

逆問題における数法則式発見システムによる疑似逆関数の導出法*

Derivation Method of Quasi-Inverse Function Using Equation Discovery System in Inverse Problem

野口 智弘¹, 天谷 賢治², 岸本 喜久雄³

Tomohiro NOGUCHI, Kenji AMAYA and Kikuo KISHIMOTO

¹ 東京工業大学大学院 (〒152-8552 目黒区大岡山 2-12-1)

² 東京工業大学大学院情報理工学研究科情報環境学専攻

³ 東京工業大学大学院理工学研究科機械制御システム専攻

In this paper, we apply the equation discovery system to inverse analysis, and present the method of deriving the formula which can calculate unknown parameter directly. This method is the modification of RF5, and numerical model identification system using genetic algorithm and information criterion. It is assumed that the model is expressed with multi-dimensional polynomial equation. The number of terms and dimensions are coded into genetic algorithm. The coefficients for each model are obtained by least square method. The fitness for each chromosome is evaluated with an information criterion c-AIC. Numerical simulations are performed to demonstrate the validity and usefulness of this method.

Key Words: Inverse Problem, Numerical Analysis, Parameter Identification, Equation Discovery System, Genetic Algorithm, Information Criterion

1. 緒 言

逆問題の一つであるパラメータ推定は計測分野の実用的かつ重要な問題である。これは、次式のように表現される測定量 ζ と系の状態変数 Q との関係を表す方程式(観測方程式)から Q のうちの求めたい未知パラメータ q を推定するものである。なお、 Φ は系を表現する既知関数である。

$$\zeta = \Phi(q, Q) \quad (1)$$

一般に非線形系でのパラメータ推定問題では、線形系のような

$$q = \Phi^{-1}(\zeta, Q) \quad (2)$$

と表されるような逆関数 Φ^{-1} が解析的に得られない。そのため、次式のような未知パラメータ q を設計変数とする非線形最適化問題として定式化される場合が多く⁽¹⁾、パラメータ推定に関連する研究では、この手法が多用されている⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾。

$$[\zeta - \Phi(q, Q)]^2 \rightarrow \min \quad (3)$$

この手法では観測方程式 $\Phi(q, Q)$ が有限要素法などの大規模計算を伴う形でモデル化された場合には多くの計算時間が必要となる。その上、最終的に得られる解は特定の条件下でのものである。例えば観測装置や観測対象といった条件が変更された場合、 Q が変更するので式(3)の計算をその都度行わなければならず、得られる解は汎用性や再利用性を持たないといえる。このような作業は、計測現場で即座にパラメータを同定したい場合などはエンドユーザレベルでは負担が大きく、敬遠される傾向が見られる。

一方、現象に対して何らかの”数法則式”を発見する研究は様々な分野において行われている。その結果、実験結果から経験的に求められる実験式や、理論面から導出された理論式が数多く提唱されている。近年の計算機の発達により、(多変量) 数値データの集合からその規則性を読み取り、数法則式を発見するという非常に繁雑な作業についての自動化・支援に関する研究が活発に行われている。そして、BACON システムに始まり FAHRENHEIT, ABACUS など様々な数法則式発見システムが提案されている⁽⁵⁾⁽⁶⁾。

本研究では、数法則式発見システムをパラメータ推定の分野に適用し、式(2)に相当する観測量から未知パラメータを直接求められる式を導出する枠組を開発することを目的とする。なお、本研究では式(2)の近似式、即ち疑似逆関数を導出する式発見の作業は測定

* 原稿受付 2004 年 7 月 20 日、改訂年月日 2004 年 12 月 2 日、発行年月日 2004 年 12 月 20 日、©2004 年 日本計算工学会。
Manuscript received, July 20, 2004; final revision, December 2, 2004; published, December 20, 2004. ©2004 by the Japan Society for Computational Engineering and Science.

現場におけるパラメータ推定作業の運用の前段階で行い、得られた式をエンドユーザに提供する状況を想定している。エンドユーザはその数式に対して数値を代入するだけでパラメータ推定作業が行えるようになり、労力や効率の面で改善が見込めると考えられる。また、この手法に適するように既存の数法則式発見システムである RF5(次章参照)に改良を加え、その有用性を確かめるために数値シミュレーションを行う。また、応用例として微小圧子押込試験法を利用したヤング率推定問題に本手法を適用し、その有効性を示す。

2. 数法則式発見システム

2.1 従来法 (RF5) 既存の数法則式発見システムの問題点⁽⁵⁾を解決するために斎藤らはニューラルネットとMDL(Minimum Description Length)規準を用いたRF5を提唱した⁽⁷⁾。これは、説明変数を x 、目的変数を y としたときに法則式の形式を

$$y = w_0 + \sum_{i=1}^L w_i \prod_{j=1}^M x_j^{w_{ij}} \quad (4)$$

のような多項式とし、 x, y のデータ群から式を得るものである。斎藤らはこの式を

$$y \rightarrow w_0 + \sum_{i=1}^L w_i \exp \left(\sum_{j=1}^M w_{ij} \ln x_j \right) \quad (5)$$

と変形することで、中間ユニット数 L 、全入力ユニットと中間ユニット i との結合重み w_{ij} 、全中間ユニットと出力ユニットとの結合重み w_i の3層ニューラルネットとみなして、数法則式発見問題をニューラルネットの学習問題として定式化している。

2.2 問題点 RF5では標準的なBP(Back Propagation)アルゴリズムでの学習が困難であることから、準ニュートン法を基本枠組としたBPQ(Back Propagation based on Quasi-Newton)アルゴリズムを提案して収束性能を向上させている。しかし、BP系アルゴリズムは初期値次第で局所解に陥りやすく、その場合は最初から学習し直さなければならないという欠点がある。そのため、本問題のような多峰性が予想されるような場合には適切な手法とは言えない。そこで、本研究では高い大域探索能力を持ち、多峰性問題向きの解法である遺伝的アルゴリズム(GA)を利用した数法則式発見システムを提案する。

3. 手法概要

3.1 問題設定 未知の関数 $\theta(x)$ にガウシアンノイズ ε が加わった N 個のサンプル $(x_k, y_k) = (x_k, \theta(x) + \varepsilon)$ ($k = 1 \sim N$) を入力データとして、 $\theta(x)$ を近似する次式のような多項式関数 $\xi(x)$ を求める問題を考える。

$$\xi(x) = w_0 + \sum_{i=1}^L w_i \prod_{j=1}^M x_j^{w_{ij}} \quad (6)$$

ここで求めるべきモデル係数は w_i, w_{ij} の計 $L(M+1)+1$ 個である。ただし、入力する x のなかには数式

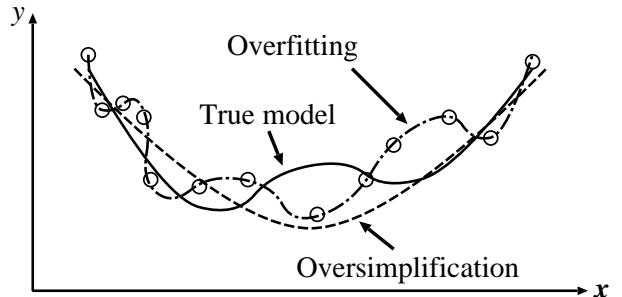


Fig.1 Conceptual figure of overfitting and oversimplification (circles denote input data)

を構成するのには不必要的なものも含まれている。また、各々の範囲は $x_j \geq 1$ へ変換してあるものとする。

3.2 評価基準 本問題において、モデル選択の目的関数が備えるべき条件として

$$(i) \text{ 残差の最小化} \quad \sum_{k=1}^N (y_k - \xi(x_k))^2 \rightarrow \min$$

(ii) 数法則式として可能な限り簡潔な表現であること、即ち使用するモデル係数の個数の最小化

の2つが挙げられる。

Fig.1の実線を真のモデル、そこから得られた誤差を含む離散データ値を図中の印とする。条件(i)を重視してモデルを探索すると、一点鎖線の様なデータの誤差の部分に引きずられすぎた複雑なモデルが選ばれることになる。一方、条件(ii)を重視すると、破線の様な本来のモデルを十分に表現し切れない単純すぎるモデルが選ばれることになる。即ち評価基準は(i)と(ii)の相反する2条件のバランスをとることが重要となる。

このような場合におけるモデル選択の基準として用いられることが多い情報量規準は AIC(Akaike's Information Criterion)⁽⁸⁾を筆頭に様々なものが提唱されている⁽⁹⁾が、ここでは既存の情報量規準であるc-AIC(付録参照)を用いることとする。

4. アルゴリズム

本問題のような多峰性が予想される問題に対して常に効率よく望ましい結果を得るために、以下に述べるような実装を行った。

4.1 実数値GAとバイナリGAの併用 入力データ x には数式を構成するのには必ずしも必要でないものや感度が低いものも含まれている。その中から最適な組合せを選ぶことも目的の一つである。そのためには式(6)で不要な x_j に対応するべき乗の部分 w_{ij} が厳密に0となることが望ましい。そこで、実数値遺伝子 w_{ij} と共にバイナリ遺伝子 v_{ij} を用意して式(6)を

$$\xi(x) \rightarrow w_0 + \sum_{i=1}^L w_i \prod_{j=1}^M x_j^{w_{ij} v_{ij}} \quad (7)$$

$(v_{ij} : \text{binary-coded gene, } 0 \text{ or } 1)$

Table 1 GA setup

Population size	400
Initial group generation	real-coded : uniform random numbers binary-coded : 60[%] → 0 , 40[%] → 1
Searching range	[-10, 10]
Selection	elite strategy once per 100 generations : 30[%] of higher ranks others : 60[%] of higher ranks
Crossover	real-coded : BLX- α ($\alpha = 0.2$) ⁽¹³⁾ binary-coded : uniform crossover (crossover rate = 50[%])
Mutation	once per 100 generations : mutation rate=50[%] others : mutation rate=5[%]
GA ending condition	less than 1[%] of fitness improvement per 500 generations / over 5000 generations

とすることで不必要的 x を排除しやすくなり、収束するまでの計算時間を短縮できる。

4.2 モデル係数の分離 $L(M+1)+1$ 個のモデル係数 w は、係数の部分 w_i とべき乗の部分 w_{ij} の 2 種類にわけられる。 w_i ($i = 0 \sim L$) に関しては重み付き線形最小二乗法を適用し、 w_{ij} は GA で求めることで全体の計算量を低下させる。

4.3 ハイブリット探索 一般に GA は局所探索の手段を持たない⁽¹⁴⁾ため、GA のみで収束させると非常に時間がかかることになる。よって、GA での大域探索後に別手法で収束させることとする。ここでは収束条件に達したら GA を打ち切って準ニュートン法 (H 公式の BFGS 公式⁽¹¹⁾) へ移行することとする。

手続き全体の流れを Fig.2 に示す。

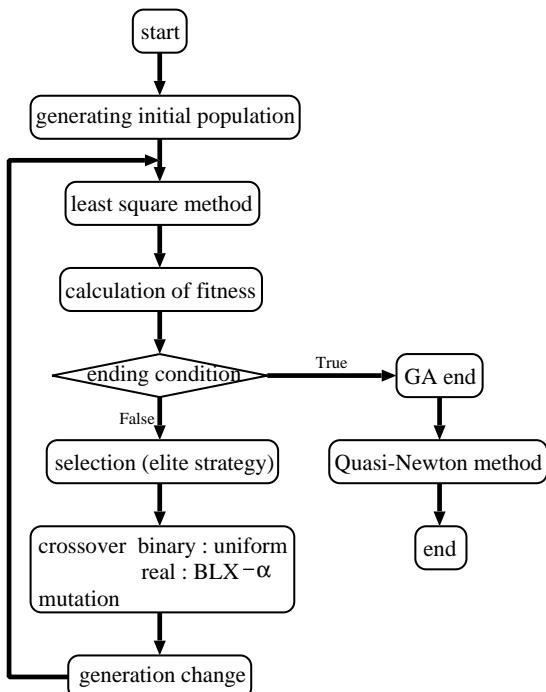


Fig.2 Flowchart of algorithm

5. 提案手法の検証

提案手法の検証のために、適当な例題を設定して数值実験を行う。以下のような式

$$\begin{aligned} y = & 2.5 - 4x_1^{1.4}x_6^{2.6} + 5.5\frac{x_3^{5.4}}{\sqrt{x_4x_5}} \\ & + 1.5x_1^{1.4}x_2^{3.7}x_4^4 + 0 \cdot x_7x_8x_9x_{10} \end{aligned} \quad (8)$$

を復元する問題を考える。即ち、正解となる項数 L は 3 であり、 $x_1 \sim x_{10}$ ($M = 10$) の中から不必要的もの ($x_7 \sim x_{10}$) を除きながら式を復元する問題となる。入力データは $x_1 \sim x_{10}$ の各変数に [1, 2] の範囲の一様乱数⁽¹²⁾を与える、対応する y を式 (8) より計算することで入力データ群を作成する。

GA の設定を Table 1 に示す。これらの値は文献⁽¹⁰⁾の掲載値を参考にし、計算終了までの計算時間を考慮して決定した。なお、これらの値は収束判定に関するパラメータ以外は多少増減させても収束に要する時間が変わるもので、収束結果については大きな違いは見られなかった。

5.1 例題 1 まず、式 (8) の復元に関して、最適な項数の推定が行えるかどうかについてのシミュレーションを行う。入力データのサンプル数は 100 とし、 y には誤差として標準偏差が y の 0.5[%] となるガウシアンノイズを加えている。

各 L についてそれぞれ c-AIC が最小となる式の導出を行った。各 L で導出された式に対する c-AIC を Table 2 に示す。c-AIC が最小となるのは $L = 3$ であり、それ以降は L が増加するにつれて c-AIC も増加しているので $L = 3$ が最良のモデルであると考えられる。よって、提案手法により、最適な項数の推定が可能であることがわかる。また得られた式 \hat{y} を Table 2 下に示す。正解に非常に近いものが得られていることがわかる。

5.2 例題 2 次に、式 (8) の復元に関して、 $L = 3$ (正解) と仮定して、入力データ誤差の標準偏差 σ と入

Table 2 Results of example problem 1 ($N = 100$, $\sigma = 0.005y_k$)

Number of term L	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
c-AIC	1350.0	1243.0	463.4	467.2	475.4	475.4	481.1	485.1	489.3	494.6

Estimated result : $\hat{y} = 2.41 - 3.95x_1^{1.41}x_6^{2.61} + 5.50x_3^{5.40}x_4^{-0.50}x_5^{-0.50} + 1.50x_1^{1.40}x_2^{3.70}x_4^{4.00}x_9^{-4.50 \times 10^{-3}}$

Table 3 Results of example problem 2

N, σ	Estimated result \hat{y}	Error[%]
100, 0.01 y_k	$2.27 - 3.92x_1^{1.42}x_6^{2.61} + 5.52x_3^{5.39}x_4^{-0.49}x_5^{-0.50} + 1.49x_1^{1.42}x_2^{3.70}x_4^{4.00}$	0.290
50, 0.01 y_k	$1.67 - 3.45x_1^{1.41}x_6^{2.74} + 5.44x_2^{0.30}x_3^{5.04}x_5^{-0.45} + 1.18x_1^{1.51}x_2^{3.90}x_3^{-0.24}x_4^{4.19}$	2.213
100, 0.05 y_k	$1.40 - 3.31x_1^{1.49}x_6^{2.75} + 5.16x_3^{5.49}x_4^{-0.47}x_5^{-0.50} + 1.44x_1^{1.46}x_2^{3.70}x_4^{4.00}$	1.026
500, 0.05 y_k	$2.56 - 4.08x_1^{1.41}x_3^{-0.05}x_6^{2.58} + 5.48x_2^{0.04}x_3^{5.38}x_4^{-0.48}x_5^{-0.51} + 1.50x_1^{1.42}x_2^{3.69}x_3^{-0.04}x_4^{3.99}$	0.950
50, 0.001 y_k	$2.51 - 4.00x_1^{1.40}x_6^{2.60} + 5.49x_3^{5.41}x_4^{-0.50}x_5^{-0.50} + 1.50x_1^{1.40}x_2^{3.70}x_4^{4.00}$	0.089
$2.5 - 4x_1^{1.4}x_6^{2.6} + 5.5x_3^{5.4}x_4^{-0.5}x_5^{-0.5} + 1.5x_1^{1.4}x_2^{3.7}x_4^{4.0}$		(Original)

カデータ数 N について設定を変えてその影響を評価するシミュレーションを行った。

得られた結果を Table 3 に示す。なお、Error は次式から計算している。

$$\text{Error} = \int |y - \hat{y}| dx / \int |y| dx \quad (9)$$

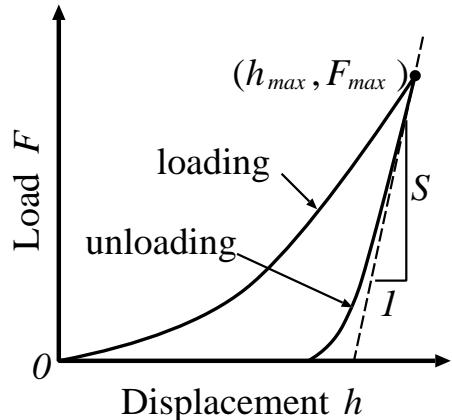
この結果より、入力データ数が少ない場合や入力データ数が多くてもデータの誤差が大きい場合などといった入力データが悪条件の場合は、不必要的 x も選ばれており、提案した手法では厳密な式の形の復元は難しいことがわかる。これは、不必要的 x が加わることでパラメータ数が増えることよりも、残差が減る効果の方が強く出たためであると考えられる。よって、評価基準のなかでパラメータ数に関するペナルティ項、特にべき乗部分について修正が必要であると考えられる。

しかし、入力データが悪条件でなければ (Table 3 で $N = 100$, $\sigma = 0.01y_k$ の場合など) 式は復元できており、また全体的な誤差 Error に着目すると、悪条件な場合であっても高精度な結果が得られていることがわかる。よって、近似関数を求めるという観点では本手法は有効に機能しており、疑似逆関数を求めるという本研究の目的に最低限必要な機能を備えているといえる。

6. 微小圧子押込法でのヤング率推定

実際の問題への応用例として、微小圧子押込法でのヤング率推定問題への本手法の適用を行う。まず従来法の理論式の説明を行い、次に FEM 解析の結果からの問題点をあげ、最後にヤング率が直接求められる式の導出を行う。

6.1 微小圧子押込法 微小圧子押込法とは測定目的に応じた各種形状の圧子を試験片に対して押し込み、得られる荷重 (F) – 变位 (h) 曲線から材料の機械的

Fig.3 Schematic figure of a typical $F - h$ curve

特性を求める手法である。この試験法は、微小な測定対象あるいは測定領域の材料物性を評価する場合や、通常の材料試験用の試験片作成が困難である場合などに對して有効な試験法である。例えば、薄膜の材料特性はバルクから得られるものと必ずしも一致しない⁽¹⁵⁾ため、薄膜状態での材料特性評価が不可欠であり、その際にには微小圧子押込試験法がよく使われている。

試験片のヤング率は以下の式から算出される⁽¹⁷⁾。

$$E_r = \frac{S}{2} \sqrt{\frac{\pi}{A}} \quad (10)$$

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1 - \nu_s^2}{E_s} + \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} \quad (11)$$

ここで A は圧痕の投影面積、 S は Fig.3 に示すように F_{max} における除荷時の $F - h$ 曲線の傾き、 E_r は複合弾性率、下添字 i, s は各々圧子、試験片を意味する。

ナノインデンテーションなどでは圧痕は非常に小さく、直接測定することは困難である。そのため、圧子形状が既知であることを利用して $F - h$ 曲線から A を算出する方法が用いられる。すなわち、 A は圧子の侵

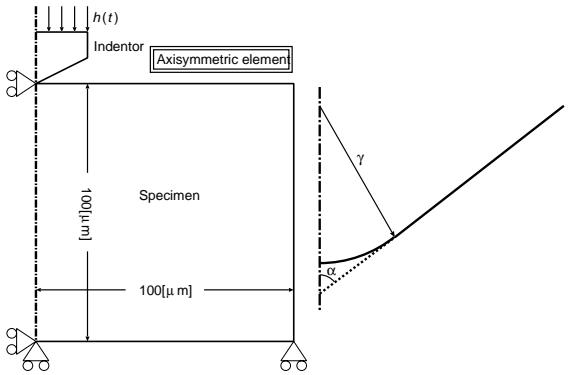


Fig.4 Analysis object Fig.5 Indenter apex

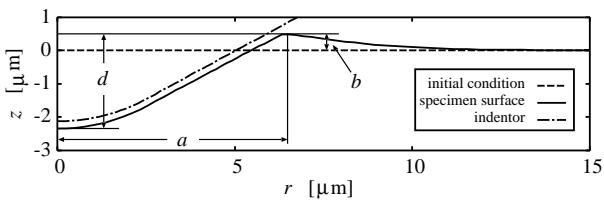


Fig.6 Specimen condition after test

入深さ h_c の関数であり、 h_c を求めるのに Doerner-Nix 法⁽¹⁶⁾ では次式から算出する。

$$h_c = h_{max} - h_e = h_{max} - \frac{F_{max}}{S} \quad (12)$$

6.2 微小圧子押込法の従来法の問題点 微小圧子押込法の有限要素解析を行った際、解析結果から求めたヤング率が計算に使用したものと 10[%] 以上のずれが生じたとの報告例がある⁽¹⁸⁾。まず従来法の理論式を用いたヤング率の求め方について検証を行う。なお、例題ではマイクロインデンテーションを想定しており、圧痕形状は直接計測できるものとして取り扱う。

FEM 解析は Fig.4 に示すように軸対称モデルで行う。解析時の設定を Table 4 に示す。試験片は A2024-T351、圧子は Fig.5 に示すように先端に曲率を持つ円錐形状のダイアモンドを想定している。ただし、静的流動応力については Table 4 に示すような単純な式を仮定している。なお、 ε_p は塑性ひずみである。

Table 5 に各々の場合について解析から得られた結果と、そこから測定誤差を考慮せずに求めた E_s を示す。なお、 a は圧痕の半径であり $a = \sqrt{A/\pi}$ 、 b は圧痕周囲の初期状態からの上昇分、 d は変形後の全体の深度である (Fig.6 参照)。また、 \hat{E}_s については D-N の方は Doerner-Nix 法に基づいて $F-h$ 曲線から a を推定して導出した場合、 ε_p の方は直接 a を利用して導出した場合である。Fig.7 に FEM 解析結果 (\times 印) と各々導出した \hat{E}_s (+印と *印) を示しているが、 E_s を精度良く再現できているとは言い難い。

この誤差の理由としては、Doerner-Nix 法では単純に押し込み量と $F-h$ 曲線から A を導出しているので、変形時の盛り上がり分 (b に相当) によって圧子との接触面積が増加していることが考慮されていないためであると考えられる。また、直接に面積 A を測定し

Table 4 Parameter setting in FEM analysis⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾

Specimen	Young's modules(E_s)	73.4[GPa]
	Poisson's ratio(ν_s)	0.34
	Yield stress(σ_y)	358[MPa]
	Static flow stress(σ_f)	$\sigma_y(\varepsilon_p + 1)$
Indenter	Young's modules(E_i)	1140[GPa]
	Poisson's ratio(ν_i)	0.04
	Apex angle(α)	60 °
	Curvature radius(γ)	5[μm]
Friction	Friction coefficient(μ)	0.0

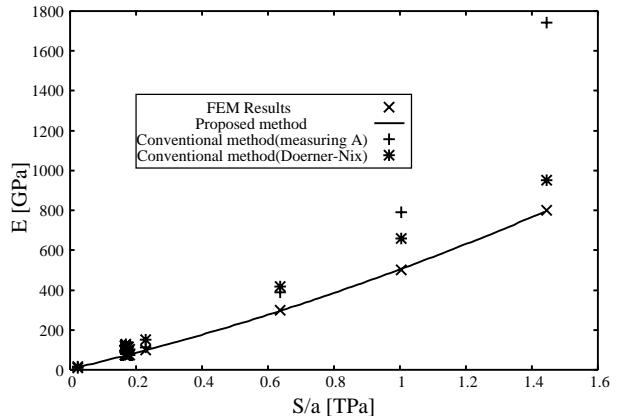


Fig.7 Comparison between conventional method and proposed method

ても E_s が大きくなると大きな誤差が出ているが、これは計測できるのが圧子押込終了後の形状であり、圧子を戻していく段階での変形が大きくなっているためであると考えられる。

6.3 式の導出 前章で得られた数値解析結果を利用して、提案した手法で次式のようなヤング率を推定する近似式の導出を行うこととする。なお、GA の設定は Table 1 と同様に行なった。

$$E_s = \xi(a, b, d, S, S/a, \nu, \sigma_y, \sigma_f, h_{max}, \mu) \quad (13)$$

まず、項数 $L = 1$ の場合は

$$E_s[\text{GPa}] = -218.3 + 222.8 \left(1 + \frac{S}{a}\right)^{1.697} \quad (14)$$

という式が得られた。なお、 S/a の単位は [TPa] として導出している。これは、 $L = 1$ という非常に簡単な式を仮定した場合は S/a が支配的であり、他の x の感度が低かったことを示している。Fig.7 に得られた結果を実線で示す。従来法と比較して FEM 解析結果 (\times 印) とよく一致している。

ここで、式導出の際の入力データとして用いた数値以外で精度の検証を行う。例えば $E_s = 400[\text{GPa}]$ での FEM 解析で得られた結果 $S = 5.63582[\text{MN/m}]$ 、 $a = 6.75451[\mu\text{m}]$ を式 (14) に代入すると $405.5156[\text{GPa}]$ となり、提案手法で導出された式を利用することで精度良い E_s のパラメータ推定ができることがわかる。

Table 5 Results of FEM analysis

Setting	Measurable data				S/a[TPa]	\hat{E}_s [GPa]		E_s [GPa]
	a[μm]	b[μm]	d[μm]	S[MN/m]		use a	D-N	Answer
Table 4	6.51313	0.49310	2.83646	1.10840	0.17018	81.31	112.03	73.4
$\nu_s=0.0$	6.20711	0.40945	2.75938	1.07928	0.16684	94.10	123.14	73.4
$\nu_s=0.2$	6.46879	0.44579	2.80252	1.07512	0.16620	86.04	117.99	73.4
$\nu_s=0.49$	6.56080	0.52912	2.87577	1.18278	0.18028	74.37	102.52	73.4
$h_{max}=1[\mu\text{m}]$	3.37296	0.23021	1.14016	0.56663	0.16799	80.19	127.92	73.4
$h_{max}=3[\mu\text{m}]$	7.41941	0.58303	3.40655	1.28186	0.17277	82.65	109.03	73.4
$\sigma_y=10[\text{MPa}]$	6.83062	0.67326	3.16807	1.20428	0.17631	84.49	115.96	73.4
$\sigma_y=100[\text{MPa}]$	6.72455	0.62868	3.08114	1.15780	0.17218	82.34	112.95	73.4
$\sigma_y=500[\text{MPa}]$	6.21984	0.45055	2.73915	1.08640	0.17467	83.64	111.76	73.4
$\sigma_y=1000[\text{MPa}]$	5.79026	0.31205	2.43638	1.00366	0.17334	82.95	109.53	73.4
$\sigma_f = 2\sigma_y(\varepsilon_p + 1)$	6.09403	0.35191	2.67552	1.03345	0.16958	81.01	105.25	73.4
$\sigma_f = 0.5\sigma_y(\varepsilon_p + 1)$	6.70813	0.61387	2.96562	1.14924	0.17132	81.90	115.60	73.4
$\mu=0.2$	6.21664	0.30264	2.62954	1.06639	0.17154	82.01	108.18	73.4
$\mu=0.4$	6.16085	0.25864	2.58692	1.05225	0.17080	81.63	106.80	73.4
$E_s=10[\text{GPa}]$	5.13434	0.15448	1.90421	0.12354	0.02406	10.75	15.51	10
$E_s=100[\text{GPa}]$	6.58152	0.53826	2.91817	1.51290	0.22987	113.03	151.05	100
$E_s=300[\text{GPa}]$	6.73257	0.63419	3.08514	4.28286	0.63614	389.92	417.66	300
$E_s=500[\text{GPa}]$	6.76983	0.65297	3.11893	6.79640	1.00392	792.20	659.49	500
$E_s=800[\text{GPa}]$	6.79418	0.66133	3.13601	9.82057	1.44543	1741.38	950.29	800

なお，本手法では物理的な理論面等についての考慮を一切加えていないため式(14)は原点を通らない式であるが，それらを考慮した拘束条件を加えた数式導出を行うことでより良い結果が得られると考えられる。

様々な項数 L に対して得られた E_s 推定用の式の入力データに対する二乗残差和を Fig.8 に示す。グラフより項数 L が増加するにつれて残差は減少していることがわかる。これは支配的でないパラメータも含んだ複雑な式が導出された結果、入力データ全体に対する精度に関しては $L=1$ の場合よりも向上しているといえる。

同様にして E_s 推定用の式の c-AIC を Fig.9 に示す。情報量規準による判断では項数 L が多くなるほど c-AIC は減少しており、c-AIC が最小となる式が存在しない上に、 $L \geq 2$ では非常に複雑な形の式が得られている。これは先に述べたペナルティ項の修正を行っていないことと、入力データ数が少なかったことが原因であると考えられる。なお、c-AIC の減少の度合に関しては $L \geq 2$ では概ね漸近しており他のモデル選択法(例えば L カーブ法など)と組み合わせることで最適な項数を選ぶことが可能であると考えられる。

7. 結言

本研究では、数法則式発見システムをパラメータ推定の分野に適用し、未知パラメータを直接求められる

逆解析用の数式を導出する枠組を開発した。予めこのような式を導出しておきことで、エンドユーザが行うパラメータ推定作業において労力や効率の面での改善が見込まれる。この手法に適するよう既存の数法則式発見システムに改良を加え、その有用性を確かめるために数値シミュレーションを行い、精度よく近似関数を求められることを確認した。また、実際の応用例として微小圧子押込試験法を利用したヤング率の推定に関して本手法を適用した。

なお、本研究を遂行するにあたり、(株)日本 TI 筑波テクノロジーセンターの雨海正純氏に貴重な御意見を頂いた。ここに謝意を表す。

付録 既存の情報量規準⁽²⁰⁾

既存の情報量規準のなかでよく用いられる AIC は次式を最小とするモデルを最良とみなす基準である。

$$\text{AIC} = 2r - 2l_{max} \quad (15)$$

r , l_{max} はそれぞれパラメータ数および最大対数尤度を表している。分散が一定な正規分布を仮定した場合の最大対数尤度 l_{max} は次式で計算される。

$$l_{max} = -\frac{N}{2} \left[1 + \ln \left\{ \frac{2\pi}{N} \sum_{k=1}^N (y_k - \xi(x_k))^2 \right\} \right] \quad (16)$$

なお、本問題の場合は分散が一定でないので二乗残差和の部分を重み付き二乗残差和へ変更している。

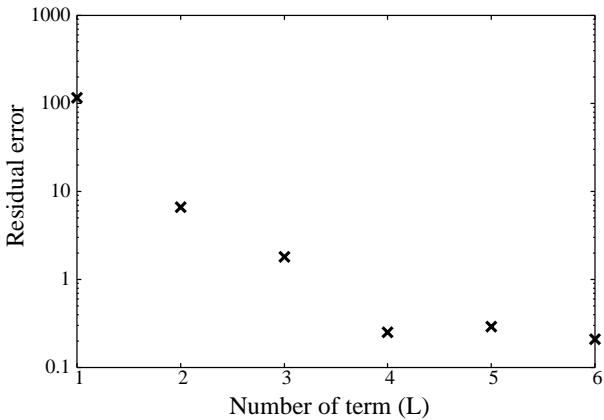


Fig.8 Residual error about E_s

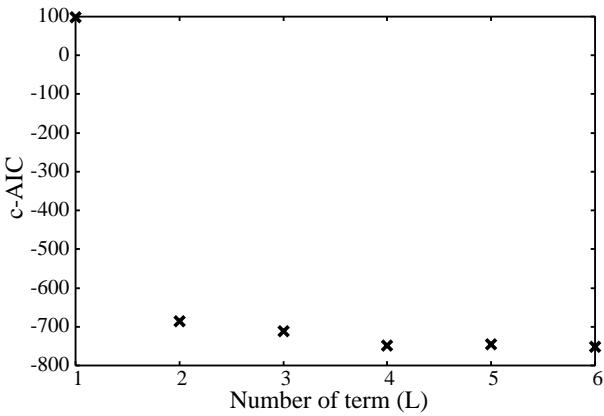


Fig.9 c-AIC about E_s

AIC は導出の過程で漸近理論 ($N \rightarrow \infty$ を仮定) を用いていたり、入力データが少ない場合には次式のような有限修正を行った c-AIC が用いられる。

$$c\text{-AIC} = \frac{2Nr}{N-r-1} - 2l \quad (17)$$

なお、本研究では r は次式から算出した。

$$r = L + 1 + \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^M v_{ij} \quad (18)$$

参考文献

- (1) 小島史男, 上坂充, 電磁現象と逆問題, 養賢堂, (1999).
- (2) F. Yoshida, M. Urabe, V. V. Toropov, "Identification of Mechanical Properties of Component Layers in a Bimetallic Sheet by Mixed Experimental-Numerical approach", *Proc. of Int. Symp. on Inverse Problems in Eng. Mech.* 1998, pp.243-252.
- (3) T. Furukawa, S. Yoshimura, G. Yagawa, "Multi-Objective Parameter Identification of Unified Material Models", *Proc. of Int. Symp. on Inverse Problems in Eng. Mech.* 2000, pp.307-309.
- (4) M. Tanaka, T. Matsumoto, H. Yamamura, "Parameters Identification of an Elastic Plate Subjected to Dynamic Loading by Inverse Analysis using BEM and Kalman Filter", *Proc. of Int. Symp. on Inverse Problems in Eng. Mech.* 2001, pp.169-180.
- (5) 中野良平, 斎藤和巳, “多変量データからの多項式型法則の発見”, bit 別冊 発見科学とデータマイニング, 共立出版, (2000), pp.217-227.
- (6) E. M. Oost, S. H. G. ten Hagen and F. H. Schulze, "Extracting multivariate power functions from complex data sets", *Proc. of the 14th Dutch-Belgian Artificial Intelligence Conf.*, pp.235-242, (2002).
- (7) 斎藤和巳, 中野良平, “コネクショニストアプローチによる数法則の発見”, 情報処理学会論文誌, 37-9 (1996), pp.1708-1716.
- (8) 坂元慶行, 石黒真木夫, 北川源四郎, 情報量統計学, 共立出版, (1983).
- (9) 柴田里程, “情報量基準による統計的モデル選択”, 電子情報通信学会誌 (A), 83-6 (2000), pp.605-611.
- (10) 安居院猛, 長尾智晴, ジェネティックアルゴリズム, 昭晃堂, (1993).
- (11) 矢部博, 八巻直一, 非線形計画法, 朝倉書店, (1999).
- (12) <http://www001.upp.so-net.ne.jp/isaku/rand.html>.
- (13) 廣安知之, 三木光範, 福永隆宏, “遺伝的アルゴリズムにおける実数値ベクトル表現, 世代交代モデル, 母集団分割効果の検討”, 同志社大学理工学研究報告, 44-1 (2003), pp.25-35.
- (14) 北野宏明, “遺伝的アルゴリズム”, 人工知能学会誌, 7-1 (1992), pp.26-37.
- (15) 中上明光, 川上信之, “ナノインデンテーション法による薄膜の機械的特性評価”, 神戸製鋼技報, 52-2, (2002).
- (16) M. F. Doerner, W. D. Nix, "A method for interpreting the data from depth-sensing indentation instruments", *J. Mater. Res.*, 1 (1986), pp.601-609.
- (17) M. Dao, N. Chollacoop, K. J. Van Vliet, T. A. Venkatesh and S. Suresh, "Computational modeling of the forward and reverse problems in instrumented sharp indentation", *Acta. Mater.*, 49 (2001), pp.3899-3918.
- (18) 篠原良和, 岸本喜久雄, 井上裕嗣, “微小圧子押込法による薄膜界面の強度評価”, 東京工業大学平成14年度修士論文.
- (19) C. A. Brookes, in: J. E. Field (Ed.), *Properties of Diamond*, Academic Press, New York (1979).
- (20) 庄野宏, “情報量規準 TIC と c-AIC によるモデル選択の有効性”, 遠洋水研報, 38 (2001), pp.21-28.