

階層ベイズ推定によるパラメータ不確定性定量化の有用性 Hierarchical Bayesian Inference for Parameter Uncertainty Quantification

北原 優 (ライプニッツ大ハノーファー) 北原 武嗣 (関東学院大・理工) Michael Beer (Leibniz Univ. Hannover)
Masaru KITAHARA, Leibniz University Hannover
Takeshi KITAHARA, Kanto Gakuin University
Michael BEER, Leibniz University Hannover
E-Mail: kitahara@kanto-gakuin.ac.jp

The class of Bayesian methods is widely recognized as a favorable approach for uncertainty quantification (UQ), which can combine the prior knowledge on the system of interest with the measurements on it in a probabilistic framework. In the Bayesian approach, model parameters are inferred as a posterior distribution, where uncertainties due to measurement errors or/and modelling errors are probabilistically quantified. However, the classical Bayesian approach assumes that the underlying model class is deterministic; thus, parameter uncertainty cannot be considered. To fill this gap, the hierarchical Bayesian approach has gained attention, where a specific distribution, which represents parameter uncertainty is assigned to the model parameters and its hyper-parameters are updated. While the main issue of this approach is the choice of the distribution, we propose to employ the staircase density functions to flexibly approximate a wide range of distributions to obtain an approximation of the target distribution that results in the model predictions identical to the measurements. The proposed approach is demonstrated and compared with the classical Bayesian approach on numerical examples with three cases, i.e., linear, weak nonlinear, and strong nonlinear cases.

1. はじめに

既存構造物の補修補強の実施判断や優先順位の決定のために、数値モデルに基づく性能評価の重要性が認識されている。このとき、妥当な数値モデルを構築するためには、モデル応答が実構造の挙動と可能な限り一致するように、観測データに基づきモデルパラメータを校正するモデル更新が有効である。

モデル更新では、数値モデルと観測データに内在する不確定性を定量的に評価することが重要である。近年広く検討されているベイズ推定では、モデル化誤差や観測誤差によるモデル応答と観測データの不一致を尤度関数でモデル化し、パラメータの事後推定を得る。ベイズ推定は通常サンプリング手法に基づき実装され、非線形・非ガウスの問題にも適用可能であることが知られている。

一方、材料定数や境界条件が空間的・時間的に変動する場合など、パラメータ自体にも不確定性が内在する場合、通常のベイズ推定の定式化は適用範囲外となる。これに対して、パラメータにある確率分布（正規分布など）を仮定し、その分布係数（平均、分散など）を更新する階層ベイズ推定が近年提案されている。本手法では、分布係数の事後推定に基づきパラメータの不確定性を観測から定量化することが可能となる。通常、適切な分布を事前に選択することは困難であるが、本研究では、任意の分布を離散的に近似する SDF (staircase density function) を用いることで、分布形状を限定しない階層ベイズ推定法を提案する。

正規分布に従うモデルパラメータを仮定し、パラメータとモデル出力の間に線形性、弱非線形性、強非線形関係がある数値例題を通して、通常のベイズ推定と比較して提案手法の有用性を検討した。

2. 階層ベイズ推定手法の概要

ベイズ推定は通常、式(1)に示すベイズの定理を用いることで観測データ $\mathbf{Y}_{\text{obs}}$ に基づき、パラメータ $\mathbf{x}$ の事前分布 $P(\mathbf{x})$ を事後分布 $P(\mathbf{x}|\mathbf{Y}_{\text{obs}})$ に更新する。

$$P(\mathbf{x}|\mathbf{Y}_{\text{obs}}) \propto P_L(\mathbf{Y}_{\text{obs}}|\mathbf{x})P(\mathbf{x}) \quad (1)$$

ここに、尤度関数 $P_L(\mathbf{Y}_{\text{obs}}|\mathbf{x})$ は観測データ $\mathbf{Y}_{\text{obs}}$ とモデル応答 $M(\mathbf{x})$ の一致度を定量化する指標であり、通常、両者の差を正規分布でモデル化することで式(2)のように与えられる。

$$P_L(\mathbf{Y}_{\text{obs}}|\mathbf{x}) = \prod_{k=1}^{N_{\text{obs}}} N(\mathbf{y}_{\text{obs}}^{(k)} - M(\mathbf{x}), \sigma^2) \quad (2)$$

式(2)において、 $N(\text{Exp}, \text{Var})$ は期待値 Exp 、分散 Var の正規分布を表し、 σ^2 は観測データ $\mathbf{Y}_{\text{obs}}$ の分散である。上記の定式化では、 $\mathbf{x}$ に対するモデル応答 $M(\mathbf{x})$ は確定値であり、パラメータ不確定性は考慮されない。

一方、本研究で検討する階層ベイズ推定では、パラメータ $\mathbf{x}$ の不確定性を記述する確率分布 $f_X(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ を仮定し、 $\mathbf{x}$ 自体ではなくその分布係数 $\boldsymbol{\theta}$ を更新対象とすることで、式(1)を次式のように置き換える。

$$P(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{Y}_{\text{obs}}) \propto P_L(\mathbf{Y}_{\text{obs}}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})f_X(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})P(\boldsymbol{\theta}) \quad (3)$$

このとき、モデル応答 $M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ は $\boldsymbol{\theta}$ によって一意に決まる $\mathbf{x}$ の確率分布から求まるため、 $M(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ 自体も確率分布となる。したがって、尤度関数 $P_L(\mathbf{Y}_{\text{obs}}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ は次式で与えられる。

$$P_L(\mathbf{Y}_{\text{obs}}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) = \prod_{k=1}^{N_{\text{obs}}} P(\mathbf{y}_{\text{obs}}^{(k)}|\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{x}$ の分布形状を事前に決定することは通常困難であるため、本研究では、分布の支持領域と 4 次モーメントまでの 4 つの分布係数を決定することで任意の分布を近似することが可能な SDF を適用する。

以上より、提案手法ではパラメータ $\mathbf{x}$ に特定の確率分布を仮定することなく、階層ベイズ的に SDF の 4 つの分布係数の事後推定を得ることで、観測データと最も一致するモデル応答を与える $\mathbf{x}$ の確率分布を推定することが可能となる。

3. 検討例とその考察

検討例題として 1 パラメータの数値モデルを想定し、そのモデル応答とパラメータとの間に、Table 1 に示すような線形関係、弱非線形関係、および強非線形関係を有する 3 ケースを対象とする。

本例題では、簡便のためパラメータは平均 5.0、標準偏差 0.5 の正規分布に従うものとした。この分布に従うパラメータを 1000 サンプル発生させ、Table 1 の関係を有するモデル応答のサンプルを計算した。求めたモデル応答 1000 サンプルを観測データとして、ベイズ推定に広く用いられているサンプリング手法である TCMCMC²⁾により階層ベイズ更

新を実施して上述の確率分布の推定を試みた．また比較のため．同一の観測データを用いた通常のベイズ推定も実施した．このとき，観測データは $M(x = 5.0)$ を真値とし与の分散をもつ観測誤差が付加されたものと解釈される．

Linear model	$M = 2.5x$
Weak nonlinear model	$M = \exp(x/2.5)$
Strong nonlinear model	$M = 0.5(x - 3.2)^2$

Fig.1 に観測データのヒストグラムとその平均・分散から求めた正規分布を示す．また，Fig.2 は通常のベイズ推定による事後分布と目標値の比較，Fig.3 は階層ベイズ推定で求めた SDF と目標分布の比較をそれぞれ示している．Fig.1 から Fig.3 において，左から順に線形，弱非線形，強非線形関係のケースを示す．

Fig.1 より，パラメータとモデル出力の間に線形関係がある場合はモデル出力も正規分布を示しているが，非線形性が強くなるに従い正規分布からの乖離が大きくなる．
Fig.2 および Fig.3 より，いずれのケースも通常のベイズ推定ではパラメータの事後推定は目標値と良く一致しており，階層ベイズ推定では分布係数の事後推定に対応する SDF は目標分布とよく一致していることがわかる．このよ

うに，同一の観測データを用いた場合でも，定式化の違いにより推定結果は大きく異なる．したがって，観測データへのパラメータ不確定性の寄与が大きいと考えられる場合や，パラメータの確率分布を推定したい場合には，提案する階層ベイズに基づく手法でのモデル更新が有効であると考えられる．

4. 結論

数値例題の検討を通して，通常のベイズ推定と階層ベイズ推定の違いを示し，提案する SDF に基づく階層ベイズ手法によるパラメータ不確定性定量化の有用性を示した．本稿では，正規分布の 1 ケースのみの検討に留めたが，他の様々な分布形状に対しても今後検討を実施する予定である．

参考文献

1) M. Kitahara and S. Bi and M. Broggi and M. Beer: Nonparametric Bayesian stochastic model updating with hybrid uncertainties, Mechanical System and Signal Processing, 163, 108195, 2022.

2) J. Ching and Y. Cheng: Transitional Markov chain Monte Carlo method for Bayesian model updating, model class selection, and model averaging, Journal of Engineering Mechanics, 133, pp.816-832, 2007.

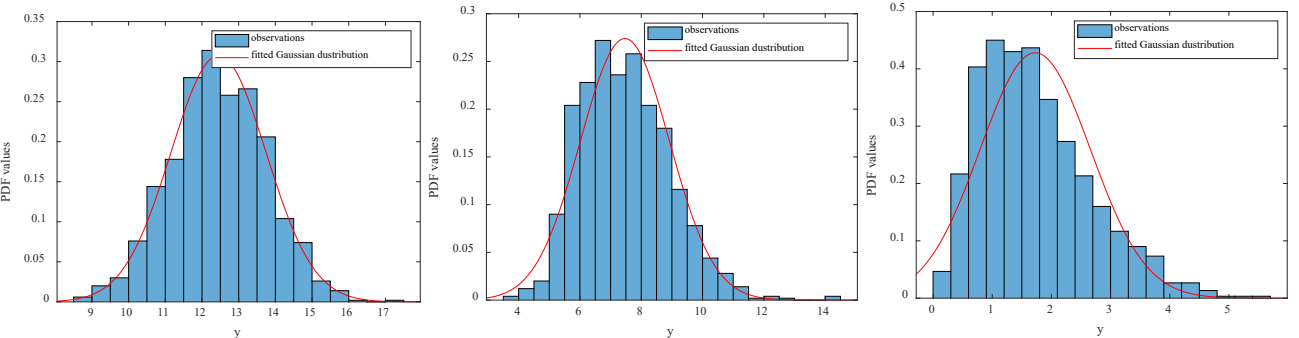


Fig. 1 Histograms of the observed data (left: linear, center: weak nonlinear, right: strong nonlinear).

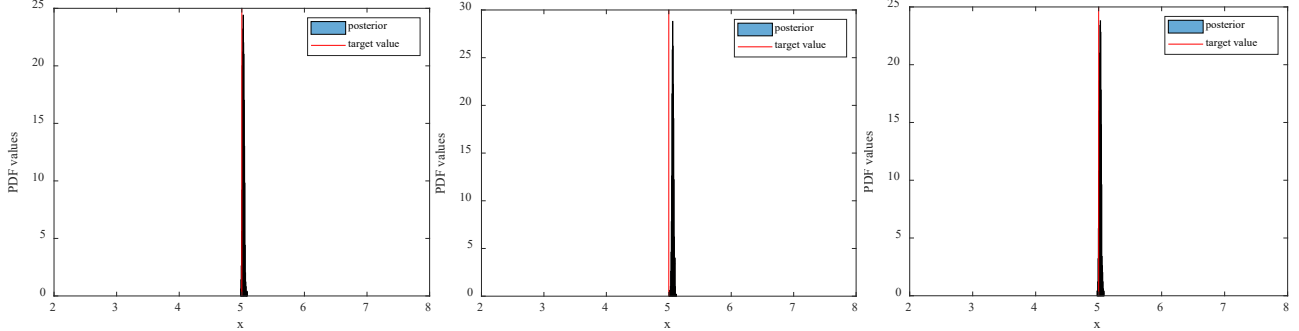


Fig. 2 Results of the classical Bayesian approach (left: linear, center: weak nonlinear, right: strong nonlinear).

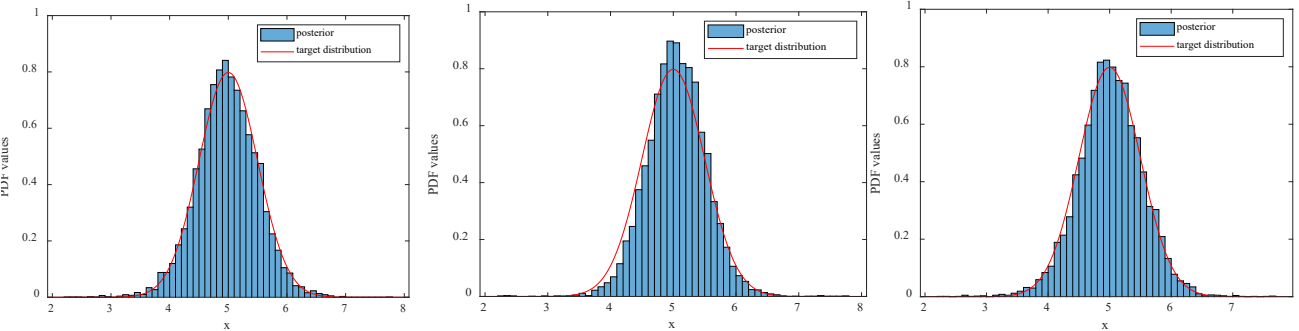


Fig. 3 Results of the hierarchical Bayesian approach (left: linear, center: weak nonlinear, right: strong nonlinear).