

# 大域的最適化手法を用いた 水質モデルの自動検定に関する研究

Automatic Calibration of Water Quality Simulation Model  
Using Global Optimization Technique

西田 渉<sup>1</sup>・野口 正人<sup>2</sup>・Dimitri P. Solomatine<sup>3</sup>  
Wataru NISHIDA, Masato NOGUCHI and Dimitri P. SOLOMATINE

<sup>1</sup>正会員 博(工) 長崎大学助教授 工学部社会開発工学科 (〒852-8521 長崎県長崎市文教町1-14)

<sup>2</sup>フェロー 工博 長崎大学教授 工学部社会開発工学科 (〒852-8521 長崎県長崎市文教町1-14)

<sup>3</sup>Ph.D, Associate Professor, International Institute for Infrastructural, Hydraulic and Environmental Engineering IHE-Delft, Department of Hydroinformatics and Knowledge Management, (P.O.Box 3015, 2601 DA, Delft, The Netherlands)

For confirming the accuracy of predicted results and validity of modeling of natural phenomenon, the model calibration should be carefully done. Procedure for calibration, however, often executed manually, and it requires long times until obtaining the calculated results which have optimal agreements with the observed dataset.

In this study, adaptive cluster covering method which is one of global optimization technique was applied for the automatic calibration of water quality simulation model, and applicability of this optimization method was discussed. Although the test of model calibration was executed for limited datasets, calibration of water quality simulation model was processed well by this method. The calibrated model considerably simulates the tendency of water quality changes. Accordingly, it can be noted that this optimization method is applicable to automatic calibration of simulation model.

**Key Words :** global optimization technique, ACCO method, automatic model calibration, water quality simulation model

## 1. はじめに

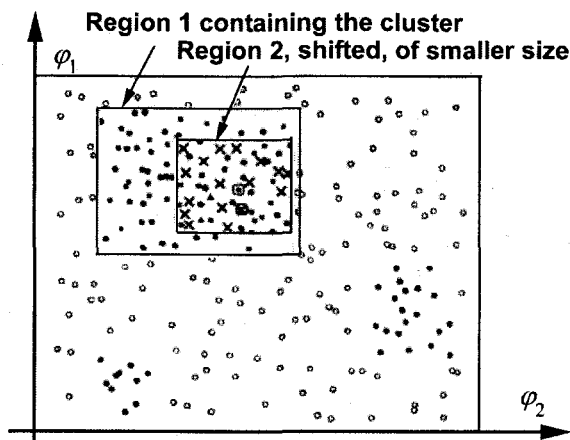
数値シミュレーションモデルは、実水域での量的、質的な変化を予測・評価する際に広く利用されており、研究上、実務上の問題解決に有用なツールの一つとなっている。一方で、シミュレーション結果の信頼性と予測精度を高めるには、水域での物質の循環過程を適切にモデル化することと共に、モデルを十分に検定しておくことが必要とされる。数値シミュレーションモデルの検定、すなわち、モデルパラメータの同定については、計算結果と実測結果との差で定義されるエラーを単峰性に分布すると仮定した上で、手動で試行錯誤的になされることが多く、また、推定されたパラメータの値は、感度解析することで計算結果に与える影響が調査されるにすぎない。しかしながら、エラーの分布については、パラメータが実際に変化し得る範囲内で、単峰性となる保証はなく、エラーを最小化するパラメータ値を推定することは容易なことではない。

ところで、モデルパラメータを同定する手続きは、ある制約条件の下で、観測結果と計算結果との差を最小化させることに相当し、最適化問題の一つと見なすことができる。これまでに同様の考え方で数値シミュレーションモデルを検定した例があり、降雨一流出モデル<sup>1-3)</sup>や地下水流モデル<sup>4)</sup>への適用が試みられている。

本研究では、著者らがこれまでに開発してきた水質モデルの検定を例に取り上げて、大域的最適化手法の一つであるAdaptive Cluster Covering Methodによる検定を試み、この手法の水質モデルの自動検定への適用性を検討した。

## 2. 最適化手法

先に述べた数値シミュレーションモデルの検定手続きを数理的に定式化すれば、各モデルパラメータを決定変数 $\varphi$  ( $\varphi_j, j=1, 2, \dots, J; J$ : パラメータの総数),  $\varphi_j$  が実際上とり得る範囲を上下限値の制約条件  $\Phi$  ( $\varphi_j^l < \varphi_j$



- initial population
- 'good' points grouped into three clusters
- points generated at regional iteration 1
- 'best' point in region 1, around which region 2 is formed
- × points generated at regional iteration 2
- 'best' point in region 2, around which region 3 will be formed

図-1 ACCO手法による最適解の探索<sup>9)</sup>

(この例では決定変数は2個であり、試行点はランダムに抽出されている)

$\langle \phi_j \rangle$ とした上で、エラーを表す目的関数  $f(\phi_j)$ を最小化すること、

$$\min_{\phi} f(\phi) \quad \text{subject to } \phi \in \Phi \quad (1)$$

に相当する。

この制約付き最適化問題を解くにあたっては、同定されるモデルパラメータの数が多いこと、関数  $f(\phi_j)$  が実行可能領域で連続的に変化するとは限らないこと、等の理由から、大域的最適化手法を適用せねばならないようである。現在、Genetic Algorithm (GA), Evolution Strategy (ES) といった興味深い手法が様々な工学上の問題の解決に応用されてきている。ここでは、Solomatine によって提案され、他の手法との比較によってその有用性が示された Adaptive cluster covering method (ACCO 手法)<sup>5), 6)</sup>を用いることとした。

ACCO手法は、通常考えられ得る探索の思考過程によって構成されており、基本的に以下の4つの考え方によって成立している。

- I) Clustering: 各点間の距離に応じた探索点のクラスタリング、そして各クラスターに対する大域的探索の実施
- II) Covering shrinking sub-regions: 試行点の抽出と目的関数の評価
- III) Adaptation: 目的関数の値に応じた探索領域の移動と絞込み
- IV) Periodic randomization: 試行点がランダムに抽出される際に最適解付近でのクラスタリング失敗を防止するために試行母集団を再抽出

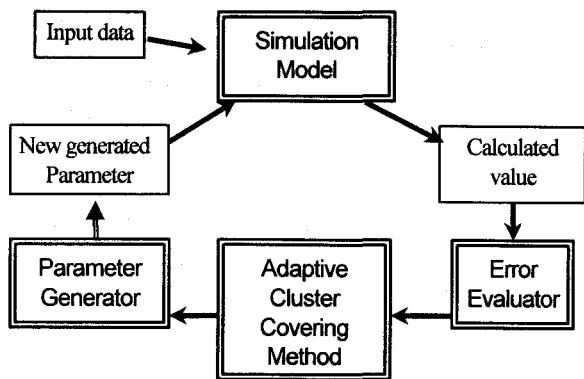


図-2 パラメータ同定の流れ

ACCO手法による最適解の探索の様子を具体的に図示すると、図-1に示されるとおりであり、図-2にはパラメータの同定手続きの流れが示されている。すなわち、各パラメータの定義域を与えて探索可能領域を決定し、この領域から規則的に、またはランダムに抽出された一定個数のパラメータセットを用いてシミュレーションが実施される。モデルの適合性は、算出されたエラー値を比較しながら評価される。ここで、単純には、適合性の良いパラメータセットの周辺にクラスターを形成させ、探索を続行すれば良いが、局所的な最小解に収束してしまう危険性を回避するために、エラーの分布を考慮しながら探索領域に幾つかのクラスターを形成させ、各クラスターで再び試行点を抽出して適合性が評価される。これら一連の手続きが、収束判定の条件または計算停止の条件を満足するまで継続される。

以下に示される水質モデルのパラメータの同定計算では、試行点が探索可能領域からランダムに抽出された。また、最終的な最適解の探索に従来の Local Search 手法は導入されておらず、全て ACCO 手法のみが適用されている。モデルの適合性については、エラーの二乗値の総和 (SE) を用いて評価された。ただ、本研究の場合、複数の水質指標に関するエラーを同時に評価する必要があるため、実際には多目的最適化問題となっている。そのため、ここでは、次式に示されるように、観測結果に対する重みと共に、水質指標ごとの重みを適合性の評価式に導入することにした。

$$SE = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M w_{ind,n} w_{obs,m} |OBS_{m,n} - CAL_{m,n}|^2 \quad (2)$$

ここで、 $N$ : 水質指標の総数、 $M$ : 観測結果の総数、 $w_{ind,n}$ : 水質指標  $n$  に対する重み係数、 $w_{obs,m}$ :  $m$  番目の観測結果に対する重み、 $OBS_{m,n}$ ,  $CAL_{m,n}$ : 観測結果、計算結果、である。

### 3. 水質モデルの概要

検定の対象として取り上げられた水質モデルは、著者がこれまでに諫早湾調整池での水質の変化機構を解析

するために開発してきた浮遊懸濁物質(SS)とリンの変化に関するモデルである<sup>7)</sup>。

ここで、水中のSSの濃度は、移流と拡散、河川からの供給をはじめとして、水底からの再懸濁、沈降によって変化するものとされた。リンについては、有機態成分(OP)、無機態成分(IP)が、それぞれ懸濁態物質、溶存態物質として取り扱われている。水中と底質との間の収支として、OPの沈降とIPの溶出とが考慮された。IPの溶出量は、流れの状態に応じて溶出速度が変化するものとされている。また、調整池では、SSの濃度が極めて高くなることが観測されていることから、SSの増加による透過日射量は、減衰係数 $k_e$ に応じてBerr-Lambert則に従って減少するものとされた。

各物質の収支式は、式(3)から(5)のとおりである。

$$Vol \cdot \frac{\partial SS}{\partial t} = F_{SS} + \lambda \cdot Area - w_{SS} \cdot SS \cdot Area \quad (3)$$

$$Vol \cdot \frac{\partial OP}{\partial t} = F_{OP} + R \cdot \gamma_{chl-p} \cdot \alpha \cdot Chl \cdot Vol - k \cdot OP \cdot Vol - w_{OP} \cdot OP \cdot Area \quad (4)$$

$$Vol \cdot \frac{\partial IP}{\partial t} = F_{IP} - R \cdot \gamma_{chl-p} \cdot \alpha \cdot Chl \cdot Vol + k \cdot OP \cdot Vol + \beta \cdot Area \quad (5)$$

ここに、 $Vol$ :水の体積、 $F_X$ :移流・拡散量、 $Area$ :ボックスの水底面積、 $\lambda$ :巻き上げフラックス、 $w_{SS}$ :SSの沈降速度、 $R$ :植物プランクトンのIP摂取速度、 $\alpha$ :増殖速度、 $k$ :分解速度、 $w_{OP}$ :OPの沈降速度、 $\beta$ :溶出速度、である。

さらに、巻き上げフラックスは、Pick-up rateの式に準じた形で算出され、SSの沈降速度については、流速の増加に応じて減少するものとされている。

$$\lambda = (\sigma v_s / a_s) \cdot \lambda_0 \cdot \tau_* (1 - 0.5 \tau_* / \tau_w)^{2.9} \quad (6)$$

$$w_{SS} = w_{SS0} \cdot \exp(-A_I \cdot U^2) \quad (7)$$

増殖速度、溶出速度は、以下のとおりに評価された。

$$\alpha = \alpha_0 \cdot f(IP) \cdot f(I) \cdot f(T) \quad (8)$$

$$\beta = (C_{SP} \cdot \sigma v_s / a_s) \cdot \beta_0 \cdot \tau_* (1 - 0.5 \tau_* / \tau_w)^{2.9} \quad (9)$$

$$f(T) = \{T / T_{opt} \cdot \exp(1 - T / T_{opt})\}^2 \quad (10)$$

ここに、 $\sigma$ ,  $v_s$ ,  $a_s$ :土粒子の密度、体積、断面積、 $\lambda_0$ :土粒子の巻き上げに関する係数、 $\tau_*$ :無次元摩擦応力、 $w_{SS0}$ :沈降速度、 $A_I$ :沈降速度に関わる定数、 $\tau_{cs}$ :土粒子の移動限界時の無次元摩擦応力、 $U$ :流速、 $\alpha_0$ :増殖速度、 $C_{SP}$ :底質中のリン濃度、 $\beta_0$ :リンの溶出に関わる係数、 $T_{opt}$ :最適水温、である。また、 $f(IP)$ 及び $f(I)$ は、Michaelis-Menten型の式で評価しており、 $f(IP) = IP / (IP + K_p)$ 、 $f(I) = I / (I + K_I)$ とされた。 $K_p$ ,  $K_I$ はリン並びに日射量の半飽和定数である。

計算対象水域は諫早湾調整池であり、計算で調整池は、鉛直方向に単層として取り扱われた。また、水平方向には、図-3に示されるように9つの水域に分割された。隣り合う水域間の移流量は、2次元平面流モデルによる

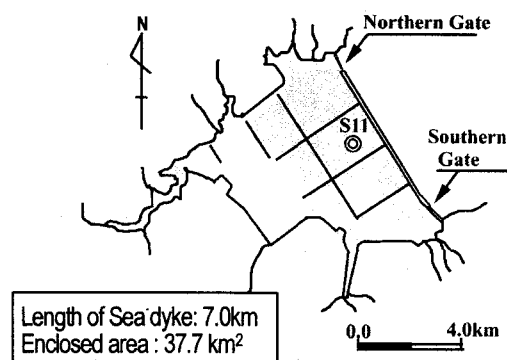


図-3 調整池の分割とS11地点の位置

表-1 初期制約条件

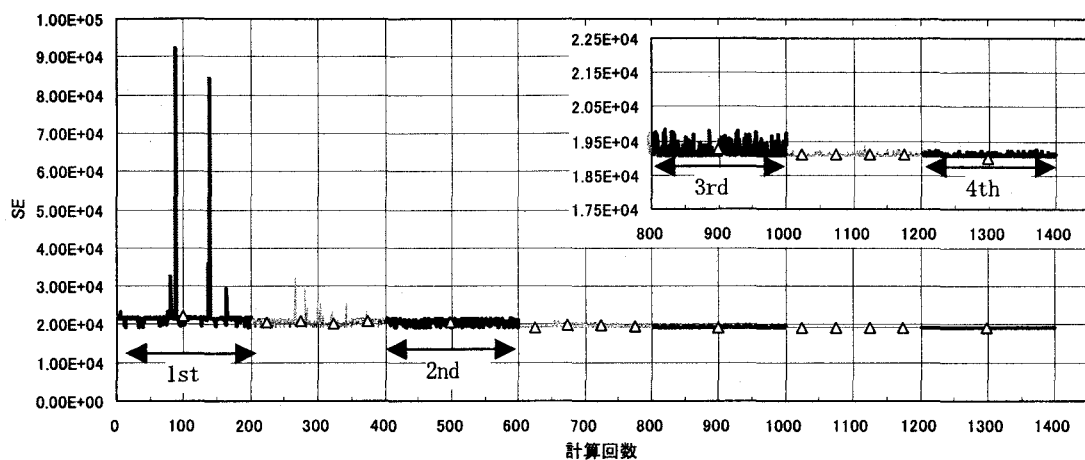
|       | $\phi_j^l$ (下限) | $\phi_j$         | $\phi_j^u$ (上限) |
|-------|-----------------|------------------|-----------------|
| SSモデル | 0.0001          | $\lambda_0$      | 0.01            |
|       | 0.00001         | $w_{SS}(m/s)$    | 0.001           |
|       | 0.0000          | $A_I$            | 0.0001          |
| リンモデル | 0.5             | $\alpha_0 (1/d)$ | 2.0             |
|       | 0.005           | $K_p(mg/l)$      | 0.05            |
|       | 0.02            | $k_e$            | 0.75            |
|       | 0.002           | $w_{OP} (1/d)$   | 0.02            |
|       | 0.0075          | $\beta_0 (1/s)$  | 0.025           |
|       | 0.05            | $R (1/d)$        | 2.00            |
|       | 0.0025          | $k (1/d)$        | 0.1             |

シミュレーション結果から流量の配分比が決められた。降雨による河川流量の変化は、3段のタンクモデルを使って評価される。そのため、本水質シミュレーションでは、諫早地区で実測された日降雨量と水温の実測値<sup>8),9)</sup>とが境界条件として与えられる。ただし、降雨の時間分布は一律なものとして取り扱われた。調整池への流入河川については、本明川をはじめとして、合計12本が計算条件に考慮されている。

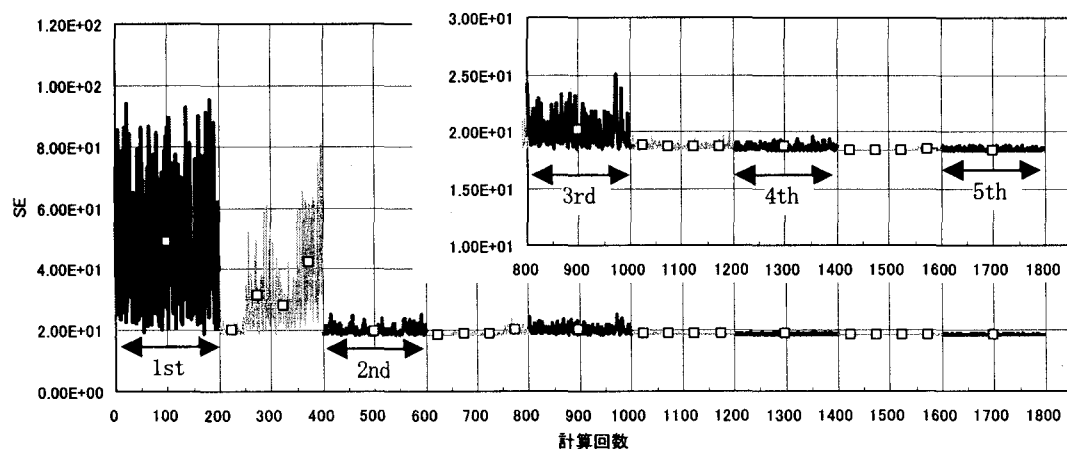
#### 4. ACCO手法による水質モデルの検定と考察

##### (1) 検定の計算条件

検定の対象とされる水質モデルの概要は、前章のとおりであり、SSモデルに含まれる3個、リンモデルの7個のパラメータが検定計算での決定変数となる。検定計算では、表-1に示される各変数の上・下限値が初期制約条件として与えられた。観測結果は、諫早干拓事務所によって報告された調整池のほぼ中央部(図-3に記されたS11地点)での実測値<sup>9)</sup>であり、1997年4月から2001年12月までの期間に計測されたSS及びIPとOPについて、それぞれ238個の値が検定用のデータとして準備された。潮止工事以降、潮受堤の内側では内部堤防の建設が進められており、上記の期間には、こうした地形の変化に応



(a) SSモデル



(b) リンモデル

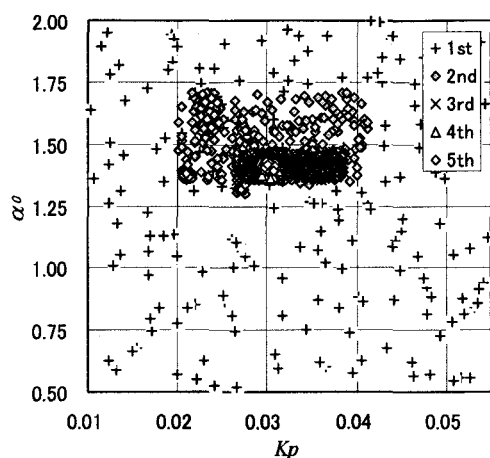
図-4 計算回数に対するエラーの変化

じて流況は変化したものと考えられるが、ここでは、図-3に示される状態を対象に実施された流れのシミュレーションの結果を用いて流れによる物質の移動量を評価している。

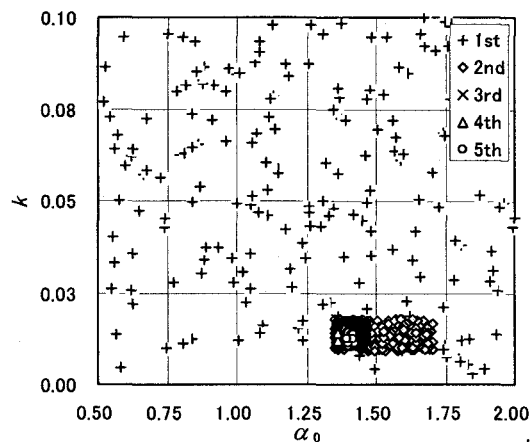
ACCO手法による検定では、実行可能領域から抽出される試行点の数 (Nsmp) と母集団の結果に応じて形成されるクラスターの数 (Mclr) とが与えられねばならない。数値シミュレーションモデルの検定計算は、最適化手法の導入によって自動化されるとはいえ、やはり多数回の試行計算が必要とされる。そのため、実用面からいえば、探索結果の精度が良いことと共に、最適解への収束が早いことが望まれる。ACCO手法では、各パラメータが探索領域からランダムに抽出され、エラーの評価結果に応じて実行可能領域に幾つかのクラスターを形成させる。こうした方法は、適合性の良いパラメータセットを効率的に探索するために導入された方法である。その一方で、探索領域から抽出する点の数によっては、最適解付近でクラスターを形成し損ねる可能性がある。また、Nsmpを少なくすることで、シミュレーションの実行回数を減らせそうであるが、探索領域における抽出点の密度が小さ

くなるために、検定計算の開始初期にクラスターの領域が必然的に大きくなってしまい、実行領域の絞込み回数が増すこともあった。検定計算に関する条件については、検定手法をメタ化させるなどして最良な計算条件を見出すことが必要であろうが、ここでは、以前に行った検定条件を参考に<sup>10), 11)</sup>、NsmpとMclrの各値を、それぞれ200点、4個としている。さらに、計算時間を節約するために、数値シミュレーションモデルは、大域的最適化に関するプログラムに対して外部プログラムとし、バックグラウンドで処理させることで検定の計算時間の短縮が図られている。

単一のモデルであれば、上に述べた条件で検定計算が可能である。しかし、今回、SSとリンのモデル検定を同時に実行したところ、リンモデルは、SSモデルに比べてパラメータの同定が進まない状況が発生した。これは、後で図示されるように、SSの平均的な濃度や実測された最高濃度が、IP並びにOPのそれらよりもオーダーが大きいため、エラーの評価結果にIP、OPの値が殆ど反映されないためと考えられた。そこで、SSのモデルを先に検定し、続いてリンモデルを検定する逐次的手法によって



(a)  $\alpha_0$ - $Kp$  空間



(b)  $\alpha_0$ - $k$  空間

図-5 探索領域の絞込み状況

検定が進められた。なお、検定計算の停止条件としては、最終的な値の探索に從來提案されているようなLocal Search手法を導入していないこともあり、全てのパラメータの探索領域が、初期に与えた領域の5%以下となった時に最終的な広域探索を実施し、その時に得られた結果の中でエラーを最小化するパラメータセットを解としている。

## (2) モデル検定と考察

図-4には、SSモデル及びリンモデルに対して行われた検定の過程の中で算出されたエラーの変化が示されている。各計算条件のもとで算出されたエラーの試行計算回数に伴う変化が示されている。これらの図には、広領域と小領域での探索で算出されたエラーの平均値が、記号“△”および“□”とで示されている。

これらの結果によれば、いずれのモデルの検定においても、エラーは計算開始の直後に比較的大きな値をとることが多く、変化の幅も大きい、その後、急速に減少することが分かる。エラーがこの様に変化するのは、実行領域からランダムに抽出された値を使ってパラメータセットが生成されるために、検定計算の初期段階には、シミュレーション結果の精度の良くないパラメータの組合せも生成されるためと考えられる。エラーの平均値については、評価回数が増加するに伴って、次第に減少することも図に示されている。二つの結果を比べると、SSモデルの検定の探索回数が、一回ではあるが、少なくなっており、決定されるモデルパラメータの数が少ないことが影響したものと考えられる。検定の進展に伴う探索領域の絞込みの様子を、リンモデルにおける  $\alpha_0$ - $Kp$ 、 $\alpha_0$ - $k$  空間での進展状況を例に示せば図-5のとおりである。ここに示される番号は、図-4に記入された領域の絞込み回数に相当する。検定計算の開始当初、各パラメータの値は初期に設定された全領域からランダムに抽出されている。その後、検定が進展するにつれて、探索

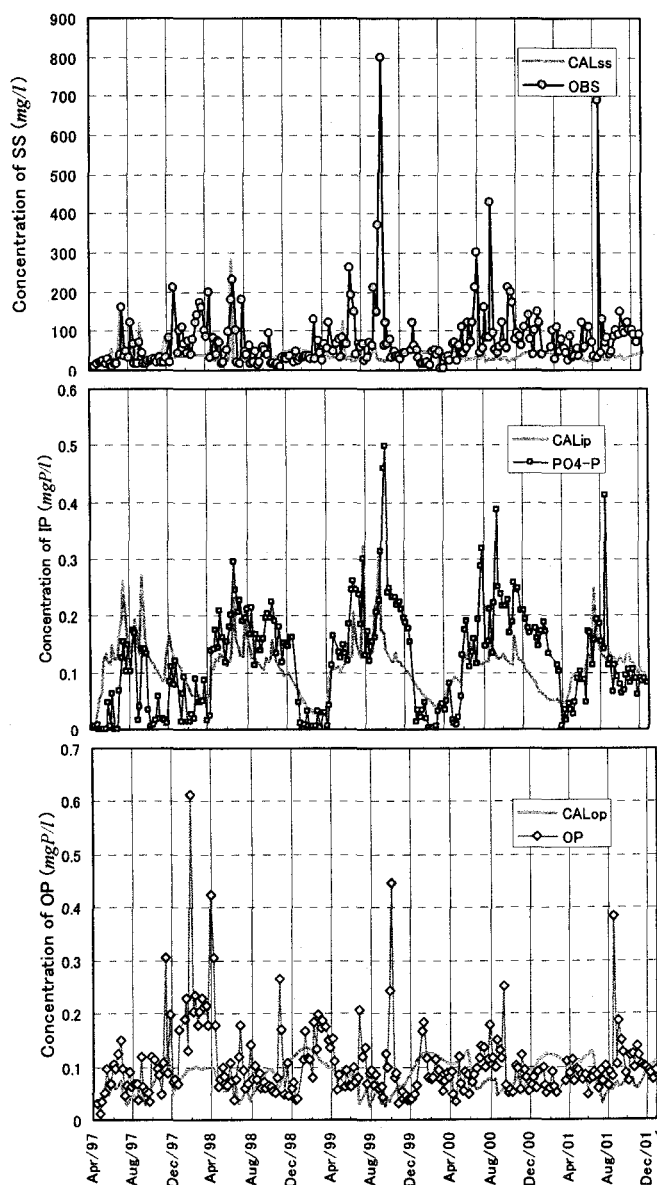


図-6 計算結果と実測結果  
(上: SS, 中: IP, 下OP)

空間は徐々に縮小されており、探索の手続きが計画されたとおりに進められたことが分かる。

図-6には、ACCO手法によって最終的に探索されたパラメータセットを使って算出されたSS, IP, OPの結果が実測結果と共に示されている。なお、モデルの検定では、各実測結果に見られる極端に高濃度となっているデータ、具体的には、SSで500mg/l, IPとOPで、それぞれ0.35mgP/l, 0.4mgP/lを超えるものについては、検定のノイズになることを避けるために棄却されている。また、IPについては、冬期の濃度の減少を再現できるよう観測結果の重みを $w_{obs}=7.0$ としている。シミュレーションモデルで予測された結果と実測結果とを比較すれば、豪雨後のSSの増加、およびIPとOPの時間変化の様子が、概ね再現されているようである。ただし、観測結果と予測結果の値は常に一致するものではなく、各物質の濃度は、若干低めに算出されている。また、OPの予測精度は、IPのそれよりも若干低いようにも見える。これは、先に述べられたように、今回の検定では、複数の水質指標のエラーが同時に評価され、結果的に多目的最適化問題となっており、パレート最適解として探索が進められたことが主な要因の一つと考えられる。

## 5. おわりに

冒頭に述べたとおり、数値シミュレーションモデルは各種の問題解決のための有用なツールとして利用されてきているが、モデルの堅牢性や信頼性、計算結果の精度をさらに高めるために、モデルパラメータは適切に評価されておかねばならない。

ここでは、著者らが開発してきた水質シミュレーションモデルを例に取り上げて、この水質モデルのパラメータの同定に大域的最適手法の一つであるACCO手法を適用して、自動検定することを試みた。結果については、限られた観測結果に対してのみの検討であったが、本最適化手法のシミュレーションモデルの自動検定に対する有効性は、ある程度示されたものと考えている。今後は、他のモデルへの適用を試みることでACCO手法の適用性をさらに調査すると共に、パラメータの抽出方法に関する検討、Local Search手法の導入による自動検定の効率化、等々に取り組みたいと考えている。また、他の最適化手法との比較をしながら最適化効率についても検討したいと考えている。

謝辞：本研究を遂行するにあたり、諫早湾締切干拓地域で実施されているモニタリング結果を参照させて戴いた。九州農政局、長崎県生活環境部環境政策課、諫早湾環境監視機構の関係各位に謝意を表します。また、R.K.Price

教授 (IHE Delft) からは、研究の遂行に関して有益なご助言を賜ると共に、暖かい励ましの言葉を頂戴した。また、J.A. Cunge (同)、V.Guinot (現：Montpellier II 大学) から数値計算に関する貴重なアドバイスを頂いた。ここに記して深甚なる謝意を表します。本研究の一部は、平成14年度日本学術振興会科学研究費若手研究(B)(代表者：西田渉, No.14750432)からの助成を受けて行われたことを記し、関係各位に深謝申し上げます。さらに、松下紘資氏を初めとする本学河川工学研究室諸氏には、データの整理等を手伝って戴いた。ここに謝意を表します。

## 参考文献

- 1) Wang, Q. J. : The genetic algorithm and its application to calibrating conceptual rainfall-runoff models, J. Water Resources Research, Vol. 27, No.9, pp.2467-2471, 1991.
- 2) Kuczera, G. : Efficient subspace probabilistic parameter optimization for catchment models, J. Water Resources Research, Vol.33, No.1 pp.177-185, 1997.
- 3) Nishimura, S. and Kojiri, T. : Real-time rainfall prediction using neural network and genetic algorithm with weather radar data, Proc of 10th Int'l. Congress of APD-IAHR, Vol.1, pp.204-211, 1996.
- 4) Solomatine, D.P. and Dibikey, Y.B. : Automatic calibration of groundwater models using global optimization techniques, J. Hydrological Sciences, 44 (6), pp.879-894, 1999
- 5) Solomatine, D.P. : The use of global random search methods for model calibration. Proc. XXVI th Int'l. Congress of IAHR, 1, pp.224-229, 1995.
- 6) Solomatine, D.P. : Two strategies of adaptive cluster covering with decent and their comparison to other algorithms. J. of Global Optimization 14 (1), 55-78, 1999.
- 7) 仁木将人, 西田渉, 野口正人, 橋本篤史 : 諫早調整池における水質変化の予測とその評価に関する研究, 水工学論文集, 第43巻, pp. 1007-1012, 1999.
- 8) 九州農政局諫早湾干拓事務所：環境モニタリング結果, 資料, pp. (I) 1-(I) 38, 2002.
- 9) 日本気象協会長崎支部 : 長崎県気象月報, 平成7年11月～平成13年12月, 1997-2001.
- 10) 西田渉, 野口正人, Solomatine, D.P., 土富玲 : Adaptive Cluster Covering Method を用いた水質モデルの検定に関する研究, 長崎大学工学部研究報告, 第33巻, 第59号, pp. 179-184, 2002.
- 11) Noguchi, M., Solomatine, D.P. and Nishida, W. : Calibration of water quality model by global optimization techniques, Proc. of 5th Int'l. Conf. on Hydroinformatics, Vol. 1, pp.464-469, 2002.

(2002. 9. 30受付)