FAST 手法による感度解析について

劉　峭

計算モデルの入力変数に不確実さが存在する場合に，入力変数の不確実さがモデル中で伝播し，モデルの出力変数の不確実さを引き起こす．FAST（Fourier Amplitude Sensitivity Test）手法は，モデルの入力変数の不確実さによる出力変数の不確実さへの影響を評価する手法であり，グローバル感度解析としては最初に提案されたものである．本稿では，FAST 手法について解説する．

キーワード：グローバル感度解析，FAST 手法，フーリエスペクトル，感度指標

1. はじめに

FAST 手法は，1970 年代に Cukier ら[1]～[4]により提案された最初のグローバル感度解析手法である．FAST 手法の特徴として，正弦関数の適用により各入力変数にそれぞれ異なる特性周波数を割り振り，高次元の入力変数空間を 1 次元空間に変換し，各入力変数によるモデル出力変数の分散への寄与が，フーリエ変換により得られた特性周波数およびその高次周波数のフーリエ係数から効率よく求められる．FAST 手法で得られた感度指標は，Sobol'[5]が提示した 1 次感度指標（First-Order Sensitivity Index）に等しい．1 次感度指標は，着目した入力変数単独による出力変数の分散への寄与，すなわち主感度を評価しているが，着目した入力変数と他の入力変数の相互作用による出力変数分散への寄与は評価できない．Saltelli ら[6]は従来の FAST 手法を拡張し，主感度および入力変数間の相互作用による出力変数分散への寄与，いわゆる総感度指標（Total Sensitivity Index）[9]も計算できるようにした．Sobol' 法による 1 次感度指標と総感度指標の計算手法については，本特集の本間氏による第 3 論文を参照されたい．

2. 従来の FAST 手法

2.1 理論背景

対象となるモデルを $y=f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ とする．ここに，y はモデルの出力変数で，$x_1, x_2, \cdots, x_n$ はモデルの入力変数，n は入力変数の数である．便宜上，y をスカラーとする．また，すべての入力変数が完全独立で，[0, 1]上の一様分布を仮定する．したがって，すべての入力変数の同時確率分布 $P(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ は以下となる．

$$P(x_1, x_2, \cdots, x_n)=\prod_{i=1}^{n} P_i(x_i)=1 \tag{1}$$

ここに，$P_i(x_i)(i=1, 2, \cdots, n)$ は各入力変数の確率分布である．

出力変数 y の r 次モーメントは次式で定義される．

$$\langle y^{(r)}\rangle=\iint\cdots\int_{\Omega_n} f^r(x_1, x_2, \cdots, x_n)dx_1dx_2\cdots dx_n \tag{2}$$

ここに，Ω_n はすべての入力変数が構成する n 次元の空間（単位超立方体）である．$\langle y^{(r)}\rangle$ を求めるために，n 次元の入力空間を一つの探索関数（search function）で描くことにより，計算が簡便になる．この探索関数は正弦関数を用いて

$$x_i(s)=G_i(\sin \omega_i s) \quad i=1, 2, \cdots, n \tag{3}$$

で定義される．ここに，$\omega_i(i=1, 2, \cdots, n)$ は入力変数 x_i に割り振られた特性周波数（characteristic frequency）である．s はスカラーで，$(-\infty, +\infty)$ で変動すると，入力変数 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ も Ω_n 空間中で同時に変動する．探索関数 $G_i(\sin \omega_i s)$ の選択については 2.3 節で述べる．

特性周波数の集合 $\{\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_n\}$ が構成する線型結合 $\sum_{i=1}^{n} r_i\omega_i$（ただし r_i は整数）が

$$\sum_{i=1}^{n} r_i\omega_i \neq 0 \tag{4}$$

のとき，エルゴード定理（ergodic theorem）[7]から(2)式が以下に等しくなる．

$$\bar{y}^{(r)}=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{2T}\int_{-T}^{T} f^r(x_1(s), x_2(s), \cdots, x_n(s))ds$$
$$=\langle y^{(r)}\rangle \tag{5}$$

りゅう　ちょう
日本原子力研究開発機構
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4

s が無限区間 $(-\infty, +\infty)$ で変動すれば，探索曲線（search curve）が Ω_n 内のすべての点を探索する開曲線となる．このように，n 次元入力変数空間の多重積分が探索曲線に沿った s 空間の 1 次元積分に置き換えられる．

実際には，(4)式を満たす ω_i の集合は求められず，また計算上の配慮もあることから，Cukier ら[3]は正整数 ω_i を用いた．これにより，(5)式の T は 2π となる．つまり，探索曲線が空間 Ω_n 内での開曲線でなくなり，周期 2π を持つ閉曲線となる．すなわち，以下の式が成立する．

$$f(x_1(s), x_2(s), \cdots, x_n(s)) = f(x_1(s+2\pi), x_2(s+2\pi), \cdots, x_n(s+2\pi)) \tag{6}$$

簡便のため，以下では $f(x_1(s), x_2(s), \cdots, x_n(s))$ を $f(s)$ と記す．s が 1 周期 $(-\pi, \pi)$ で変動するとして，(5)式は

$$\bar{y}^{(r)} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f^r(s)ds = \langle y^{(r)} \rangle \tag{7}$$

となる．また，y の分散 $V(y)$ は次式で求められる．

$$V(y) = \langle y^{(2)} \rangle - (\langle y^{(1)} \rangle)^2 \approx \bar{y}^{(2)} - (\bar{y}^{(1)})^2 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f^2(s)ds - \left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(s)ds\right]^2 \tag{8}$$

次に，$f(s)$ をフーリエ級数展開する：

$$y = f(s) = \sum_{j\in Z}[A_j \cos(js) + B_j \sin(js)] \tag{9}$$

ここに，Z はすべての整数の集合である．フーリエ係数 A_j, B_j は

$$A_j = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(s)\cos(js)ds \tag{10}$$

$$B_j = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(s)\sin(js)ds \tag{11}$$

で計算される．特に，$j=0$ のとき，A_0 と B_0 は

$$A_0 = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(s)ds = \bar{y}^{(1)} \tag{12}$$

$$B_0 = 0 \tag{13}$$

となる．

さらに，$\bar{y}^{(2)}$ は以下の式で求められる．

$$\bar{y}^{(2)} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f^2(s)ds = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}\left[\sum_{j\in Z}\{A_j \cos(js) + B_j \sin(js)\}\right]^2 ds = \sum_{j\in Z}\Lambda_j \tag{14}$$

ここに，$\Lambda_j = (A_j^2 + B_j^2)$ はフーリエスペクトルである．また，$A_{-j} = A_j, B_{-j} = -B_j$ なので，(14)式を変換して

$$\bar{y}^{(2)} = A_0^2 + 2\sum_{j\in Z^+}\Lambda_j \tag{15}$$

となる．ここに，$Z^+ = \{1, 2, \cdots, +\infty\}$ である．

(8)，(12)および(15)式から，y の分散 $V(y)$ が以下のように求められる．

$$V(y) \approx 2\sum_{j\in Z^+}\Lambda_j \tag{16}$$

$V(y)$ 中の周波数 ω_i および ω_i の高次ハーモニックスに対応したフーリエスペクトルの和は，入力変数 x_i の不確実さによる $V(y)$ に寄与する偏分散（partial variance）であり，次式で求められる．

$$V_i = 2\sum_{j\in Z^+}\Lambda_{j\omega_i} \tag{17}$$

FAST 手法においては，V_i と $V(y)$ の分散比

$$S_i = \frac{V_i}{V(y)} \tag{18}$$

が感度指標として定義される[4]．

2.2 フーリエスペクトルの誤差低減

2.2.1 干渉（interference）による誤差

理論上，$\omega_i (i=1, 2, \cdots, n)$ は(4)式を満足すべきだが，実際の計算上で ω_i が正整数とされたため，(4)式を満足する ω_i は存在しない．例えば，あるモデルに 2 つの入力変数 x_1 と x_2 があるとし，対応する特性周波数を ω_1 と ω_2（ω_1 と ω_2 は共に正整数）とする．このとき，下記の式を成立させる正整数 P_1 と P_2 が必ず存在する．

$$P_1\omega_1 = P_2\omega_2 \tag{19}$$

この場合は，周波数 $P_1\omega_1$ のスペクトル $\Lambda_{P_1\omega_1}$ は共に分散 V_1 と V_2 に含まれ，干渉の問題が引き起こされる．干渉による計算誤差を小さく押さえるために，Cukier ら[3]は下記の条件を提案した：すなわち，整数 a_i が

$$\sum_{i=1}^{n}|a_i| \leq M+1,\quad M \text{ は正整数} \tag{20}$$

のときに，$\sum_{i=1}^{n} a_i\omega_i \neq 0$ が成立すれば，各入力変数に与えた周波数 $\omega_i (i=1, 2, \cdots, n)$ は M 次ハーモニックスまで干渉しないことになる．通常，M を 4 とすることが多い．

したがって，(17)式の V_i を求めるときに，ω_i の M 次ハーモニックスまでのスペクトルを以下のように求めればよい．

$$V_i = 2\sum_{j=1}^{M}\Lambda_{j\omega_i} \tag{21}$$

また，$\omega_i (i=1, 2, \cdots, n)$ の選択も下記の式により繰り返して求められる．

$$\omega_1 = \Theta_n \tag{22}$$

$$\omega_i = \omega_{i-1} + d_{n+1-i},\ i=2, 3, \cdots, n \tag{23}$$

ここに，Θ_n と d_n は適当な正整数であり，その値は Cukier ら[3]を参照されたい．

2.2.2 エイリアシング（aliasing）による誤差

探索曲線 $G_i(\sin\omega_i s)(i=1,2,\cdots,n)$ が周期 2π を持つ閉曲線となるため，分散を求めるときに，通常 s を $(-\pi,\pi)$ 上で N 等分に離散化して計算する．例として，2つの特性周波数 ω_i と ω_l を考える．ω_i と ω_l が以下の関係

$$\omega_i+\omega_l=jN,\ j\in Z \tag{24}$$

を満足するときに，$\Lambda_{\omega_i}=\Lambda_{\omega_l}$ が成立することから，フーリエスペクトルの計算上に干渉現象が起こる．これをエイリアシングと呼ぶ．この誤差は，探索曲線を N 等分に離散化したことで起こる．

特性周波数 $\omega_i(i=1,2,\cdots,n)$ が次式

$$\sum_{i=1}^{n} b_i\omega_i\neq jN,\ b\in Z,\ j\in Z \tag{25}$$

を満足するときに，$\sum_{i=1}^{n}|b_i|\leq M+1$ が成立すれば，$\omega_i(i=1,2,\cdots,n)$ の M 次ハーモニックスまでにエイリアシングが起こらないことになる．(22)と(23)式に基づく Θ_n と d_n の値で求められた $\omega_i(i=1,2,\cdots,n)$ は4次ハーモニックスまでのエイリアシングの影響を排除できる $(M=4)$．また，サンプルサイズ N については，Nyquist の定理から，Saltelli ら[6]は

$$N=2M\omega_{\max}+1 \tag{26}$$

を推奨している．

2.3 変換関数 $x_i(s)=G_i(\sin\omega_i s)$ の決定

すべての入力変数 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$ に対して，変換関数 $G_i(\sin\omega_i s)(i=1,2,\cdots,n)$ を導入したことで，n 次元の入力変数空間が s の1次元のサンプル空間に変えられる．1次元変数を $s\in(-\pi,\pi)$ で変化させれば，探索曲線が $G_i(\sin\omega_i s)(i=1,2,\cdots,n)$ に沿って変化し，入力変数 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$ の確率分布 $p_i(x_i)$ に従って探索する．エルゴード性を満足するため，$G_i(\sin\omega_i s)(i=1,2,\cdots,n)$ は

$$\pi\sqrt{1-u^2}\,p_i(G_i(u))\frac{dG_i(u)}{du}=1 \tag{26}$$

を満足する必要がある[4]．ここに，$G_i(0)=0,\ u=\sin(\omega_i s)$ である．(26)式から，

$$p_i(G_i(u))dG_i(u)=\frac{1}{\pi}\frac{du}{\sqrt{1-u^2}} \tag{27}$$

が得られる．(27)式の両辺を積分すると，以下となる．

$$\Gamma_i(G_i(u))=\frac{1}{\pi}\arcsin(u)+C \tag{28}$$

ここに Γ_i は確率分布 $p_i(x_i)$ の累積分布関数であり，C は積分常数である．Γ_i の逆関数を Γ_i^{-1} とすると，(28)式から G_i が求められる：

$$G_i(u)=\Gamma_i^{-1}\left(\frac{1}{\pi}\arcsin(u)+C\right) \tag{29}$$

(3)と(29)式から，x_i の変換関数が次式となる．

$$\begin{aligned}x_i&=G_i(\sin(\omega_i s))\\&=\Gamma_i^{-1}\left(\frac{1}{\pi}\arcsin[\sin(\omega_i s)])+C\right)\end{aligned} \tag{30}$$

x_i が一様分布に従うときに，(30)式から

$$x_i=G_i(\sin(\omega_i s))=\frac{1}{\pi}\arcsin[\sin(\omega_i s)]+C \tag{31}$$

が得られる．特に，x_i が $[0,1]$ 上の一様分布に従うとき，$C=0.5$ である．これは Saltelli ら[6]が提案した変換関数である．FAST 手法における各種変換関数のエルゴード性については，本特集の香田氏による第4論文を参照されたい．

2.4 $f(s)$ の対称性を利用した高速計算

(10)と(11)式でフーリエ係数 A_j と B_j を求める際に，積分区間を $(-\pi,\pi)$ とした．しかし，$f(s)$ が下記の対称性を持つので，積分区間を $(-\pi/2,\pi/2)$ に縮小でき，サンプルサイズを半減できることから，モデル $f(s)$ の計算量が従来の2分の1となる．すなわち，

$$\begin{aligned}&f(\pi-s)=f(s)\\&f(-\pi+s)=f(-s)\\&f\left(\frac{\pi}{2}+s\right)=f\left(\frac{\pi}{2}-s\right)\\&f\left(-\frac{\pi}{2}+s\right)=f\left(-\frac{\pi}{2}-s\right)\end{aligned} \tag{32}$$

ここに，

$$A_j=\begin{cases}0, & j\text{ が奇数}\\ \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{2}}(f(s)+f(-s))\cos(js)ds, & j\text{ が偶数}\end{cases} \tag{33}$$

$$B_j=\begin{cases}0, & j\text{ が偶数}\\ \dfrac{1}{\pi}\displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{2}}(f(s)+f(-s))\sin(js)ds, & j\text{ が奇数}\end{cases} \tag{34}$$

上記の A_j と B_j の効率的な計算方法の詳細は，Koda ら[8]を参照されたい．

3. 拡張 FAST 手法

出力変数 y の分散が次の式で表現できる．

$$V(y)=\sum_{i=1}^{n}V_i+\sum\sum_{1\leq i\leq j\leq n}V_{ij}+\cdots+V_{12\cdots n} \tag{35}$$

ここに，V_i は y の分散への入力変数 x_i 単独の寄与で，V_{ij} は x_i と x_j の相互作用による $V(y)$ への寄与，…，$V_{12\cdots n}$ はすべての入力変数の相互作用による $V(y)$ への寄与である[4]．

(35)式を $V(y)$ で割ると，次式となる．

$$1=\sum_{i=1}^{n} S_i+\sum\sum_{1\le i\le j\le n} S_{ij}+\cdots+S_{12\cdots n} \tag{36}$$

ここに，$S_i=\frac{V_i}{V(y)}$ は1次感度指標，$S_{ij}=\frac{V_{ij}}{V(y)}$ は2次感度指標，…，$S_{12\cdots n}=\frac{V_{12\cdots n}}{V(y)}$ は n 次感度指標と呼ぶ．第2節のFAST手法で求められたのは S_i である．S_{ij} 以上の高次指標に関する計算方法をCukierら[4]は導出していない．(35)式から分かるように，x_i の不確実さによる y の分散への寄与は，S_i 指標だけで示されるのではなく，$S_{ij},\cdots,S_{12\cdots n}$ 指標にも含まれている．

Sobol' [5]はHDMR（High Dimensional Model Representation）と呼ばれる定式化で高次指標に関する計算方法も導出した．さらに，Homma & Saltelli [9]はSobol'法を拡張して，x_i にかかわったすべての指標を一つにまとめ，総感度指標 S_{Ti} を提案し，またモンテカルロ法で S_{Ti} の計算手法も提案した．ある3つの入力変数を持つモデル $y=f(x_1, x_2, x_3)$ を例にとれば，x_1 の総感度指標 S_{T1} は，

$$S_{T1}=S_1+S_{12}+S_{13}+S_{123} \tag{37}$$

に等しい．なお，HDMRについては本特集の本間氏や香田氏による別稿を参照されたい．

FAST手法でも S_{Ti} を計算できるように，Saltelliら[6]は既存手法を拡張した．入力変数 x_i の S_{Ti} を求めるとしよう．まず，x_i にある特性周波数 ω_i を与えて，他のすべての入力変数 $x_1, x_2, \cdots, x_{i-1}, x_{i+1}, \cdots, x_n$ に同じ周波数 $\omega_{i'}$ を与える．このとき，$\omega_{i'}$ および高次周波数 $p\omega_{i'}$ のスペクトルの和 V_{-i} は，x_i を除いた他のすべての入力変数によるモデル出力変数 y の分散への寄与を表す．第2節で求めた $V(y)$ から V_{-i} を引くと，x_i による y の分散への寄与 V_{Ti} が以下のように求められる．

$$V_{Ti}=V(y)-V_{-i} \tag{38}$$

総感度指標は

$$S_{Ti}=\frac{V_{Ti}}{V(y)} \tag{39}$$

と定義される[9]．

前述の S_i を求めるのと同様に，特性周波数 ω_i と $\omega_{i'}$ を選択するときにも，フーリエスペクトルの計算に干渉が起こらないようにする必要がある．V_{-i} を求める際，高次周波数 $M\omega_{i'}$ まで計算する場合，$\omega_{i'}$ と ω_i の関係は以下となる．

$$\omega_{i'}=\frac{\omega_i}{2M} \tag{40}$$

また，$s\in(-\pi, \pi)$ 区間上でフーリエスペクトルを計算するときに，サンプルサイズ N は

$$N=2M\omega_i+1 \tag{41}$$

になる．

4. まとめ

本稿では，FAST手法の理論および計算方法について紹介した．FAST手法はモデルの入力変数に特性周波数を与えることにより，フーリエ変換を適用して入力変数の不確実さによるモデル出力変数の分散への寄与を評価できる．この手法は，入力変数の分布範囲内でのすべての値をグローバルに考慮でき，計算上も効率的である．これまでに，FAST手法は，化学動力学モデル[2]，放射性廃棄物モデル[10]，大気拡散モデル[11]などに適用され，モデルの評価や重要な因子の摘出などに役立っている．本解説により，OR分野でのFAST手法の新しい展開や適用に期待したい．

参考文献

[1] R. I. Cukier, C. M. Fortuin, K. E. Shuler, A. G. Petschek and J. H. Schaibly: "Study of the Sensitivity of Coupled Reaction Systems to Uncertainties in Rate Coefficients. I Theory," The Journal of Chemical Physics, 59: 3873-3878, 1973.

[2] J. H. Schaibly and K. E. Shuler: "Study of the Sensitivity of Coupled Reaction Systems to Uncertainties in Rate Coefficients. II Applications," The Journal of Chemical Physics, 59: 3979-3888, 1973.

[3] R. I. Cukier, J. H. Schaibly and K. E. Shuler: "Study of the Sensitivity of Couples Reaction Systems to Uncertainties in Rate Coefficients. III Analysis of the Approximations," The Journal of Chemical Physics, 63: 1140-1149, 1975.

[4] R. I. Cukier, H. B. Levine and K. E. Shuler: "Nonlinear Sensitivity Analysis of Multiparameter Model Systems," Journal of Computational Physics, 26: 1-42, 1978.

[5] I. M. Sobol': "Sensitivity Estimates for Nonlinear Mathematical Models," Matem Modelirovanie, 2: 112-118 (1990), [in Russian]. English Translation: Mathematical Modeling and Computational Experiment, 1: 407-414, 1993.

[6] A. Saltelli, S. Tarantola and K. P. -S. Chan: "A Quantitative Model-Independent Method for Global Sensitivity Analysis of Model Output," Tech-

nometrics, 41 : 39-56, 1999.
[7] H. Weyl : "Mean Motion," American Journal of Mathematics, 60 : 889-896, 1938.
[8] M. Koda, G. J. McRae and J. H. Seinfeld : "Automatic Sensitivity Analysis of Kinetic Mechanisms," International Journal of Chemical Kinetics, 11, 427-444, 1979.
[9] T. Homma and A. Saltelli : "Importance Measures in Global Sensitivity Analysis of Nonlinear Models," Reliability Engineering and System Safety, 52 : 1-17, 1996.
[10] Y. Lu and S. Mohanty : "Sensitivity Analysis of a Complex, Proposed Geologic Waste Disposal System Using the Fourier Amplitude Sensitivity Test Method," Reliability engineering and System Safety, 72 : 275-291, 2001.
[11] I. Kioutsioukis, S. Tarantola, A. Saltelli and D. Gatelli : "Uncertainty and Global Sensitivity Analysis of Road Transport Emission Estimates," Atmospheric Environment, 38 : 6609-6620, 2004.