

連載

先端工学における逆問題解析手法 (VII)

— 遺伝的アルゴリズムを用いた逆問題解析の一手法 —

石黒章夫、内川嘉樹 (名古屋大学工学部)

1 はじめに

結果から原因を推定するといった逆問題 (inverse problems) は順問題 (direct problems) と異なり推定のために必要なデータの数に比べ、与えられるデータの数が極端に少ないため、解の一意性や安定性に欠け、その処理には困難を伴うことが多い。この種の問題は、不適切問題 (ill-posed problem) と呼ばれ、解析解を求めることは非常に困難であり、また近似解を導出することさえも難しい。

従来、科学や工学で取り扱ってきた問題の殆どは、順問題であり、逆問題の解析手法の研究は端緒についたばかりである。しかし、ある入力に対する応答が観察により与えられていて、その入力を知りたいという状況に我々はよく遭遇する。このような観察をもとに現象を理解する過程とは逆問題にはかならない。したがって、逆問題は科学において我々が遭遇する本質的な、また自然な問題であるといっても過言ではなく、この問題は工学・医学・理学等の複数の領域にまたがる学際的な問題となっている。そのため、逆問題の解析手法の確立は焦眉な課題であり、また近年注目を集めている [1][2]。

逆問題の多くは、上述のように不適切問題となっているのが普通であり、この性質に対処するためニューラルネットワークに代表されるノーベルコンピューティング手法を適用する方法が多数提案されている [13]。ニューラルネットワークは大きくマルチパーセプトロンタイプに代表される階層型とホップフィールドタイプに代表される相互結合型に分類される。しかしながら、階層型のニューラルネットワークを逆問題に適用

した場合、汎化性や学習用のサンプル点をいかに選ぶかという問題がある。また、逆問題のある評価指数の最適化問題と捉え、相互結合型を適用することも可能であるが、ホップフィールドタイプのニューラルネットワークではエネルギー関数が双一次形式でなければならないという拘束条件が存在するため、与えられた逆問題をエネルギー関数の形に常に記述できるとは限らない。そこで、筆者らは与えられた逆問題を離散的組み合わせ最適化問題に置き換え、最適化問題の探索手法として最近注目されている遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithms) [3]-[5] を適用した新しい逆問題解析手法の構築を提案してきた。本稿では、筆者らがこれまで行ってきた遺伝的アルゴリズムの逆問題解析手法 [8]-[11] を、材料内電流分布の逆推定を例に解説する。

2 電磁界系逆問題

Fig.1 に逆問題の具体的な例を示す。図における矩形はある棒形状材料の二次元的断面を示し、材料内の濃い色の部分は電流分布を、材料周辺の矢印は磁界分布を示している (ただし、材料境界面に対して法線方向成分のみを描いてある)。この例において同図 (a) は電流分布から磁界分布を求めるいわゆる順問題である。この場合、材料周辺の磁界分布は、電磁気学の法則等により一意的かつ解析的に求めることができる。次に同図 (b) は磁界分布から電流分布を求める逆問題の例を示している。このとき磁界分布は材料周辺に配置した磁界検出器から得る。

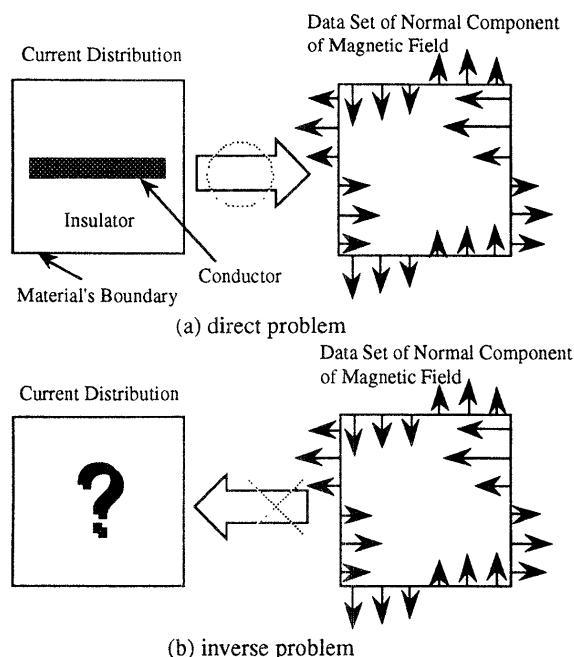


Fig.1: Relationship between a Direct and an Inverse Problems in Electromagnetics.

この問題を解析的に取り扱うためには、全空間における磁界分布が測定される必要があるが、現実の問題においては測定点の数、すなわち配置可能な磁界検出器の個数は有限であり、そのため解析に必要なデータの数不足する。そのためこの問題を解析的に取り扱うことは非常に困難であり事実上不可能であることがわかる。

逆問題の応用例の中でも Fig.1 に示したような電磁界系逆問題は、生体・材料内電流分布推定問題や非破壊検査による材料中の亀裂同定問題等の幅広い応用範囲を持つ [1][2],[6][7]。

3 遺伝的アルゴリズムとは

遺伝的アルゴリズム (以下 GA と略記) は、自然淘汰・交配といった生物の進化過程を模倣した新しい最適化手法であり、集団で大域的極値の探索を行うヒューリスティックな手法である [3]-[5]。具体的には、解の候補を染色体と呼ばれる遺伝子列で記述し (この操作をコーディングと呼ぶ)、複数の染色体間の中から優秀な個体を選択主義 (Selectionism) 的に生成するものである。GA はボルツマンマシンやシミュレーテッドアニーリング等の従来の探索手法に比べ、以下に示

すような特徴を有する：

- 集団で極値探索を行う多点探索アルゴリズムであるため、局所解に陥りにくい。
- 評価基準 (*fitness* と呼ばれる) に、微分可能性、連続性で行った性質が要求されないため、幅広い問題に適用可能である。

等の従来の探索手法にはない利点を持ち、次に示す遺伝的オペレータによって構成される。Fig.2 に GA の基本的な構造を示す。

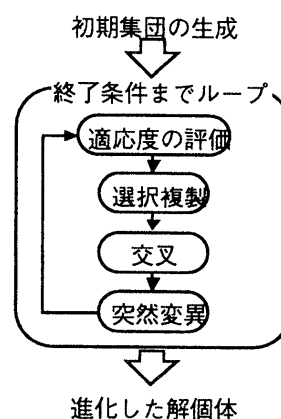


Fig.2: Fundamental structure of GA.

3.1 選択 (selection)

GA では基本的に自然淘汰を次に示す適応度比例戦略によって実現している。これは、各個体が適応度に比例した確率で子孫を残す可能性があるモデルであり [5]、個体の適応度が高いほど次の世代に多くその遺伝情報が充満する。ある個体 i が次の世代の中にどれだけ反映しているかを表す期待値 $pselect_i$ は、次の式で示される：

$$pselect_i = \frac{fitness_i}{\sum_i fitness_i} \quad (1)$$

よってこの値に全個体数を掛けたものが次の世代のその個体の総数の期待値となる。

3.2 交叉 (crossover)

交叉は Fig.3 に示すように、2つの個体を遺伝子列として組み変える操作である。この例では、

第2番目と第3番目の遺伝子座の間に交叉位置があり、この位置で遺伝子列が切断され組み変ることにより新しい個体が形成される。ここで示した例は、交叉位置が1つである単一交叉といわれる方法である。現在、交叉の方法としては、単一交叉、複数交叉、一様交叉が提唱されている。また部分一様交叉、順序交叉、周期交叉なども提案されている [5]。

3.3 突然変異 (mutation)

突然変異は、Fig.4 に示すように個体の遺伝子を適当な確率で変化させる操作である。従来の乱数探索法がここに含まれるため、問題によってはこの操作の工夫が重要である。突然変異は、多様性確保のためあえて遺伝子列を破壊する働き、探索後半においての近傍探索の働き、また初期の遺伝子の組み合わせ以外の空間の探索のための働きがあると考えられる。しかし突然変異率をあまり大きく設定すると単なる乱数探索と化してしまう危険があるため、注意を有する。

上述の GA の枠組みはごく基本的なものであり、様々なヴァージョンが存在することを付記しておく。

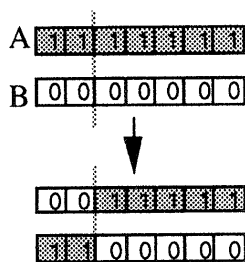


Fig.3:Crossover.

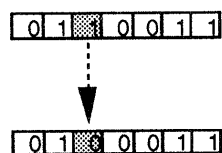


Fig.4:Mutation.

4 電磁界系逆問題の組み合わせ最適化問題への置き換え

本研究では、電磁界系逆問題の例として、Fig.5 に示すような二次元材質中に存在する静的かつ不均一な電流分布を材質外部において観測した磁界のデータのみから推定する問題を取り上げる。ここで利用できる磁界のデータは、同図に示すように、各材質周囲面に対して平行な観測面上に設置された k 個の観測点における各面に対して垂直方向成分のみであるとする。ここで同図において、材質断面内の色の濃さは分布電流密度の大きさに対応している。この問題を離散的組み合わせ最適化問題に置き換えるため、以下に示す準備を行う。

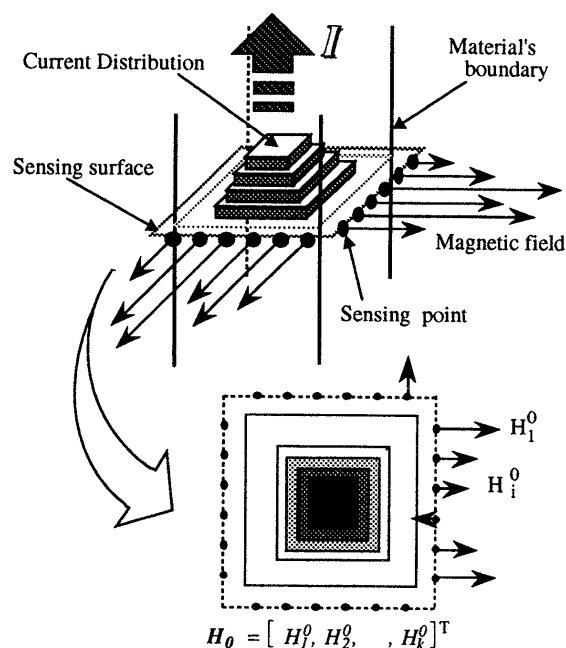


Fig.5:A Practical of Static Two-Dimensional Current Distribution

4.1 離散化

Fig.6 に示すように、材質断面を格子状に分割し、電流が分布している領域内の各微小領域（以下、セグメントと呼ぶ）に不均一電流が存在するものとする。ここでセグメントの電流分布の密度を量子化し、その整数値を各セグメントにおける電流の存在状態とする。

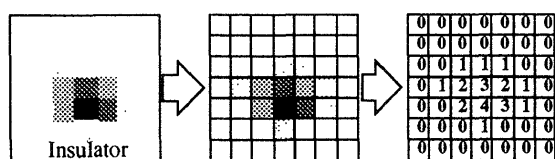


Fig.6:Discretization.

4.2 評価基準の選定

逆問題の解析の際に本質的な問題となるのが、無限の解候補の中からいかに最適な解を選び出すかという評価基準の選び方である。本研究では、2つのベクトル間の距離を評価基準として用いる。いま、観測点において測定された磁界のデータを成分とする $k \times 1$ ベクトル H_0 を観測ベクトルと呼ぶ：

$$H_0 = [H_1^0, H_2^0, \dots, H_k^0]^T \quad (2)$$

次に、導体中のセグメントに単位電流をランダムに分布させた解候補を用意し、分布させた電流によって各観測点に生成する磁界ベクトルを成分とする $k \times 1$ ベクトル H_A をビオ・サバルの法則を用いて求める：

$$H_A = [H_1^A, H_2^A, \dots, H_k^A]^T \quad (3)$$

このベクトルを仮定ベクトルと呼ぶ。Fig.7に解候補の一例を示す。次に解候補における評価基準を定める必要があるが、本研究では次式で表される観測ベクトル H_0 と仮定ベクトル H_A の2つのベクトル間のユークリッド距離を2乗した値を用いる：

$$\text{評価基準} = - \frac{1}{\|H_0\|^2} \|H_0 - H_A\|^2 \quad (4)$$

以上から、本研究における電磁界系逆問題は評価基準の値を最大にする量子化した電流値のセグメントへの配置問題、すなわちある限定された整数の組み合わせ最適化問題に変換することができる。しかし、セグメントの数を n 、電流密度の量子化数を m とすると全組み合わせは $m n$ 通り存在するため、 n の増加に伴い組み合わせ的爆発が発生する。この種の問題は、数学的には NP (Nondeterministic Polynomial) 困難問題と呼

ばれ、 n の増加に伴い決定論的なアルゴリズムにより探索するのは事実上不可能となる。そこで本研究では、この組み合わせ最適化問題の探索手法として GA を導入することにより、この問題の解析を目指す。

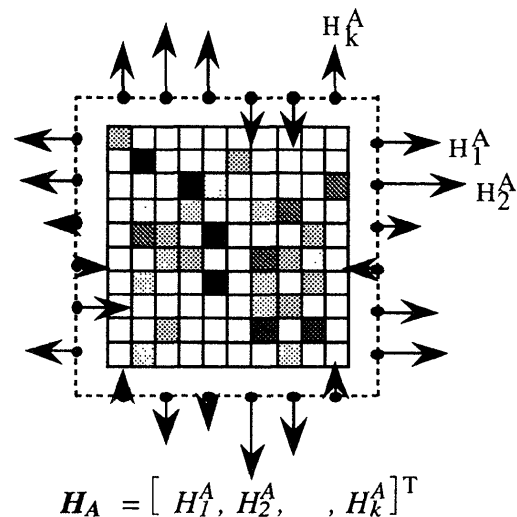


Fig.7:An Example of Randomly Generated Candidate of Solutions.

5 遺伝的アルゴリズムの導入

5.1 コーディング

GA を問題に適用するためには、解候補を遺伝子へコーディングする必要がある。均一電流分布の逆推定問題において、筆者らはこれまで2種類の異なったコーディング手法を提案してきた[8]-[10]。1つは、領域内において電流の存在するかないかをすべて染色体上にコーディングする手法 (simple coding method と呼ぶ) であり[8][9]、他方は電流の存在する部分の情報のみをコーディングする手法 (devised coding method と呼ぶ) である[10]。ここで、不均一電流分布の逆推定問題において、どちらのコーディング手法が適しているかを考えてみる。

岸本らは、不均一な磁束源電流分布を GA により逆推定する手法を提案しているが[12]、この手法は均一電流分布の逆推定で筆者らが提案した手法[8][9]を単純に拡張したものとなっている。しかしながら、この手法は電流の存在する部分ばか

りでなく、電流が存在していない部分をも染色体上に指定する必要があるため、離散点の増大に伴い、膨大なメモリ空間を必要とするという問題がある。また2次元平面内の電流分布を1次元の染色体に展開するため電流分布領域は染色体上に分散して表現されてしまう。このため、解探索の過程において交差により良好なビルディングブロックが破壊されやすく得られる解には、電流分布が散在したものが現れやすいという致命的な問題を有している。一般に、導体材料を構成する結晶粒は、物理的にある程度の連続性を有するため、材料内の電流分布はばらばらに存在するとは考えにくく、ある程度まとまった大きさの電流分布が存在すると考えられる。従って、良好な推定解を得るためには、この物理的拘束条件解に反映させる必要がある。このための手法として、注目している離散点とその近傍の離散点間に何らかの拘束条件を設けて評価関数に組み込んだり、出てきた解の電流分布の分散等を算出してペナルティーをかけるなどの手法が考えられる。しかしながら、評価関数において、これらの拘束条件を解に反映させるための新たなパラメータの調整等が発生するため、いたずらにアルゴリズムを複雑化する恐れがある。

そこで筆者らは、文献 [10] において提案したコーディング手法 (devised coding method) を拡張して用いることにした。この手法は、電流分布領域の大きさと位置といった2つの属性を染色体中の遺伝子座に持たせるコーディング手法である。

本研究においては、対象とする問題が均一電流分布逆推定問題から不均一電流分布逆推定問題に拡張されたことにより、上記の遺伝子の2つの属性にさらに分布電流密度の大きさを示す属性を付け加えた、本手法により、上記の物理的拘束条件を、評価関数ではなく、コーディング手法の段階において陰に染色体に埋め込むことが可能となると筆者らは考える。

本研究で提案するコーディング手法を Fig.8 に模式的に示す。ここで、Pos-X, Pos-Y は材料の2次元断面上における電流分布の存在位置を

示している。次に、電流分布の大きさであるが、今回は簡単のため1つの電流分布を長方形で表現し、そのx方向の長さ (Rect-x) とy方向の長さ (Rect-y) を値として持たせた、また電流分布の大きさは、量子化された電流値 (Ival) として持たせた、さらに、解探索中の各個体及び段階によって電流分布の個数が異なるため、染色体の長さを可変とした。

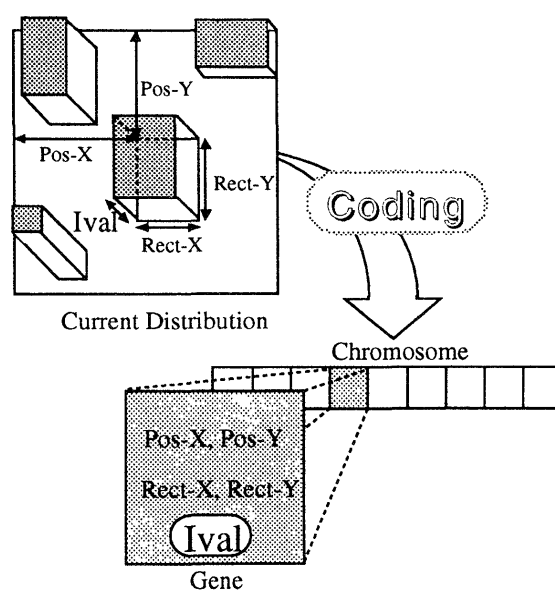


Fig.8: Proposed Coding Method.

5.2 デコーディング

次に各個体の評価を行う際に、個体の遺伝子型 (genotype) を表現型 (phenotype) に変換するデコーディングと呼ばれる操作が必要である。この場合、Fig.9 に示すように遺伝子列を左から読み込み、遺伝子の情報 (電流分布の内容) を材質断面に写像する。

ここで、推定した分布領域の属性によっては、Fig.10 に示すように写像した電流分布領域が重なることが予想される。従来手法においては均一電流分布のみを対象としていたため、重なった領域の電流値に関しては考慮する必要がなかったが、本研究においては詳細に検討する必要がある。

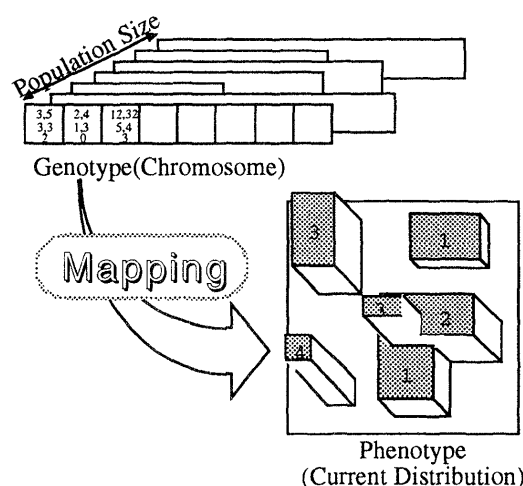


Fig.9: Decoding Method from Genotype to Phenotype.

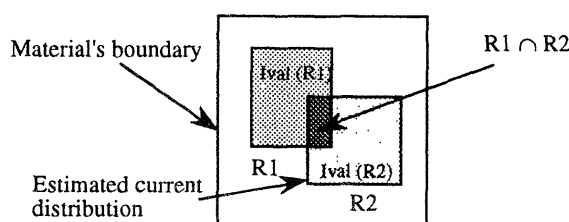


Fig.10: An Overlapping Region of Estimated Current Distributions.

同図に示すように、2つの領域 $R1$, $R2$ が重なる場合を例に考察する。いま、領域 $R1$ の電流値を $Ival(R1)$ 、領域 $R2$ の電流値を $Ival(R2)$ とする。ここで、重なり部分 ($R1 \cap R2$) の電流値 $Ival(R1 \cap R2)$ として、以下の手法が考えられる：

- (1) $Ival(R1 \cap R2) = \min\{Ival(R1), Ival(R2)\}$ (最小)
- (2) $Ival(R1 \cap R2) = \max\{Ival(R1), Ival(R2)\}$ (最大)
- (3) $Ival(R1 \cap R2) = \text{avg}\{Ival(R1), Ival(R2)\}$ (平均)
- (4) $Ival(R1 \cap R2) = Ival(R1) + Ival(R2)$ (重ね合せ)

各手法はそれぞれ、重なった電流分布密度の中で、(1) 最も小さい電流分布密度をとる、(2) 最も大きい電流分布密度をとる、(3) 分布密度の平均値をとる、(4) 分布密度の単純和をとる、といった手法となっている。これらの比較検討は後述するが、数値解析の結果、最終的に (4) の重ね合わせの手法が最も優れた解を推定した。

5.3 アルゴリズム

次に本研究で用いたアルゴリズムを示す。まず、10 から 20 までの乱数により染色体の長さを

設定した個体を 50 個体用意し、これを初期解候補集団とした。次に、各世代ごとに 3 組の染色体をランダムに抽出し交差オペレータを施した後、(4) 式から導出される評価値を比較することにより、preselection[3] を行う。preselection とは、交差によって作られる子の 2 個体と親の 2 個体の合わせて 4 個体の中で予め淘汰する手法である。この手法により、集団の進化過程における初期収束 (premature convergence[3]) を防ぐことができる。また、これとは別に各世代ごとにランダムに 3 個体を抽出し、以下に示す突然変異を施すことにより、集団の多様性の維持を図った：

- 乱数的に抽出した個体中のある遺伝子の電流分布の大きさを変化させる。
- 乱数的に抽出した個体中のある遺伝子の電流分布の位置を変化させる。
- 乱数的に抽出した個体中のある遺伝子の電流分布の電流値を変化させる。

初期解候補集団に遺伝的オペレータを適用させることにより、(4) 式で表される評価基準を最大にするような解候補に進化させるのが本手法の原理である。本アルゴリズムを用いた電流分布の逆推定の結果を次節で示す。

6 シミュレーション結果及び推定解の定量的評価

6.1 シミュレーション結果

Fig.11 に本手法による電流分領域が二つ存在する場合の逆推定問題のシミュレーション結果を示す。

電流分布領域の重なり領域に持たせる値に関する比較検討のシミュレーション結果を示す。同図 (a) は真の電流分布を表している。ここで、山の高さは分布電流値の大きさに対応しており、0 から 4 までの 5 段階の整数値をとるものとした。同図 (b), (c), (d), (e) はそれぞれ 5.2 節で述べた (1)~(4) の手法に対応している。これらの結果からコーディング手法と同様に、デコーディ

ングの手法により、解の質が左右されることが見てとれる。特に (e) のデコーディング手法が真値と若干異なるが、比較的良好な推定解を導出していることがわかる。本逆問題は、電流密度および微小領域の離散化数から考えて、5400もの探索点を有している。この膨大な解候補の中からただか40個のセンサから得られる情報を基に推定解を探索しなければならないことを考えると、本手法により充分妥当な大域的推定解を導出できることがわかる。なお、本シミュレーションに用いたパラメータの値を Table 1 に示す。

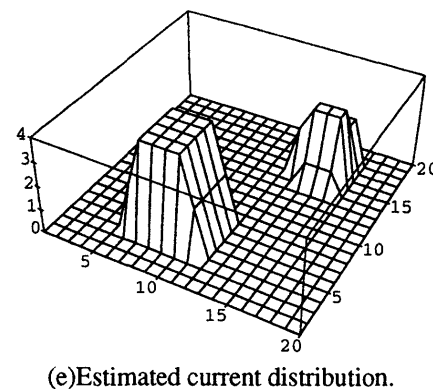
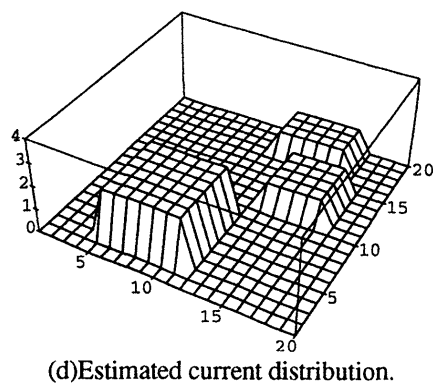
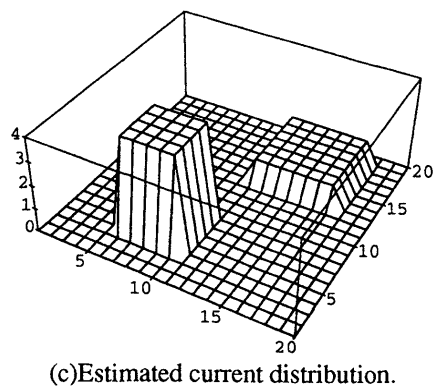
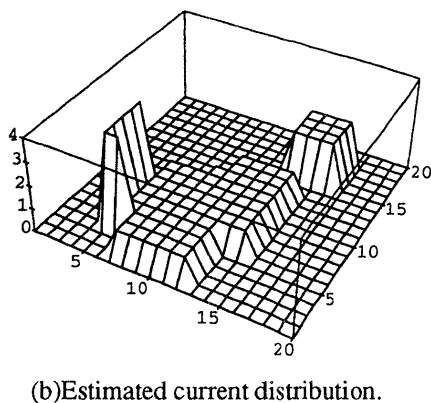
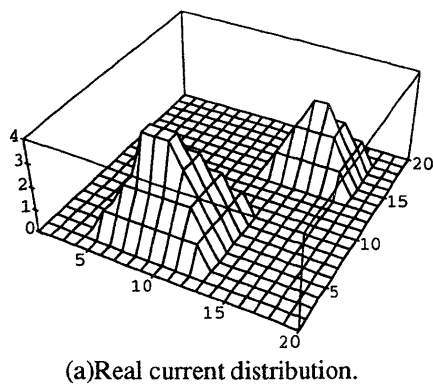


Fig.11:Simulation Results in the case of two current distribution.

Table 1:Parameters of the simulation.

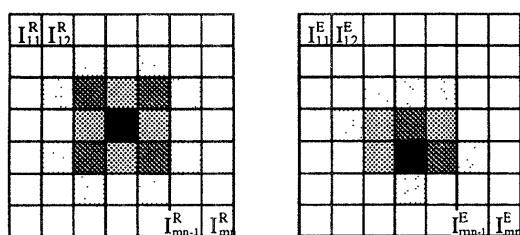
Conductor	40wide × 40long
Sensing Surface	42wide × 42long
Sensing Points	40(Total)
Segments	400(20×20)
Population	50

6.2 推定解の定量的評価

5.2 節の (1)～(4) の手法について、妥当性の定量的検証を行う。ここで、それぞれの手法で得られたシミュレーション結果はそれぞれ適応度に対して収束しているため、単純に適応度を基に比較しても正確な評価を行ったことにならない。そこで、次式で定義する評価関数を用意して、シミュレーション結果の定量的評価を行う：

$$\text{一致度} = \sum_{i,j} \|I_{ij}^R - I_{ij}^E\| \quad (5)$$

ここで用意した評価関数は、Fig.12 に示すような各セグメントにおける分布電流値の差をとり、その絶対値の総和をとったものとなっている。この関数は、2つの電流分布を比べた場合、その相関性（ここでは一致度と呼ぶ）が高いほど 0 に近くなる。すなわち、電流分布真値と電流分布推定値の一致度をとった場合、その一致度が低いほどより優れた解であると考えられる。



Real Current Distribution Estimated Current Distribution
Fig.12: Suitability function.

Table 2: Average of the simulation results.

	分布領域が1つの場合の一致度の平均	分布領域が2つの場合の一致度の平均
最小	100.85	146.2
最大	97.57	124.5
平均	97.14	125.4
重ね合わせ	60.73	118.4

次に上記で定義した一致度を用いて 5.2 節の (1) から (4) の各手法のシミュレーション結果を電流分布領域が一つの場合と二つの場合に関して定量的に評価した。Table 2 にその結果を示す。

表中の各数値はそれぞれの手法に対して 10 回のシミュレーションを行い、各結果に対して一致度を求め、その平均値を算出することにより求めた。表から電流分布領域の個数にかかわらず、(4) の重ね合わせの手法を用いたデコーディング手法が最も良好な推定解を導出していることが見てとれる。従って、本論文では重ね合わせを用いたデコーディング手法を用いることを提案する。

さらに、コーディング手法が推定解の質に及ぼす影響を見るため、simple coding method と本論文において提案する devised coding method との比較を行った。シミュレーションは Fig.11(a) に示す電流分布を真値とする 2 電流分布の逆推定を例にとり、simple coding method を用いて推定解を導出した。Fig.13 にシミュレーション結果を示す。Fig.11(e) に示す devised coding method を用いた手法に比べ、simple coding method を用いた場合、良好なビルディングブロックを生成することが難しいため、電流分布はらばらに存在してしまうのが見てとれる。さらに提案するコーディング手法の妥当性を検証するため、前述の一致度を用いて、Fig.11(a) を真値とする場合の simple coding method と devised coding method を用いた場合に導出される逆推定解の評価を行った。その結果を Table 3 に示す。表中の数値はそれぞれ 10 回の試行平均値である。表から、適応度に関しては、simple coding method の方が devised coding method に比べ若干良い数値を示しているが、一致度に関しては後者の方が前者に比べて非常に良好な結果を出していることがわかる。このように、良好な推定解を得るためには、適応度関数の定義もさることながら、問題の性質を反映したコーディング・デコーディング手法を考えなければならないことがわかる。

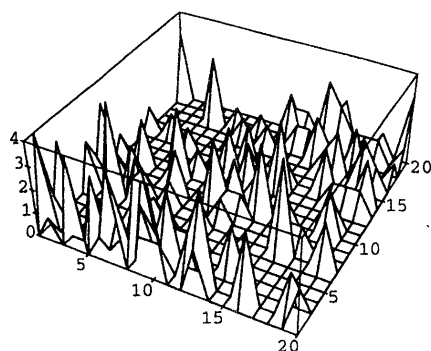


Fig.13: Estimated current distributions using simple coding method.

Table 3: Comparison between 2 coding methods.

	適応度	一致度
simple coding method	-0.003	287
devised coding method	-0.005	91

7 まとめ及び今後の課題

本稿では、筆者らがこれまで行ってきた遺伝的アルゴリズムを用いた電磁界系逆問題の新しい解析手法を解説した。遺伝的アルゴリズムは、解探索手法の新しい救世主となる可能性を秘めている反面、問題をいかにコーディングするかといった問題にはいまだ統一的な指針は存在しない。本稿にて解説した筆者らの手法は、まだアドホックな段階であり、より逆問題解析に適したコーディング手法ならびに他の複数の探索手法との融合に関する考察を行っていく予定である。

参考文献

- [1] 日本機械学会編, "逆問題とコンピュータアナリシス", コロナ社 (1991)
- [2] 武者 他, "逆問題とその解き方", オーム社 (1992)
- [3] D.E.Goldberg, "Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning", Addison - Wesley (1989)
- [4] 宮沢, "遺伝的アルゴリズムと最適化問題", ASCII, Vol.15, No.6,7 (1991)
- [5] 北野, "遺伝的アルゴリズム", 人工知能学会誌, Vol.7, No.1, pp.26-37 (1992)
- [6] Y.Saito, et al., "A Formulation of the Inverse Problems in Magnetostatic Fields and Its Application to a Source Position Searching of Human Eye Fields", Journal of Applied Physics, Vol.67, No.9, pp.5830 - 5832 (1990)
- [7] 板垣 他, "電磁界系逆問題への Cauchy - Schwartz の不等式の応用", 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-90-15, RM-90-27 (1990)
- [8] A.Ishiguro, et al., "A Study of Genetic Algorithms' Application to Inverse Problems in Electromagnetics.", Elsevier Studies in Applied Electromagnetics in Materials 3, pp.57-60, Elsevier (1992)
- [9] 田中 他, "遺伝的アルゴリズムを用いた電磁界系逆問題の解析法", SICE'92 学術講演予稿集, pp.287-288
- [10] 田中 他, "可変長染色体を用いた遺伝的アルゴリズムによる電磁界系逆問題の解析", 第2回 MAGDA-コンファレンス講演論文集, pp.33-36 (1993)
- [11] 田中 他, "遺伝的アルゴリズムを用いた電磁界系逆問題の解析", 電気学会論文誌, Vol.114-D, No.6, pp.689-696 (1994)
- [12] 岸本 他, "遺伝的アルゴリズムによる磁束源電流分布の逆推定", マグネティックス研究会資料, MAG-92-235 (1992)
- [13] 矢川, "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)