

Burgers solid model の実験的解析：非線形逆問題のアルゴリズム的解法と人力解法の比較 及び model の係数決定と温度依存性についての考察

05-242528 三田村彰大

December 15, 2025

Contents

1	解析の概要	2
2	非線形逆問題	2
3	Levenberg-Marquardt 法	3
4	実際の実験のモデルに伴う事前情報	4
5	データの重みづけ	8
6	目的関数・ヤコビアン	9

1 解析の概要

今、試料に応力 σ_0 を時刻 $t = 0 \sim t_1$ まで加えることを考える。この時、Burgers solid model を仮定すると creep function は

$$\epsilon(t) = \begin{cases} \left(\frac{\sigma_0}{R_1}\right) + \left(\frac{\sigma_0}{R_2}\right) \left\{1 - \exp\left(-\frac{R_2}{\eta_2}t\right)\right\} + \left(\frac{\sigma_0}{\eta_1}\right)t & (t < t_1) & (1a) \\ \left(\frac{\sigma_0}{R_2}\right) \left\{\exp\left(\frac{R_2}{\eta_2}t_1\right) - 1\right\} \exp\left(-\frac{R_2}{\eta_2}t\right) + \left(\frac{\sigma_0}{\eta_1}\right)t_1 & (t > t_1) & (1b) \end{cases}$$

のようになる。^{*1}

今、 σ_0, t_1 を設定した上で実験を行うことで、観測データ $\hat{\epsilon}(t)$ を得たとする。この時、(1a)(1b) 式を逆に解くことで R_1, R_2, η_1, η_2 を推定することが今回の解析の目的である。(1a)(1b) 式は今回の場合非線形であるから、これは「非線形逆問題」の一種である。

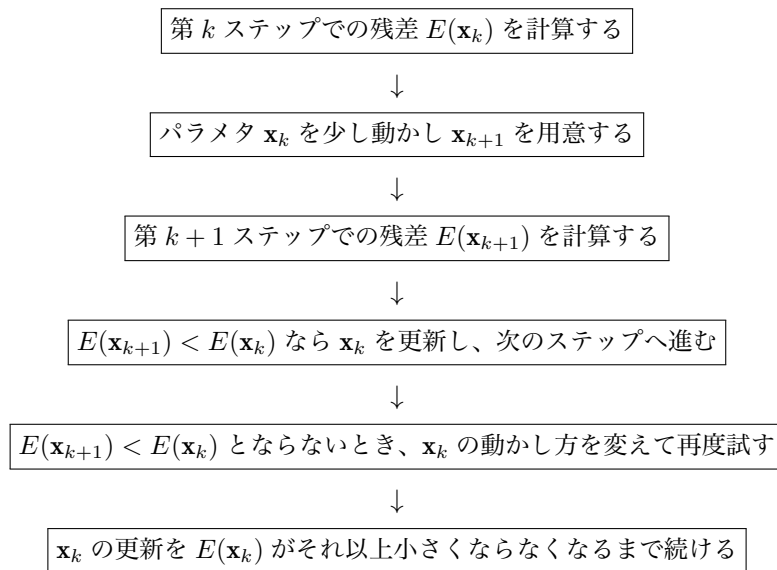
2 非線形逆問題

非線形逆問題は解析的に解くことが難しい。そこで今回は、最小二乗フィッティングを用いてコンピュータパワーで R_1, R_2, η_1, η_2 を推定することにする。すなわち、 R_1, R_2, η_1, η_2 を様々な値に取りながら creep function $\epsilon(t)$ を動かし、観測データとの差 $\hat{\epsilon} - \epsilon$ が最小となる R_1, R_2, η_1, η_2 を求めるということをする。

ただし実際には、観測データは離散的な時刻 t_i に対して得られているので、最小二乗フィッティングは以下の残差を最小にするパラメタを求める問題となる。

$$(\text{残差}): E(R_1, R_2, \eta_1, \eta_2) = \sum_i \{\hat{\epsilon}(t_i) - \epsilon(t_i)\}^2 \quad (2)$$

ここでは、この最小二乗フィッティングのざっくりとしたアルゴリズムを述べる。まず、推定したいパラメタを $\mathbf{x} = (R_1, R_2, \eta_1, \eta_2)^T$ と書くことにする。そして、第 k ステップでの推定値を \mathbf{x}_k とする。この時、以下のようなアルゴリズムを用いれば、残差を最小にするパラメタを得ることができる。



^{*1} $t = t_1$ において瞬間的に $\Delta\epsilon = \sigma_0/R_1$ が回復する（力を取っ払うことによって瞬間的に伸びる）ことに注意する。

3 Levenberg-Marquardt 法

より具体的なアルゴリズムとしては、Levenberg-Marquardt (レーベンバーグ・マーカート) 法を用いることにする*2。以下ではその概要を示す。

まず問題設定が以下のように書き表せるとする。

$$\text{find } \mathbf{x} \text{ that minimizes } f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|^2 \quad (3)$$

例えば今回の場合なら

$$r_i(\mathbf{x}) = \sqrt{2} \{\hat{\epsilon}(t_i) - \epsilon(t_i)\} \quad (4)$$

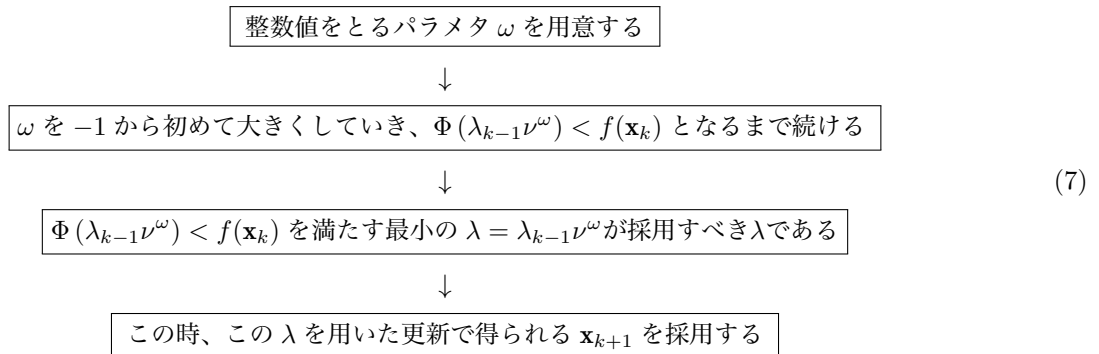
である。*3 この時、Levenberg-Marquardt 法においては \mathbf{x}_k の更新を次のように行う。

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (J_k^T J_k + \lambda_k I)^{-1} J_k^T \mathbf{r}(\mathbf{x}_k) \quad (5)$$

ただし J はヤコビ行列 $J = d\mathbf{r}/d\mathbf{x}$ であり、 $J_{pj} = \partial r_p / \partial x_j$ で各ステップ k に対して計算される。*4 また、 λ_k は \mathbf{x}_k の更新を行う前に計算しておく必要がある。そのためにまず、 λ を任意に取って \mathbf{x}_k を更新した場合に得られる $f(\mathbf{x}_{k+1})$ の値を $\Phi(\lambda)$ とおく。

$$\Phi(\lambda) = f\left(\mathbf{x}_k - (J_k^T J_k + \lambda I)^{-1} J_k^T \mathbf{r}(\mathbf{x}_k)\right) \quad (6)$$

この Φ と、適当な変数 $\nu > 1$ を用いて λ は次のように計算される。



*5 *6 *7 よってこれらを組み合わせることで、 k 回目のステップにおけるパラメタ \mathbf{x}_k の更新を行うことができる。

*2 ざっくりいうと、最急降下法と gauss-newton 法のいいとこどりをしたアルゴリズムである。最急降下法では E を最小にする方向へほとんどパラメタを動かしていくことで E を最小にするパラメタをガングン求めに行くことができるが、極小近傍でパラメタを「びったり」求めに行くのには向いていない。そこで、極小付近では二次近似して極小を求める gauss-newton 法によってパラメタを精度よく推定していくことをする。

*3 (2) と (3) を見比べれば良い。

*4 なぜこのような計算方法になるかは、[?] が詳しい。

*5 $\lambda_0 > 0$ としなければいけないことに注意。

*6 大まかなアイデアだけ述べると、(5) においては λ_k の大小によって最急降下法よりのパラメタ更新を行うか gauss-newton 法寄りのパラメタ更新を行うかを決めていて、 λ の更新をうまく行うことで、いい感じに両者のバランスを取ろう、ということをする。

*7 $\omega < 0$ の時は gauss-newton 寄りに、 $\omega > 0$ の時は最急降下寄りに method を調整する。よって $\omega = -1$ から初めているということは、「とりあえず gauss newton 法を試してみる。それで目的関数の減少が悪くならないのであれば、そのまま gauss-newton を採用する。しかし、もし gauss-newton がダメなら、少しずつ最急降下の成分を足していくことにする」といった気持ちがある。また、gauss-newton 側から入

次に、 \mathbf{x}_k に関する更新をどの時点で辞めるかについても述べておく。この場合、更新を辞める条件としては以下の二つが考えられる。

- $f_{k+1} - f_k$ が一定以上小さくなる。 (8)

- \mathbf{x} をどのように更新しても \mathbf{r}_k (すなわち f_k) が変化しなくなる (9)

また、これらに加えて、いくつかのエラー処理を用意しておく必要がある。

- k があらかじめ設定した更新回数上限 k_{\max} に達した (10)

- λ_k をどのように決定しても \mathbf{x}_k の更新によって f_k を小さくすることができない (11)

- 数値異常性 ($f, x, \lambda = \text{NaN, Inf}$) が生じている (12)

- (13)

これらを数式化すると以下ようになる。

$$\frac{|f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)|}{\max\{1, f(\mathbf{x}_k)\}} \leq f_{\text{tol}} \quad (14)$$

$$\max_j \frac{|J_{:,j}^T \mathbf{r}|}{\|J_{:,j}\| \|\mathbf{r}\|} \leq g_{\text{tol}} \quad (15)$$

$$k \geq k_{\max} \quad (16)$$

$$\omega \geq \omega_{\max} \quad (17)$$

$$f, x, \lambda = \text{NaN, Inf} \quad (18)$$

ただし、 $J_{:,j}$ は J の第 j 列を表す。また、 $f_{\text{tol}}, g_{\text{tol}}, \dots$ はこちらであらかじめ設定する必要がある。^{*8 *9 *10}

4 実際の実験のモデルに伴う事前情報

まず、今回の実験においては歪みのゼロキャリブレーション (0 点) も未知パラメータとなっていることに注意する必要がある。^{*11} 今、試料の長さを l [mm]、力を受けていない状態での長さを l_0 [mm] とするとき、歪みは $\epsilon = -\ln(l/l_0)$ と計算される。しかし、実際に測定で観測されるのは試験器がどれだけ試料を押しつぶす方向に動いたかを表すストローク \hat{s} [mm] である。よって、歪みが 0 となる地点でのストロークを s_0 [mm] とした時、観測される歪みは以下の式で計算される。

$$\hat{\epsilon} = -\ln \frac{l_0 - (\hat{s} - s_0)}{l_0} \quad (19)$$

l_0 については試料の測定で得ることができる量であるが、 s_0 は未知のパラメータであり、最小二乗推定の対象となることに注意する必要がある。

の推定を始めるということは、できるだけ最終的には gauss-newton 法に辿り着きたいという気持ちもあると思われる。

^{*8} tol は tolerance の略。

^{*9} 条件 (14) で $\max\{1, f(\mathbf{x}_k)\}$ とおいているが、相対誤差 $|f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)|/f(\mathbf{x}_k)$ と絶対誤差 $|f(\mathbf{x}_{k+1}) - f(\mathbf{x}_k)|$ いずれかが十分小さくなった時にクリアという条件を課していることになる。これは、S/N 比の問題で、 f 一定程度小さくなると相対誤差による評価が難しくなることによる。

^{*10} 条件 (9) は適当なパラメータ x_j (\mathbf{x} の第 j 元、 j 番目のパラメータ) を変化させた時の \mathbf{r} の変化の方向が \mathbf{r} の向きを向いていない時に達成されるので、 $\partial \mathbf{r} / x_j = J_{:,j}$ と \mathbf{r} の余弦が小さくなるという条件を考えればよい。よって条件 (15) が導かれる。

^{*11} 試料の表面が完全な平面ではない、試験器がどの時点で試料に触れ始めたのかわからない、などの問題があるためである。また、先生から「試験力に達した瞬間の歪み」を 0 とするとよいとのアドバイスを頂いた (Figure1 というグラフの ϵ 切片 = 0.008 近傍の変曲点の高さを 0 とする) が、今回のような $\epsilon(t) > 0$ の関数でフィッティングを行う場合はこの推定は好ましくない。

さて、今回の実験におけるパラメタ R_1, R_2, η_1, η_2 のうち、 η_1 に関してはアルゴリズムを用いずにある程度まで値を推定することができる。実際、 $t < t_1$ での creep function (1a) の $t \rightarrow \infty$ での極限を取ると

$$\epsilon(t) \approx \left(\frac{\sigma_0}{R_1}\right) + \left(\frac{\sigma_0}{R_2}\right) + \left(\frac{\sigma_0}{\eta_1}\right)t \quad (20)$$

のようになっており、試料に応力 σ_0 をかけて十分時間が経った時の ϵ の傾きから σ_0/η_1 を、ひいては η_1 を推定することができる。実際、今回の実験で得られたデータ (Figure1参照) を見ると観測結果は (20) 式とよく整合していることがわかる。 $(t < t_1$ の十分時間が経った箇所においては歪みは非常に直線的な振る舞いをしている) *12

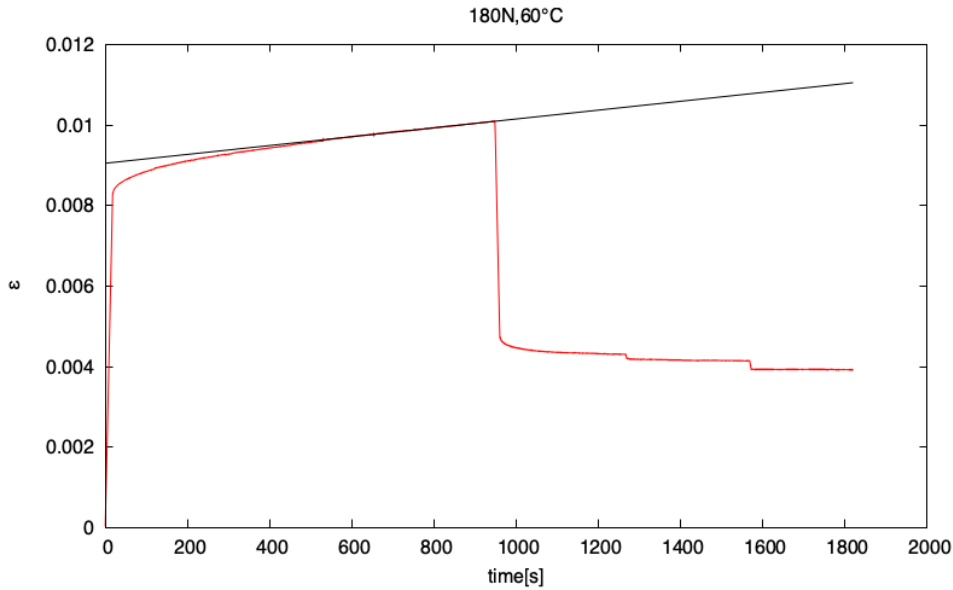


Figure1: 試験力 180N, 温度 60°C における歪みの観測データ。 $t_1 \approx 950$ s。 $t < t_1$ の十分時間が経った箇所においては歪みは非常に直線的な振る舞いをしていることがわかる。

しかし、Figure1はあくまで $s_0 = 0$ と仮定した場合の実験結果である。すなわち、Figure1のように直線フィッティングによって傾きを求め η_1 を算出したとしても、それはあくまで $s_0 = 0$ の時の場合であり、正確な値ではない。しかし、このようにして得られた η_1 を用いて η_1 の正確な値をおおよそ類推することができる。また、 η_2 についても、 $\eta_2 \sim \eta_1$ という非常にぎつくりとしたオーダーの類推を行うことができる。同様に、 R_1, R_2 の初期値はあらかじめ測定したヤング率からオーダーを類推することができる。

また、 s_0 自体も応力 σ_0 が加わる前のストロークから類推することができ、実際の実験でデータを見ると $s_0 \approx 0$ [mm] となることがわかる。*13 さらに、(1b) を見ると ϵ の値は $t > t_1$ で $\epsilon > 0$ を満たしており、よって (19) 式より $\hat{s} - s_0 > 0$ が従う。すなわち、 $t > t_1$ においては $s_0 < \hat{s}$ となっているはずであり、よって観測される \hat{s} によって s_0 に上限を与えることができる。実際に観測データを見てやると、おおよそ $s_0 \lesssim 0.05$ [mm] となっていることがわかる。

よって、これらの類推を「事前情報*14」とみなし、最小二乗推定に反映させる必要がある。そのために準備として、

*12 η_1 以外のパラメタを同様に傾きや切片などのやや定性寄りな情報を用いて推定することはできなくはないが、実際にやってみたところ推定値の精度はあまり良くなかった。

*13 一応、力が加わっていない状態 (実際には試験力 10N) でゼロキャリブレーションを行っているためである。それでもやはり、試料の形などの問題から、 $s_0 = 0$ であるとは必ずしも言えない。

*14 prior information と呼ばれる。詳しくはデータ解析の教科書を参照。

$R_1, R_2, \eta_1, \eta_2, s_0$ のそれぞれの類推値を $R_1^0, R_2^0, \eta_1^0, \eta_2^0, s_0^0$ で書き表すことにする。今、これまでの議論から

$$\begin{cases} R_1^0, R_2^0 = \text{ヤング率} \\ \eta_1^0, \eta_2^0 = \text{測定データの傾きを用いて求まる} \eta_1 \\ s_0^0 = 0 \text{ [mm]} \end{cases} \quad (21)$$

である。

さて、ひとまず $x_j = R_1, R_2, \eta_1, \eta_2$ については、オーダーがおおよそ x_j^0 に一致するという事前情報を仮定できる。これは、 $\ln x_j$ が $\ln x_j^0$ を中心とするような正規分布に従うと言い換えることができ、式で表すと以下のようなになる。

$$\ln x_j \sim \mathcal{N}(\ln x_j^0, (\sigma_{x_j})^2) \quad (22)$$

(log をとったのは、あくまでオーダーの評価であるということの意味している。) 特に、 x_j のオーダーが $10^{\pm 1}$ に収まると考えると、 $\ln x_j$ は $\ln x_j^0 \pm \ln 10$ の範囲に収まると考えられるから、この範囲をおおよそ 2σ 区間と考えれば $\sigma_{x_j} = \sigma_x = \ln 10/2$ のようにして正規分布の分散を推定することができる。(この時、 R_1, R_2, η_1, η_2 で分散は共通となる。) *15

次に $s_0 \approx s_0^0$ という事前情報についてだが、これはオーダーの推定ではなく具体的な数値の推定である。よって s_0 が s_0^0 を中心とするような正規分布に従う、と事前情報を定式化することができる。

$$s_0 \sim \mathcal{N}(s_0^0, (\sigma_{s_0})^2) \quad (23)$$

この時、先に述べたように s_0 の上限を $0.05[\text{mm}]$ と類推できるので、これが 2σ となるように分散を定めることで $\sigma_{s_0} = 0.05/2$ と推定できる。

以上の事前情報に加え、観測データの従う正規分布を

$$\hat{\epsilon} \sim \mathcal{N}(\epsilon, \sigma_\epsilon) \quad (24)$$

と書く。ただし ϵ はベクトルであり、 $\epsilon_i = \epsilon(t_i) = \epsilon_i$ と対応する。

さて、ここで一旦、最小二乗法による推定ではなく、ベイズ統計的な推定方法を考えることにする。すなわち、観測データ $\hat{\epsilon}$ が得られている時、パラメタの真値が \mathbf{x}, s_0 である条件付き確率 $p(\mathbf{x}, s_0 | \hat{\epsilon})$ が最大となるようなパラメタ \mathbf{x}, s_0 を求めるという推定方法をとるのである。

そこでまず、 $p(\mathbf{x}, s_0 | \hat{\epsilon})$ はベイズの定理より以下のように変形する。

$$p(\mathbf{x}, s_0 | \hat{\epsilon}) = \frac{p(\hat{\epsilon} | \mathbf{x}, s_0)p(\mathbf{x}, s_0)}{p(\hat{\epsilon})} \quad (25)$$

特に $p(\hat{\epsilon})$ は定数であり *16 また \mathbf{x}, s_0 はお互いに独立な確率分布に従うこと、 x を $\ln x$ と読み替えても確率計算上問

*15 実際の解析に際しては、 $\sigma_x = \ln 100/2$ (誤差 2 桁) や $\sigma_x = \ln 1000/2$ (誤差 3 桁) のようにオーダー推定の精度を任意に設定する。

*16 モデルが存在しない状態で観測を行っても、観測データ $\hat{\epsilon}$ は一定である。

題がないことなどに留意すれば、以下のような式変形を行うことができる。

$$p(\mathbf{x}, s_0 | \hat{\boldsymbol{\epsilon}}) = \frac{p(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \mathbf{x}, s_0) p(\mathbf{x}, s_0)}{p(\hat{\boldsymbol{\epsilon}})} \quad (26)$$

$$\propto p(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \mathbf{x}, s_0) p(\mathbf{x}, s_0) \quad (27)$$

$$= p(\hat{\boldsymbol{\epsilon}} | \mathbf{x}, s_0) p(\ln R_1) p(\ln R_2) p(\ln \eta_1) p(\ln \eta_2) p(s_0) \quad (28)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{\|\hat{\boldsymbol{\epsilon}} - \boldsymbol{\epsilon}\|^2}{2(\sigma_\epsilon)^2}\right) \left\{ \prod_j \exp\left(-\frac{(\ln x_j - \ln x_j^0)^2}{2(\sigma_x)^2}\right) \right\} \exp\left(-\frac{(s_0 - s_0^0)^2}{2(\sigma_{s_0})^2}\right) \quad (29)$$

$$= \exp\left[-\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{(\sigma_\epsilon)^2} \sum_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i)^2 + \frac{1}{(\sigma_x)^2} \sum_j (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 + \frac{1}{(\sigma_{s_0})^2} (s_0 - s_0^0)^2 \right\}\right] \quad (30)$$

*17 よって、 $p(\mathbf{x}, s_0 | \hat{\boldsymbol{\epsilon}})$ を最大にするためには (30) 式を最大にすることを考えればよく、それはすなわち以下の E を最小にすることと同値である。

$$E = \frac{1}{(\sigma_\epsilon)^2} \sum_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i)^2 + \frac{1}{(\sigma_x)^2} \sum_j (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 + \frac{1}{(\sigma_{s_0})^2} (s_0 - s_0^0)^2 \quad (31)$$

よって、結局問題は最小二乗推定に問題が帰着され、この E が「事前情報を反映させた」最小二乗推定における目的関数である。*18 (31) 式の目的関数はさらに変形することができて、

$$E = \sum_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i)^2 + \Gamma \left[\sum_j (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 + \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}}\right)^2 (s_0 - s_0^0)^2 \right] \quad (32)$$

のように未知のパラメタ Γ を用いて表すことができる。(未知数 σ_ϵ を Γ に吸収させた。) Γ は事前情報の「重み」を決めるパラメタであり、ダンピングパラメタ／正則化パラメタなどと呼ばれる。*19

※ 今後のため、目的関数の引数を明示的に書くと、

$$\begin{aligned} E(R_1, R_2, \eta_1, \eta_2, s_0) \\ = \sum_i \{ \hat{\epsilon}(\hat{s}(t_i); s_0) - \epsilon(t_i, R_1, R_2, \eta_1, \eta_2) \}^2 + \Gamma \left[\sum_{\substack{x_j=R_1, R_2, \\ \eta_1, \eta_2}} (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 + \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}}\right)^2 (s_0 - s_0^0)^2 \right] \end{aligned} \quad (33)$$

となる。ただし、 $\hat{\epsilon}(\hat{s}(t_i); s_0)$ は (19) に従い、 $\epsilon(t_i; R_1, R_2, \eta_1, \eta_2)$ は (1a) , (1b) に従う。

さて、実際に最小二乗推定を行うにあたりダンピングパラメタ Γ を指定する必要がある。すなわち、事前情報の項がどのくらいの重みで効いてくるかを決めなくてはならない。この決め方はさまざまあるが、今回は L-curve 法を用いることにする。

まず、 Γ に関する iteration を回しながら Levenberg-Marquardt 法を用いてパラメタ x_j, s_0 を決定し、決定したパ

*17 $x \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ の時、 $p(x) = 1/\sqrt{2\pi\sigma^2} \exp(-(x-\mu)^2/2\sigma^2)$ であることなどを用いた。

*18 そもそも最小二乗推定はベイズの手法と等価であるから、これは当然の結果である。

*19 一般には λ を用いるが、LM 法で使ってしまったため、 Γ を用いている。

ラムタに対して (33) 式のデータ項 (第一項) と正則化項 (第二項の大括弧の内側) のノルムを計算する。

$$\| \text{データ項} \| : \sqrt{\sum_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon)^2} \quad (34)$$

$$\| \text{正則化項} \| : \sqrt{\sum_j (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 + \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}} \right)^2 (s_0 - s_0^0)^2} \quad (35)$$

その後、データ項と正則化項のノルムをプロットし、*20「曲がり角」を与える Γ を正式な Γ として採用する。*21 また、この Γ に対し得られたパラメタの推定値が、求める推定値となる。ただし、非線形問題においては綺麗な L-curve とならない可能性が高いと考えられ、その場合はノルムプロットを見ながら適切な Γ を決定することにする。

5 データの重みづけ

今回の実験においては、 $t < t_1$ ではサンプル間隔は 1sec であるが、 $t > t_1$ ではサンプル間隔は 0.1sec となる。よって、 t_1 の前後でデータの重み (最小二乗フィッティングにどれだけ効いてくるか) を変えないと、 t_1 以降のデータへのフィットがおおよそ 10 倍効いてしまうことになる。そこで、重み関数 w_i を $t < t_1 \rightarrow w_i = 1$ 、 $t > t_1 \rightarrow w_i = 0.1$ のように定め、(33) のデータ項に掛けることでフィッティングへの効きを調整する。

また、今回仮定している物理モデルにおいては、 $t = t_1$ でそれまで試料に加えていた応力 σ_0 が急に 0 になり、(1a) (1b) 式の $\epsilon(t)$ も $t = t_1$ で不連続になっている。しかし、実際の実験においては試料に加えた応力 σ_0 はいきなり 0 となることはできず、応力が減少し始める時刻 t_{drop} と応力が 0 になる時刻 t_1 の間にはわずかなラグがある。*22 その上で、この間の観測データは理論モデルでは説明されないので、最小二乗フィッティングに効いてほしくない、すなわち $w_i = 0$ をしたいというモチベーションがある。

さらにいうと、今回の実験においては試料に働く力が変化した後それなりに長い時間データを取り続けている。例えば Figure1 を見ると、歪みが指数的な変化をしている部分に対し、歪みが直線的な変化をしている部分のデータの分量が多い。(1a) (1b) を用いてより定量的な説明をするなら、 σ_0/η_1 の項が効いている時間が長い。そのため、最小二乗フィッティングにおいて η_1 が優先されてしまう恐れがあり、これを解決する必要がある。よって、適当な時間幅 t_{cutoff} を定め、関数の冪的な部分から一定程度データは最小二乗フィッティングに効かないようにする。

ここまでの議論をまとめると、

$$w_i = 1 \quad (0 \leq t < t_{\text{cutoff}}^1) \quad (36)$$

$$w_i = 0.1 \quad (t_1 \leq t < t_{\text{cutoff}}^2) \quad (37)$$

$$w_i = 0 \quad (\text{otherwise}) \quad (38)$$

のようになる。また、(33) 式の目的関数は改めて、

$$E = \sum_i w_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i)^2 + \Gamma \left[\sum_j (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 + \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}} \right)^2 (s_0 - s_0^0)^2 \right] \quad (39)$$

*20 log-log plot が良いとされている。

*21 例えば Γ を小さくしていったら正則化項の重要性を下げっていくことで最小二乗法の重みがデータ項に向くようにする (データフィットを重視する) と、当然最終的に得られる正則化項の値は大きくなる (x_i が x_i^0 から離れる)。この時、特にある時点で急に正則化項が大きくなり始めたなら、そこから先の Γ においてはデータフィットを優先するあまり事前情報を反映しなくなったということを意味する。よって、その直前ギリギリのデータ項と正則化項のバランスが理想的なバランスであり、そのバランスを与える Γ を求める、というのが L-curve の概要である。(おそらく実際の結果に対する図を見たほうがわかりやすいと思われる。)

*22 もっと言うと、試料を抑えつける都合上、 $T > t_1$ での試験力は 0N ではなく 10N であるが、今回は便宜上 0N とみなすことにする。

のように書き表されることになる。

6 目的関数・ヤコビアン

Levenberg-Marquardt 法の説明では目的関数を

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{r}(\mathbf{x})\|^2 = \frac{1}{2} \sum_p r_p^2(\mathbf{x}) \quad (40)$$

としていたので、(39) 式の目的関数 E を (40) 式の形であらわす必要がある。言い換えれば、 $E = \frac{1}{2} \sum_p r_p^2$ を満たす $r_p, p = 1, 2, \dots$ を求める必要がある。

まず、観測データを解析に耐える形にする。今回の実験においては時刻 t とストローク s と試験力 F について離散的な生データが得られているはずであるから、 t が小さい方から順に $i = 1, 2, 3, \dots$ と番号付を行う。

i	1	2	3	20	21	22	...
t_i^{raw} [s]	0	1	2	21	22	23	...
s_i^{raw} [mm]	0.000375	0.0075	0.014375	0.12775	0.128125	0.128375	...
F_i^{raw} [N]	-0.6367366	5.38826	12.62824	179.8766	180.0159	179.8019	...

Table1: 生データの一例

表1はそのようにして得られた生データの一例である。この実験では、モデルの σ_0 に対応する試験力は 180[N] であった。そこで改めて表1を見ると、 $t^{\text{raw}} = 22[\text{s}]$ で試験力 F_i^{raw} が目標に到達していることがわかる。特に、今回の物理モデルでは σ_0 を瞬間的に加え始めた時刻を $t = 0$ としたいので、今回の実験においては $t^{\text{raw}} = 22[\text{s}]$ を改めて時刻の 0 点にするべきである。よって、 $t^{\text{raw}} = 22[\text{s}]$ でのデータ番号 i を i_{rp} ^{*23} として、実験データは次のように補正される。

$$t_i = t_{i+(i_{rp}-1)}^{\text{raw}} - t_{i_{rp}}^{\text{raw}} \quad (41)$$

$$s_i = s_{i+(i_{rp}-1)}^{\text{raw}} \quad (42)$$

$$F_i = F_{i+(i_{rp}-1)}^{\text{raw}} \quad (43)$$

$$(44)$$

よって、このようにデータを時間方向にずらしから解析を行う。

さて、先に述べたように今回は一部の区間で重み w_i を 0 にとっているのがあった。その上で、目的関数 E のうちデータが効くのは

$$(\text{データ項}) = \sum_i w_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i)^2 \quad (45)$$

の部分のみであり、その形から $w_i = 0$ のときはその i での観測データ t_i, s_i は最小二乗法に影響しないことがわかる。(37)～(38) で与えられる重みの具体系を思い出せば、 w_i が 0 とならないのは以下の二つの条件を満たす i において

*23 rp: reach power

のみである。

$$0 \leq t_i < t_{\text{cutoff}}^1 \quad (46)$$

$$t_1 \leq t_i < t_{\text{cutoff}}^2 \quad (47)$$

今、 $t_i = 0$ となるのは $i = 1$ の時であるが、同様にして $t_i \approx t_{\text{cutoff}}^1$ 、 $t_i \approx t_1$ 、 $t_i \approx t_{\text{cutoff}}^2$ となるような i を順番にそれぞれ i_{c1} 、 i_{t1} 、 i_{c2} 、とおけば、 $w_i \neq 0$ となる条件 (46) (47) は

$$1 \leq i \leq i_{c1} \quad (48)$$

$$i_{t1} \leq i \leq i_{c2} \quad (49)$$

のように書き表すことができるはずであり、この時目的関数は

$$E = \sum_{1 \leq i \leq i_{c1}} w_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i^a)^2 + \sum_{i_{t1} \leq i \leq i_{c2}} w_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i^b)^2 + \sum_{1 \leq j \leq 4} \Gamma (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 + \Gamma \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}} \right)^2 (s_0 - s_0^0)^2 \quad (50)$$

のようになる。ただし、(1a) (1b) 式の creep function をそれぞれ ϵ^a 、 ϵ^b とおいた。よって、 E 総和記号を全て展開して、左から順に r_p に収納していけば、 $E = \frac{1}{2} \sum r_p^2$ を満たすことができるとわかる。すなわち、

$$\frac{1}{2} r_p^2 = w_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i^a)^2 \quad (1 \leq p \leq i_{c1}, i = p, 1 \leq i \leq i_{c1}) \quad (51)$$

$$\frac{1}{2} r_p^2 = w_i (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i^b)^2 \quad \left(\begin{array}{l} i_{c1} + 1 \leq p \leq i_{c1} + (i_{c2} - i_{t1}) + 1 \\ i = p + i_{t1} - i_{c1} - 1, i_{t1} \leq i \leq i_{c2} \end{array} \right) \quad (52)$$

$$\frac{1}{2} r_p^2 = \Gamma (\ln x_j - \ln x_j^0)^2 \quad (p = i_{c1} + (i_{c2} - i_{t1}) + 1 + j, 1 \leq j \leq 4) \quad (53)$$

$$\frac{1}{2} r_p^2 = \Gamma \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}} \right)^2 (s_0 - s_0^0)^2 \quad (p = i_{c1} + (i_{c2} - i_{t1}) + 6) \quad (54)$$

とすれば良い。^{*24} r_p について明示すれば、

$$r_p = \sqrt{2w_i} (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i^a) \quad (1 \leq p \leq i_{c1}, i = p, 1 \leq i \leq i_{c1}) \quad (55)$$

$$r_p = \sqrt{2w_i} (\hat{\epsilon}_i - \epsilon_i^b) \quad \left(\begin{array}{l} i_{c1} + 1 \leq p \leq i_{c1} + (i_{c2} - i_{t1}) + 1 \\ i = p + i_{t1} - i_{c1} - 1, i_{t1} \leq i \leq i_{c2} \end{array} \right) \quad (56)$$

$$r_p = \sqrt{2\Gamma} (\ln x_j - \ln x_j^0) \quad (p = i_{c1} + (i_{c2} - i_{t1}) + 1 + j, 1 \leq j \leq 4) \quad (57)$$

$$r_p = \sqrt{2\Gamma} \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}} \right) (s_0 - s_0^0) \quad (p = i_{c1} + (i_{c2} - i_{t1}) + 6) \quad (58)$$

となる。この時目的関数 E は (40) の形になるので、この r に対し Levenberg-Marquardt 法を用いることで E を最小にするパラメタを求めることができる。

今、 $\hat{\epsilon}_i = \hat{\epsilon}_i(s_0; \hat{s}_i, l_0)$ を (19) で、 $\epsilon_i^a = \epsilon_i^a(R_1, R_2, \eta_1, \eta_2; t_i, \sigma_0)$ を (1a) で、 $\epsilon_i^b = \epsilon_i^b(R_2, \eta_1, \eta_2; t_i, \sigma_0, t_1)$ を (1b)

^{*24} index の変換が少しややこしい。

で与えれば r_p の具体的な形が求まり Table2 ようになる。ただし、明瞭さのため

$$p_1 = 1 \quad (59)$$

$$p_2 = i_{c1} \quad (60)$$

$$p_3 = i_{c1} + (i_{c2} - i_{t1}) + 1 \quad (61)$$

とおくことにする。

p	r_p
$\underbrace{p_1 \leq p \leq p_2}_{(i = p)}$	$-\sqrt{2} \left\{ \ln \frac{l_0 - \hat{s}_i + s_0}{l_0} + \frac{\sigma_0}{R_1} + \frac{\sigma_0}{R_2} \left(1 - \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) \right) + \frac{\sigma_0}{\eta_1} t_i \right\}$ <p style="text-align: right;">(= Θ_1 と置く)</p>
$\underbrace{p_2 + 1 \leq p \leq p_3}_{(i = p + i_{t1} - p_2 - 1)}$	$-\sqrt{\frac{2}{10}} \left\{ \ln \frac{l_0 - \hat{s}_i + s_0}{l_0} + \frac{\sigma_0}{R_2} \left(\exp \left(\frac{R_2}{\eta_2} t_1 \right) - 1 \right) \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) + \frac{\sigma_0}{\eta_1} t_1 \right\}$ <p style="text-align: right;">(= Θ_2 と置く)</p>
$\underbrace{p_3 + 1 \leq p \leq p_3 + 4}_{(j = p - p_3)}$	$\sqrt{2}\Gamma (\ln x_j - \ln x_j^0)$ <p style="text-align: right;">(= Θ_3 と置く)</p>
$\underbrace{p = p_3 + 5}$	$\sqrt{2}\Gamma \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}} \right) (s_0 - s_0^0)$ <p style="text-align: right;">(= Θ_4 と置く)</p>

Table2: ベクトル \mathbf{r} の構造。表を縦ベクトルに見立てている。($p = 1$ から始まり、下に行くほど p は大きくなる) 表は、 p が 4 つのブロックに分けられることを示している。

さて、 r_p がももったのでヤコビアン $J_{pj} = \partial r_p / \partial x_j$ を求めることができる。ただし以下では、

$$(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5) = (R_1, R_2, \eta_1, \eta_2, s_0) \quad (62)$$

とする。(すなわち、 $x_5 = s_0$ を加える。) 偏微分した結果は以下のよう。

$p_1 \leq p \leq p_2$ の場合^{*25}

*25 すなわち、表2の一番上のブロック

※ ただし、 $i = p$ である。

$$J_{p1} = \frac{\partial r_p}{\partial R_1} = \sqrt{2} \frac{\sigma_0}{R_1^2} \quad (63)$$

$$J_{p2} = \frac{\partial r_p}{\partial R_2} = \sqrt{2} \frac{\sigma_0}{R_2^2} \left\{ 1 - \left(1 + \frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) \right\} \quad (64)$$

$$J_{p3} = \frac{\partial r_p}{\partial \eta_1} = \sqrt{2} \frac{\sigma_0 t_i}{\eta_1^2} \quad (65)$$

$$J_{p4} = \frac{\partial r_p}{\partial \eta_2} = \sqrt{2} \frac{\sigma_0 t_i}{\eta_2^2} \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) \quad (66)$$

$$J_{p5} = \frac{\partial r_p}{\partial s_0} = \sqrt{2} \frac{-1}{l_0 - \hat{s}_i + s_0} \quad (67)$$

$p_2 + 1 \leq p \leq p_3$ の場合^{*26}

※ ただし、 $i = p + i_{t1} - p_2 - 1$ である。

$$J_{p1} = \frac{\partial r_p}{\partial R_1} = 0 \quad (68)$$

$$J_{p2} = \frac{\partial r_p}{\partial R_2} = \sqrt{\frac{2}{10}} \frac{\sigma_0}{R_2^2} \left\{ \left(1 + \frac{R_2}{\eta_2} (t_i - t_1) \right) \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} (t_i - t_1) \right) \right. \quad (69)$$

$$\left. - \left(1 + \frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) \right\} \quad (70)$$

$$J_{p3} = \frac{\partial r_p}{\partial \eta_1} = \sqrt{\frac{2}{10}} \frac{\sigma_0 t_1}{\eta_1^2} \quad (71)$$

$$J_{p4} = \frac{\partial r_p}{\partial \eta_2} = \sqrt{\frac{2}{10}} \frac{\sigma_0}{\eta_2^2} \left\{ t_i \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} t_i \right) - (t_i - t_1) \exp \left(-\frac{R_2}{\eta_2} (t_i - t_1) \right) \right\} \quad (72)$$

$$J_{p5} = \frac{\partial r_p}{\partial s_0} = \sqrt{\frac{2}{10}} \frac{-1}{l_0 - \hat{s}_i + s_0} \quad (73)$$

$p_3 + 1 \leq p \leq p_3 + 4$ の場合^{*27}

※ ただし、 $j = p - p_3$ である。

$$J_{pj} = \frac{\partial r_p}{\partial x_j} = \frac{\sqrt{2}\Gamma}{x_j} \quad (if : j = p - i_{c1} - (i_{c2} - i_{t1}) - 1) \quad (74)$$

$$J_{pj} = \frac{\partial r_p}{\partial x_j} = 0 \quad (otherwise) \quad (75)$$

$p = p_3 + 5$ の場合^{*28}

*26 すなわち、表2の上から二番目のブロック

*27 すなわち、表2の上から三番目のブロック

*28 すなわち、表2の一番下のブロック

$$J_{pj} = \frac{\partial r_p}{\partial x_j} = \sqrt{2}\Gamma \frac{\sigma_x}{\sigma_{s_0}} \quad (\text{if } j = 5) \quad (76)$$

$$J_{pj} = \frac{\partial r_p}{\partial x_j} = 0 \quad (\text{otherwise}) \quad (77)$$

ここで、式の見やすさのために、*29 以下のような表現を導入する。

$$\tau = \frac{\eta_2}{R_2} \quad (78)$$

$$\zeta(x) = (1+x) \exp(-x) \quad (79)$$

$$\xi(x) = x \exp(-x) \quad (80)$$

$$\beta(x, y) = \frac{\sqrt{2x}}{y} \quad (81)$$

$$\rho(x, y, z) = \frac{-1}{z - y + x} \quad (82)$$

これを用いて、先ほど計算した J_{pj} を整理すると、以下のようになる。

	$j = 1$ ($x_j = R_1$)	$j = 2$ ($x_j = R_2$)	$j = 3$ ($x_j = \eta_1$)	$j = 4$ ($x_j = \eta_2$)	$j = 5$ ($x_j = s_0$)
$\underline{p_1 \leq p \leq p_2}$ ($i = p$)	$\sqrt{2} \frac{\sigma_0}{R_1^2}$	$\sqrt{2} \frac{\sigma_0}{R_2^2} \left\{ 1 - \zeta\left(\frac{t_i}{\tau}\right) \right\}$	$\sqrt{2} \frac{\sigma_0 t_i}{\eta_1^2}$	$\sqrt{2} \frac{\sigma_0 \tau}{\eta_2^2} \xi\left(\frac{t_i}{\tau}\right)$	$\sqrt{2} \rho(s_0, \hat{s}_i, l_0)$
$\underline{p_2 + 1 \leq p \leq p_3}$ ($i =$ $p + i_{t_1} - p_2 - 1$)	0	$\sqrt{\frac{2}{10}} \frac{\sigma_0}{R_2^2} \left\{ \zeta\left(\frac{t_i - t_1}{\tau}\right) - \zeta\left(\frac{t_i}{\tau}\right) \right\}$	$\sqrt{\frac{2}{10}} \frac{\sigma_0 t_1}{\eta_1^2}$	$\sqrt{\frac{2}{10}} \frac{\sigma_0 \tau}{\eta_2^2} \left\{ \xi\left(\frac{t_i}{\tau}\right) - \xi\left(\frac{t_i - t_1}{\tau}\right) \right\}$	$\sqrt{\frac{2}{10}} \rho(s_0, \hat{s}_i, l_0)$
$\underline{p = p_3 + 1}$	$\beta(\Gamma, R_1)$	0	0	0	0
$\underline{p = p_3 + 2}$	0	$\beta(\Gamma, R_2)$	0	0	0
$\underline{p = p_3 + 3}$	0	0	$\beta(\Gamma, \eta_1)$	0	0
$\underline{p = p_3 + 4}$	0	0	0	$\beta(\Gamma, \eta_2)$	0
$\underline{p = p_3 + 5}$	0	0	0	0	$\beta\left(\Gamma, \frac{\sigma_{s_0}}{\sigma_x}\right)$

Table3: ヤコビ行列の構造。縦横がそのまま行列の縦横に対応している。

以上の式さえ与えられていれば、あとは愚直に LM 法を実装すれば良い。

*29 それから、解析の際に関数を実装することを見越して