数分布 $k(x)$ は、図 3 のようであり、 $x = -1.2$ および $x = 0.8$ を境に、周囲とは透水係数の大きく異なる領域を持つ。境界条件は、右端では水頭が 0 で一定とする。左端では水頭が変化し、 t 組目の条件において $h(t) = 0.1 + 0.01(t-1)$ ($t = 1, \dots, 31$) とする。なお、水頭の単位はメートル(m)である。この 31 組の境界条件に対する定常流に関して、6 点(図 2 の赤色の×印)での水頭と、右端での流量の観測情報を用いて、物性推定および同時推定を行う。物性推定での推定対象は、各有限要素における透水係数 \mathbf{k} である。同時推定での推定対象は、領域の境界の座標 x_1, x_2 (つまり $\theta = [x_1, x_2]^T$)と、各有限要素における透水係数 \mathbf{k} とする。いずれの推定法でも、 \mathbf{k}

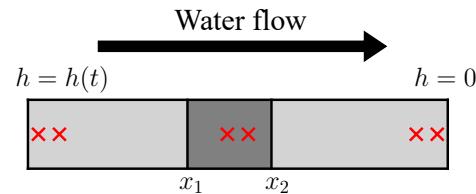


図 2 1 次元浸透流問題

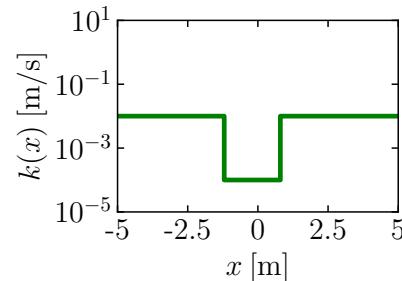


図 3 透水係数分布

は KL 展開を用いた近似により、低次元なパラメータ θ で表される。このとき、 \mathbf{k} の非負性を保証するために、 $\hat{k}(x) = \log_{10}k(x)$ がガウス過程に従うとし、 $\hat{k}(x)$ (または $\hat{\mathbf{k}}$)に対して KL 展開を用いた。 \hat{k} の共分散カーネルは

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = v \exp\left(-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T(\mathbf{x} - \mathbf{y})}{2l^2}\right) \quad (22)$$

とする。ここで v は相関スケール、 l は相関長であり、本解析ではハイパー-パラメータである。相関スケールは、すべての解析で $v = 1$ とした。相関長 l は、物性推定では、0.5, 1.0 または 2.5m、同時推定では 2.5, 5.0 または 10.0m とした。同時推定では、領域 $-5 \leq x \leq x_1, x_2 \leq x \leq 5$ (図 2 の薄い灰色部分)の $\hat{k}(\mathbf{z})$ (または $\hat{\mathbf{k}}$)と領域 $-x_1 \leq x \leq x_2$ (図 2 の濃い灰色部分)の $\hat{k}(\mathbf{z})$ (または $\hat{\mathbf{k}}$)は、それぞれ別の KL 展開により近似した。KL 展開では、いずれの場合も $\lambda_i \geq 10^{-3}$ を満たす項を採用した。事前分布は、 $\theta \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}), \hat{\theta} \sim \mathcal{N}([-2.5, 2.5]^T, 2.5^2 \mathbf{I})$ とし、有限要素数は $N = 40$ とした。

b) 数値解析結果

図4に推定された透水係数分布を示す。(A),(B),(C)はそれぞれ、物性推定、Koch *et al.*の同時推定および本論文で提案する同時推定により得られた結果である。

物性推定(A)の $l = 2.5$ では、対象領域の中央部において透水性が小さな傾向にあるが、急激な透水係数の変化を捉えきれていない。これは、中央部分の透水係数が異なる領域の幅に対して l が大きく、空間的な物性値の急激な変化を表現できないためである。 $l = 1.0$ では、 $l = 2.5$ の推定と比べ、95%信用区間(95%CI)が拡大したものの、95%CI が真値を包括するまでは至らず、透水係数の変化を捉えられていない。 $l = 0.5$ では、95%CI が真値を概ね包括しており、特異領域を検出できているが、結果の分散が大きく、明瞭な可視化とは言えない。

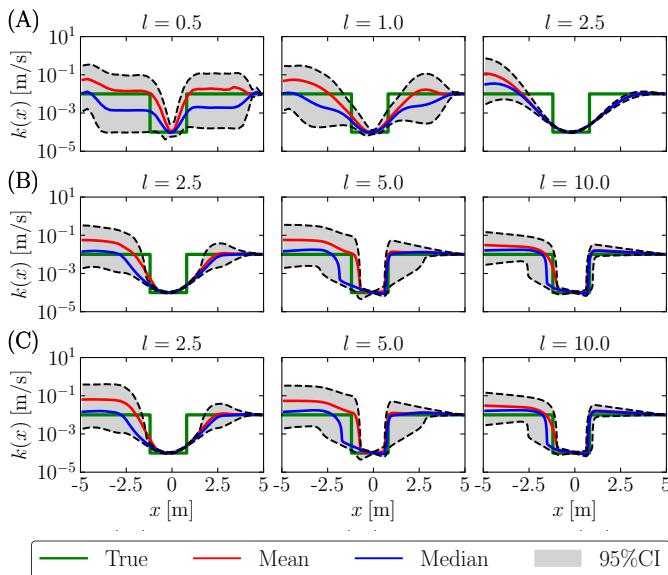


図4 透水係数分布の推定結果

2つの同時推定の結果(B)(C)は、ほぼ一致した。 $l=5.0, 10.0$ の推定結果は、95%CIが真値をほぼ包括しており、物性値の急激な変化も捉えられていることから、十分な精度を有していると言える。特に $l=10.0$ の場合は、平均値、中央値が共に真値と近い推定となった。一方、 $l=2.5$ の場合は、95%CIが真値をほぼ包括していないことから、同時推定においても、適切な l の選択が重要であることが分かる。また、提案する同時推定は、Koch *et al.*の同時推定よりも、勾配計算で4~7倍程度、解析全体で2~3倍程度高速化された。

(2) 2つの同時推定の計算時間の比較

a) 問題設定

先ほどと同様の問題設定で、有限要素数 N を変更して、HMCでの勾配計算(式(15)中の $\partial\varphi(\boldsymbol{\theta})/\partial\boldsymbol{\theta}$)に要する時間について、提案する同時推定とKoch *et al.*の同時推定[1]の比較を行った。有限要素数 N は40, 80, 160, 320, 400, 800, 1600, 3200, 4000とした。また、相関長 l は10.0mとした。

b) 数解析結果

図5に計算時間の結果を示す。横軸が有限要素数、縦軸が計算時間であり、オレンジ点がKoch *et al.*の同時推定、青点が提案手法に対応する。Koch *et al.*の同時推定の計算量オーダーは $O(N^2)$ 程度であるのに対し、提案手法では $O(N)$ 程度であり、大幅に計算速度が改善されていることが確認された。実際、有限要素数 $N=40$ では約4倍の高速化であったのに対し、 $N=4000$ では約1000倍の高速化が達成されている。

6. 結言

本研究では、連続型KL展開の領域独立性を利用した新たな同時推定法を提案した。数値解析による検証では、以下を示した。

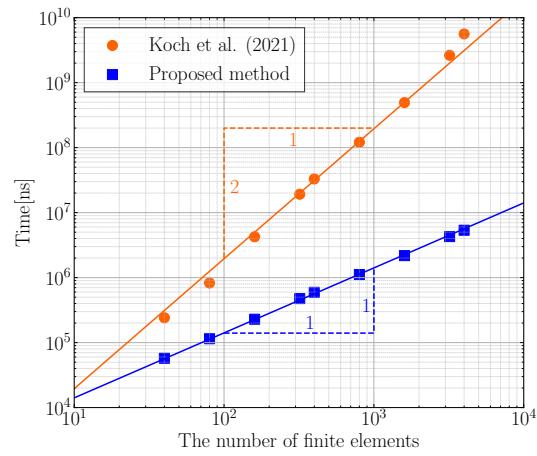


図5 勾配計算の時間比較

- KL展開を用いた物性推定では、空間的な物性値の急激な変化を精度良く捉えられないが、同時推定では、形状パラメータの導入により、適切な相関長を選べば、急激な変化も精度良く検出できる。
- 提案した同時推定は、Koch *et al.*の同時推定の結果を損なうことなく、計算量を1オーダー程度改善する。

参考文献

- [1] Koch, M. C. et al.: Hamiltonian Monte Carlo for Simultaneous Interface and Spatial Field Detection (HMCSISFD) and its application to a piping zone interface detection problem. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Vol.45, pp.2602-2626, 2021.
- [2] Neal, R.M.: Handbook of Markov Chain Monte Carlo, Chapter 5: MCMC Using Hamiltonian Dynamics. CRC Press, 2011.
- [3] Loève, M.: Probability Theory II. New York, NY, Springer, 1978.
- [4] Fukunaga, K and Koontz, W.L.: Representation of random processes using the finite Karhunen-Loeve expansion. *Information and Control*, Vol.16, pp.85-101, 1970.
- [5] Koch, M. C. et al.: Adjoint Hamiltonian Monte Carlo algorithm for the estimation of elastic modulus through the inversion of elastic wave propagation data, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.121, pp.1037-1067, 2020.
- [6] Pranesh, S. and Ghosh, D.: Faster computation of the Karhunen-Loeve expansion using its domain independence property, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.285, pp.125-145, 2015.