

ANNを誤差評価手法としたACCOによる 数値モデルのパラメータ推定に関する研究

MODEL PARAMETER ESTIMATION BY GLOBAL OPTIMIZATION
ALGORITHM ACCO COMPLEMENTED BY AN ANN-BASED ERROR
ESTIMATOR

西田 渉¹・Dimitri P. SOLOMATINE²・野口 正人³・鈴木 誠二⁴
Wataru NISHIDA, Dimitri P. SOLOMATINE, Masato NOGUCHI and Seiji SUZUKI

¹正会員 博士(工) 長崎大学准教授 工学部社会開発工学科 (〒852-8521 長崎県長崎市文教町1-14)

²非会員 Ph.D. Associate Professor, Department of Hydroinformatics, UNESCO-IHE for Water Education (P.O.BOX 2601 DA, Delft, The Netherlands)

³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)

⁴正会員 博士(工) 長崎大学助教 工学部社会開発工学科 (〒852-8521 長崎県長崎市文教町1-14)

In order to properly simulate the natural phenomena using numerical model, model parameters have to be estimated by an appropriate manner. Authors regard the model calibration as global optimization problem and have applied global optimization techniques, such as adaptive cluster covering method (ACCO), genetic algorithm, and so on, to the estimation of model parameters. Here, new approach using ACCO and artificial neural network (ANN) is proposed for the model parameter estimation. ANN works as an error estimator in this proposed model (ANN-ACCO). From the comparison of results with ACCO and genetic algorithm (GA), it is shown that the optimization by ANN-ACCO is reasonably carried out with better accuracy and stability. Model parameter estimation was also successfully established by ANN-ACCO, then the some degree of its applicability to model calibration were shown.

Key Words : *global optimization, adaptive cluster covering method, artificial neural network, model parameter estimation*

1. はじめに

水域で観測される物理現象を評価する手法の一つとして数値シミュレーションは有用であるが、計算結果の信頼性を高め、堅牢な数値モデルを構築するには、モデルに含まれる各種パラメータを適切に評価しておく必要がある。このモデルパラメータ値の評価について、著者らは、パラメータを決定変数として、数値モデルから出力される計算結果の誤差を最小化させる最適化問題とみなし、これまでに大域的最適化手法の一つであるAdaptive Cluster Covering Method (ACCO手法)や遺伝的アルゴリズムによる評価・推定を試みてきている¹⁻⁴⁾。これらの適用結果から、予測精度に幾分かの違いはあるものの、いずれの手法においてもモデルパラメータの自動推定に対して、ある程度の有用性が示されたものと考えている。併せて、計算誤差の評価回数については、要求される精

度や最適化条件にも依存するが、両手法の間に多寡があることも示されており、この点においてACCO手法による方が有利であると考えている。

ところで、本研究で取り上げられた数値モデルのように、一回のシミュレーションに比較的長い計算時間を要するモデルを制御対象とする際には、ACCO手法といえども最終的な解を得るまでに、相応の時間を要することが予想される。後述されるように、この最適化手法は経験的な探索手続きを基本としたものであり、得られる解の精度は、探索点の数や形成クラスターの数などの探索条件に依存する傾向が見られる。そのため、ACCO手法の実際の適用にあたっては、探索の回数を抑えつつ、解の精度を保持させる工夫が必要となる。

近年、大域的探索手法を用いたモデル検定では、遺伝的アルゴリズム(GA)の応用において、最適解の探索を支援するものとしてニューラルネットワーク(ANN)の導入が試みられており、計算誤差の評価回数の低減と予測精

度の改善に対する有用性が報告されている^{5,6)}。これは、GAで算定された適合度に基づいて良好な個体を推定し、次世代の個体群の特性に反映させたことによるものであり、探索手続きの高度化によるこうした効果は、離散データに基づく探索方法を採用したACCO手法においても期待できる。そこで本研究では、ACCO手法にANNを導入した手法を新たに提案するとともに、この手法の数値モデルパラメータの推定への適用性を検討することとした。

2. ACCO手法へのANNの導入

ここでは、ACCO手法の基本的な大域的探索の概要について記し、ANNの導入とその構成を述べる。

(1) ACCO手法

この手法はSolomatine, D.P. によって提案された大域的最適化手法の一つであり^{7,8)}、解の探索は基本的に、

1. 初期に与えられる実行可能領域から試行点の抽出と目的関数の評価
2. 詳細探索のためのクラスターの形成
3. 最良の評価結果が得られたクラスター付近における実行可能領域の再設定

の処理によって進められる。これら1～3の手続きが、収束判定条件、または、計算停止条件を満たすまで繰り返し実行される。なお、クラスターの形成は、局所解への早期収束を回避するためであり、目的関数の評価結果に基づいて複数個が形成される。モデルの適合性について、今回は、計算結果と実測結果との差から算出した誤差の二乗値の総和(SE)で評価した。

$$SE = \sum_{m=1}^M w_m |OBS_m - CAL_m|^2 \quad (1)$$

ここに、 M ：実測結果の総数、 OBS_m 、 CAL_m ：実測結果と計算結果、 w_m ： m 番目の結果に対する重み、である。

(2) ANNの基本構成とACCO手法への導入

ACCO手法において探索点は基本的に実行可能領域からランダムに抽出されるが、本研究では、ANNを最適化の目的関数であるSEの分布状況の評価に用い、学習済みのANNから求められる極小値が探索候補点の抽出と実行可能領域の決定に利用された。ここで、ANNを導入したACCO手法の最適化手続きと、ANNの評価結果に関する具体的な処理方法を示すと、図-1,2のとおりである。

まず、ACCO手法によって抽出された決定変数の値と数値モデルの予測誤差に関するデータが準備される。これらのデータに基づいて決定変数と予測誤差の関係をANNに学習させることで、実行可能領域におけるSEの空間分布が評価される(図-2(a))。本研究でSEの計算に導入さ

れたANNはFeed Forward型のネットワークモデルであり、中間層に8個の処理ノードを配置した三層型モデルとしている。入力層の処理ノードには数値モデルに与えられたパラメータセットが入力され、出力ノードから目的関

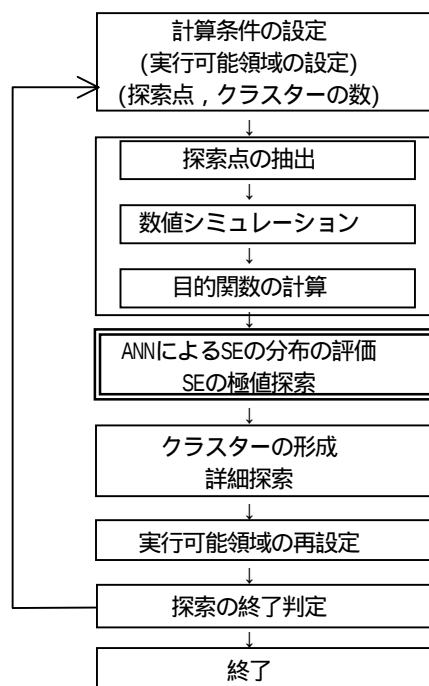
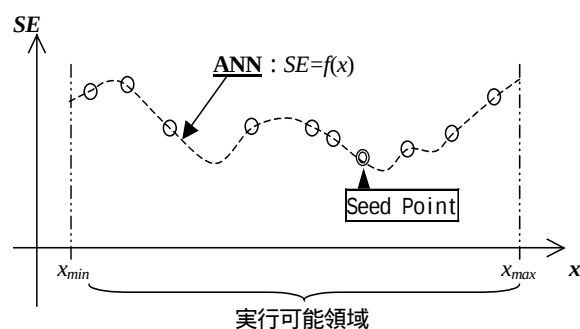
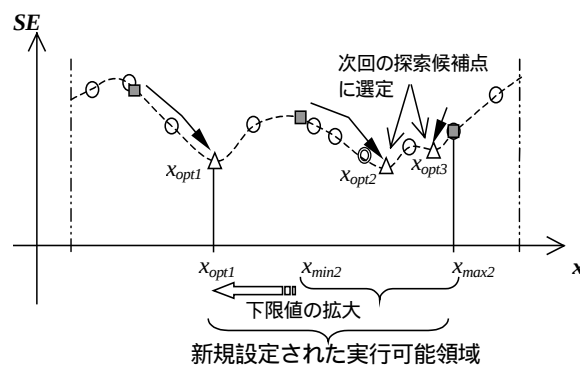


図-1 ANNを導入したACCO手法(ANN-ACCO手法)の処理手続き



(a) ANNによるSEの評価



■, △：最急降下法の初期探索点と算定された極値

(b) 極小値の探索と実行可能領域の設定

図-2 ANNによる処理の概要

(ここでは、簡単のため決定変数の数とクラスター数を一個として表記している)

数であるSEの結果が出力される。各々の処理ノードでは、ANNの適用で一般に用いられるシグモイド関数を用いて出力値を計算している。また、ANNの学習回数については、実際にモデルから算出された予測誤差の再現性とその学習に要した計算時間とを考慮して、相対誤差の総和が0.1以下に達した時に学習計算を停止させることにした。これを充足しない場合には、15,000回の学習で計算を停止させている。

つぎに、最適化計算において実行可能領域として定義される範囲を対象に、目的関数の極小値を与える決定変数の探索を行なわせた。この処理については、先に学習計算されたANNに最急降下法を適用することで求めることとした。なお、最急降下法による極小値の探索は、図-2(b)に描かれるように、続いて実行されるクラスタリングにおいて、領域の絞込み範囲の上・下限値の拡大に関する判断情報を取得すること、また、詳細探索の参照点を与えることを目的としている。なお、クラスター内の極小値の評価については、簡便ではあるが、各決定変数の探索対象区間を5区間に分割し、それらの中心を初期試行点とした50回の連続探索によって解を算定している。こうした処理で得られた結果が、その算出点からの距離が最も短いSeed Pointを持つクラスターに反映されることになる。

(3) 関数の極小値探索

ACCO手法にANNを導入した効果について、二種類の関数の極小値探索問題を取り上げて若干の検証を行なっておく。これ以降、ANNを実装したACCO手法をANN-ACCO手法と記す。今回計算対象とした関数は、Rosenbrok関数とHosaki関数であり、いずれも二個の決定変数を有している。また、前者には一個の最適解が、後者には局所解と大域解がそれぞれ一個ずつ存在している。

ここで、初期試行点の異なる40ケースの計算から得られた結果を示すと表-1のとおりである。なお、この表には、比較のためにANNを実装していないACCO手法の結果とSimple GA(SGA)による結果も併記されている。各手法の計算条件に関して、ANN-ACCO手法とACCO手法においては一回の試行点の抽出数を20個とし、クラスターの形成数を3個としている。SGAでは、一世代の個体数を20個とし、交叉確率と突然変異確率を0.75, 0.05としている。また世代交代の回数は100回とした。表に示された結果から、何れの関数に対してもACCO手法のみで良好な探索がなされることがわかる。ただし、設定された実行可能領域からの抽出点数が少ないうえ、初期試行点のとられ方によっては早期に解が収束することもあり、その結果として df_{ave} の値が幾分大きい。SGAについては、他の手法と同程度の精度で解の探索がなされることもあるが、今回の条件下では誤差の平均値は最も大きくなる結果となった。一方で、ANN-ACCO手法においては、いずれの関数に対しても算出誤差の平均値が他者よりも最も小

表-1 関数の極小値探索の結果

	関数名	算出誤差 $df= f_{opt}-f_{cal} $		関数の平均評価回数
		平均値 df_{ave}	最小値 df_{min}	
ANN-ACCO	Rosenbrok	0.0382	3.44×10^{-6}	498
ACCO		0.1249	2.81×10^{-5}	498
SGA		0.4556	5.83×10^{-4}	2000
ANN-ACCO	Hosaki	0.6643	0.6542	388
ACCO		0.6885	0.6542	446
SGA		0.7556	0.6545	2000

さくなっている。これは、比較的安定して極小解の探索が進められたことを意味しており、ANNを探索手続きに導入した効果であるといえる。関数の評価回数はACCO手法のみと同じか、それよりも少なく済んでいるが、評価回数に応じて誤差が改善されない結果も散見された。これは、最適解の見逃しを防ぐことを目的として、ANNの評価結果を実行可能領域の拡大に反映させたことが主な要因と考えられ、ANNの評価結果の反映方法を再考するなど、評価回数の軽減対策を引き続き検討しなければならないと考えている。

3. 数値モデルの概要と計算条件

前の章でANNの導入の効果を調べるために関数の極小値探索に関して検討したが、ここでは、実際の水工学分野への適用として、諫早湾調整池で実施された短期開門調査時の塩化物イオンの変化に関する数値モデルを取り上げる。

モデルは、これまで著者らが開発してきた三次元レベルモデルであり^{1,9)}、流体運動を支配する基礎方程式として、連続方程式と運動方程式、塩化物イオンの収支式が取り上げられている。流体の密度は塩化物イオンの関数とされた。各基礎式に含まれる渦動粘性係数、乱流拡散係数について、水平方向成分は、それぞれPrandtlの混合距離モデル、Richardsonの4/3乗則によって評価された。鉛直方向成分については、Munk and Anderson 型のモデルで評価され、Richardson数の関数とされている¹⁰⁾。水底面での摩擦応力には、Manning則が適用された。各基礎方程式は、差分格子にStaggered 格子系を採用した上で、陽形式の有限差分法によって離散化されており、空間差分にはDoner Cell法が、時間軸の差分にはLeap-Frog法が適用されている。

計算対象領域である諫早湾調整池の概要は図-3のとおりである。数値モデルの適用にあたり、この領域は、水平方向に $\Delta x=\Delta y=200\text{m}$ の差分格子に分割された。鉛直方向については、調整池の水位は排水時にT.P. -1.2m程度まで低下すること、また、排水門開口部からの海水の導

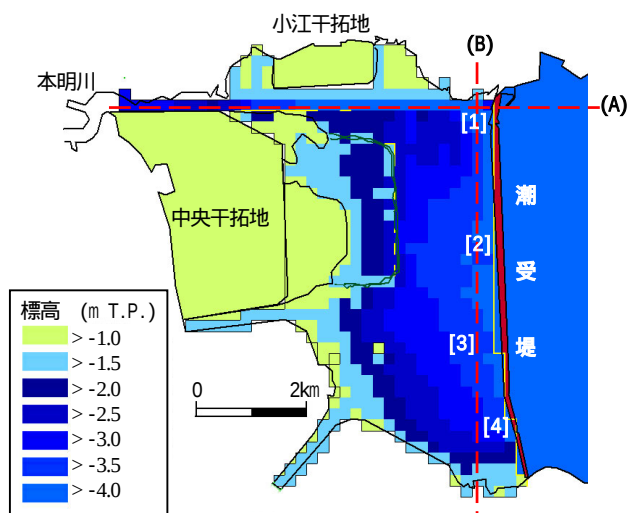


図-3 諫早湾調整池の概要図

表-2 モデルパラメータの初期設定値

	下限値(x_i^{min})	上限値(x_i^{max})
l_h (m)	0.03 Δ	0.50 Δ
l_v (m)	0.03dz	0.50dz
n (sec/m ^{1/3})	0.01	0.04

水と調整池からの排水を適切に表現できるよう基準面をT.P. -1.5mとした上で、それ以深を一様の層厚(dz=0.25m)に分割された。中央干拓地前面の潜堤状のマウンドは不透水性のThin damとして表現している。時間差分間隔は計算の安定性を考慮してdt=2.0secとされた。流入河川として本明川をはじめとした10本の河川が考慮され、各河川の流量が河口に相当する格子に横流入成分として与えられた。

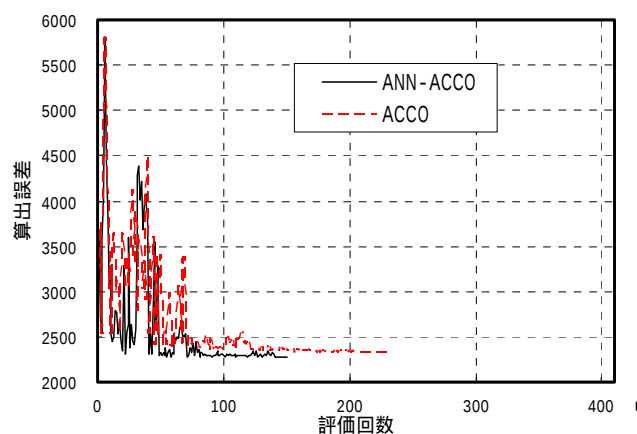
つぎに数値モデルの計算条件を述べる。計算結果との比較項目は、平成14年に実施された短期開門調査において、図-3の[1]～[4]の各地点で測定された塩化物イオンの濃度である¹²⁾。なお、この開門調査については、平成14年4月24日から同年5月20日までの期間に海水の導水および貯留水の排水がなされたが、今回はこの内の開門調査開始から6日間を計算対象とし、4月29日の結果をモデルとの比較用の実測結果とした。この期間に限ったのは、一回のシミュレーションに相応の計算時間(PCによる計算で50分程度)を要すること、また、この期日以降に調整池流域で降雨が観測されており、流入河川の流量等、境界条件の設定に関する不確実性が計算結果に与える影響を可能な限り排除したかったことが理由である。潮受堤の北部・南部排水門からの導水・排水量については、モニタリング報告の実績量を参考に時系列データとして与えた。最適化問題の決定変数となるモデルパラメータは、水平方向並びに鉛直方向の混合距離モデルの混合長に相当する係数(l_h , l_v)とManningの粗度係数(n)の三種類である。なお、粗度係数に関しては、計算領域に一樣に分布するものとしている。計算の初期に与えられ

た各パラメータの上・下限値は表-2に記されるとおりである。

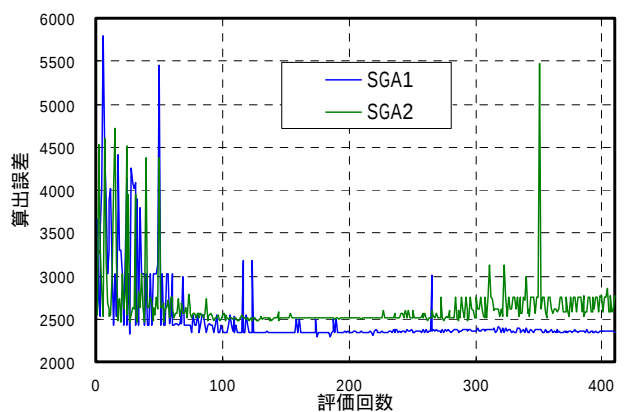
4. 計算結果とその考察

計算の進行に伴う算出誤差の変化を示すと図-4のとおりである。ここで、ANN-ACCO手法とACCO手法の探索点、SGAの個体数は10個としている。また、算出誤差の評価に関しては式(1)を用いたが、 w_m については、塩化物イオンの鉛直分布を計算結果との比較対象としたことから、この鉛直方向の勾配の再現率が与えられた。なお、SGAに関しては、初期の染色体情報の異なる二種類の計算結果が示されている。

ANN-ACCO手法とACCO手法から得られた計算結果について、各パラメータ値が実行可能領域からランダムに抽出されていることもあり、計算開始からしばらくの間、算出誤差は大きな幅で分布しているが、最適化計算の進行に応じた領域の絞込みがなされることで、ある一定値に収束することがわかる。ただし、最終的な解を得るまでに実行されたシミュレーションの回数は、ANN-ACCO手法で150回であり、ACCO手法では230回であった。また、計算終了時の算出誤差は2278.7と2332.6となっており、

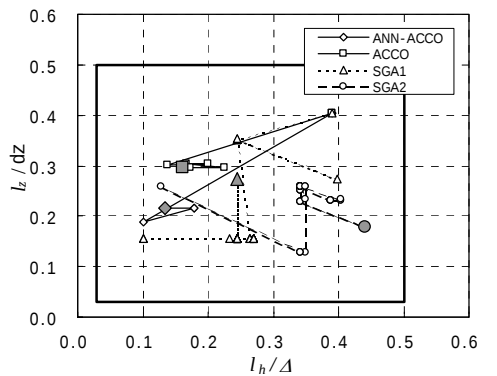


(a) ANN-ACCO と ACCOのみの結果

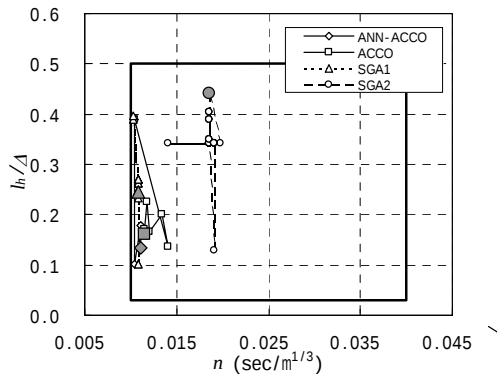


(b) SGAの結果

図-4 計算の進行と算出誤差の変化



(a) 混合長の探索



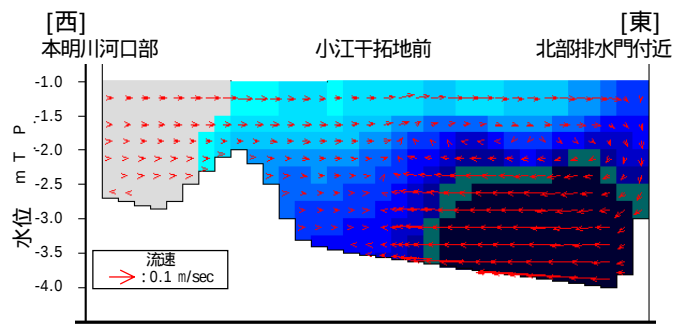
(b) 混合長とマンニングの粗度係数の探索

図-5 モデルパラメータの探索過程

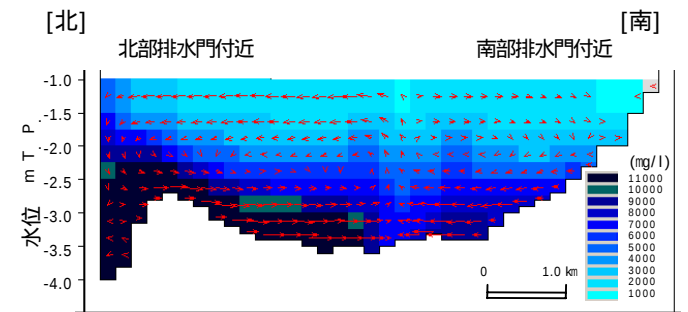
(太線は各パラメータの初期設定範囲を表わす)

ANNを導入したことでシミュレーション回数の低減と誤差の縮小がなされている。SGAについては、計算の初期に多様な個体が存在することから、ACCO手法と同様に算出誤差の分布幅が大きい。この分布幅は評価回数が約120回を越える頃から小さくなるものの、SGA2の計算結果については、突然変異等の遺伝オペレータによって異質な個体が生成されたことで再び大きくなる。SGAの解に関しては、算出誤差がSGA2のように振る舞うことがあるために解の収束判定が容易ではない。ただ今回の二つの計算では、一世代の平均適合度が安定する20回の世代交代を計算停止条件とし、それまでに得られた結果から判定して良いと思われる。結果的にSGA1とSGA2の算出誤差の最小値は、それぞれ2283.6、2461.5であった。

つぎに、評価されたモデルパラメータ値について、ACCO手法とANN-ACCO手法では領域の絞込み毎、SGAについては世代交代毎に最良の算出誤差を与える値のみを示すと図-5のとおりである。図示された各手法のマーカーの内、塗りつぶされたものが算出誤差を最小とするパラメータセットである。これらのパラメータセットは、各手法で評価された最小誤差の値からもわかるように、全く等しいわけではないが、 n の値が他と比べて大きいSGA2を除けば、 $n = 0.011 \sim 0.012 \text{ sec/m}^{1/3}$ 、 $l_h/\Delta = 0.13 \sim 0.25$ 、 $l_z/\Delta = 0.22 \sim 0.30$ の範囲に収まっている。なお、結果的ではあるが、今回の場合には粗度係数の値が下限

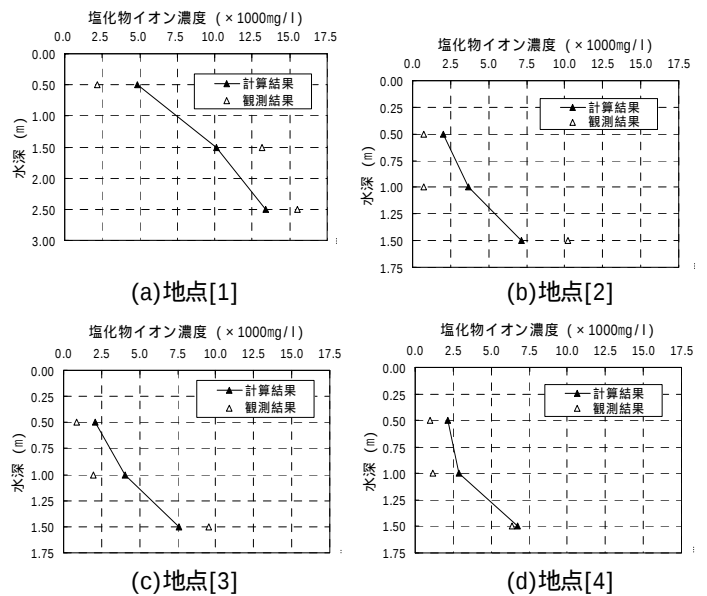


(a) 断面Aにおける空間分布



(b) 断面Bにおける空間分布

図-6 流速ベクトルと塩化物イオンの空間分布



(c) 地点[3]

(d) 地点[4]

図-7 塩化物イオンの鉛直分布の比較

値に近かったことから、計算条件として与える値を下げる必要性があったと考えられる。以上の結果から、最大勾配法等のLocal Searchを最後に実行する必要があるものの、モデルパラメータの推定に対するANN-ACCO手法の適用性の良さが示されたものと考えている。

ここで、ANN-ACCO手法で推定されたモデルパラメータを用いてシミュレーションされた流速ベクトルと塩化物イオンの空間分布を示すと図-6のとおりである。これらの結果は4月29日の13時に相当する結果であり、図-3に破線で記された断面Aと断面Bにおける鉛直分布である。調整池の塩化物イオンの濃度は、図に示された時刻までに合計5回の海水の導入が行なわれたこともあり、ほと

んどの地点で mg/l 以上となっている。塩化物イオンの空間分布は、排水門操作によって発生した流れに応じて大きく変化し、海水の導入時には排水門の開口部から流入した海水のために底層付近での濃度が高い。また、断面Bでは北部排水門と南部排水門からの導水によって生じた流れが会合する中央部付近において、底層の水俣が上層へ輸送される様子も示されている。

塩化物イオン濃度の鉛直分布について、計算結果と観測結果を示すと図-7のとおりである。なお、図には算出誤差の評価対象とした層の値のみが示されている。これらの結果から、誤差評価に空間的な変化率に関する重みが導入されたこともあり、計算結果においても濃度が上層で低く、底層で高くなる定性的な傾向は再現されているようである。一方で、個々の濃度を観測結果と比較すると、水深 1m までの濃度は $1,000 \sim 2,000\text{mg/l}$ 程度高めに、水底付近では低めに評価された。この差異に関しては、とくに鉛直方向の物質輸送のモデル化について再考する必要があることを指摘したものと考えている。実測結果によると水温成層が形成されているようであり、実際には、こうした水温の鉛直分布が調整池内の物質の流動に影響を与えていたことも予想される。計算精度の向上にあたっては水温の変化を考慮したモデル化を含めて、引き続き検討していきたい。

5. おわりに

本研究では、大域的最適化手法による数値モデルのパラメータ推定としてACCO手法を取り上げ、その最適解の探索手続きにANNを併用することで推定結果の向上を図った。

まず、ANNの導入による効果を検証するために、二種類の関数に対する極小値探索問題にANN-ACCO手法を適用した。提案手法の結果とACCO手法並びにSGAから得られた結果との比較から、算出された解の精度が改善されること、また、探索の安定性が向上することが示されたものと考えている。つぎに、数値モデルへの適用例として諫早湾調整池を対象とした塩化物イオンの変化予測モデルを取り上げた。この計算結果から、ANN-ACCO手法によってモデルパラメータの自動推定が適切に進められることが示された。ただ、今回のANNの最適化手法への導入に関しては実際に算出された結果を考慮しながらANNの設定条件を定めたが、目的関数の学習と極値の探索に相応の計算時間を要しており、今後、適用事例を増やしながら適切な設定方法を検討する必要があるものと考えている。本研究で対象とした数値モデルに関して述べておくと、調整池内の流動機構は水質の変化過程の解明や、昨年に発生した予期しない海水流入¹³⁾の影響の評価のためにも精度良く把握されておかなければならない。今後、先

に記した課題に取り組むことで予測精度の向上に努めたいと考えている。

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の関係各位に記して深謝申し上げます。また、河合裕吾氏を初めとする本学河川工学研究室諸氏には、データ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) Nishida, W., Solomatine, D.P. and Noguchi, M.: Numerical simulation of tidal current of Shimabara Bay using forecasted weather data, *Proc. of 7th Int'l Conf. on Hydroinformatics HIC2006*, Vol.3, pp.1755-1762, 2006.
- 2) 西田渉, 松下紘資, 野口正人, D. P. Solomatine: 遺伝的アルゴリズムによる水質モデルの検定とその適用性に関する研究, *水工学論文集*, 第48巻(2), pp.1321-1327, 2004.
- 3) 西田渉, 野口正人, D.P.Solomatine: 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, *水工学論文集*, 第47巻, pp.1267-1272, 2003.
- 4) Noguchi, M., Solomatine, D.P. and Nishida, W.: Calibration of water quality model by global optimization techniques, *Proc. 5th Int'l Conf. on Hydroinformatics*, Vol.1, Alden Press, pp.464-469, 2002.
- 5) Maskey, S., Dibike, Y.B., Jonoski, A. and Solomatine, D.P.: Groundwater model approximation with artificial neural network for selecting optimal pumping strategy for plume removal, *In: AI methods in Civil Engineering Applications*, pp. 67-80, 2000.
- 6) Khu, S.T., Liu, Y., Savic, D. and Madsen, H.: A fast calibration technique using a hybrid genetic algorithm -neural network approach: application to rainfall - runoff models -, *Proc. 6th Int'l Conf. on Hydroinformatics*, Vol.1, pp.945-952, 2004.
- 7) Solomatine, D.P.: Two strategies of adaptive cluster covering with decent and their comparison to other algorithms. *Jour. of Global Optimiz.*, 14 (1), pp.55-78, 1999.
- 8) Solomatine, D.P., Dibike, Y.B. and Kukuric, N.: Automatic calibration of groundwater models using global optimization techniques, *Hydrological Sciences Journal*, pp.879-894, 1999.
- 9) 西田渉, 野口正人, 松下紘資, 永田久夫: 諫早湾湾口部における物質の流動予測に関する研究, *長崎大学工学部研究報告*, 第33巻, 第61号, pp.123-128, 2003.
- 10) 平野敏行監修: 沿岸の環境圏, *フジテクノシステム*, pp.674-680, 1998.
- 11) 九州農政局諫早湾干拓事務所: 諫早湾からの新たな一歩, *パンフレット*, p.19, 2005.
- 12) 九州農政局: ホームページ資料, URL <http://www.maff-kyushu-nn.go.jp/>, 2006.
- 13) 朝日新聞, 2006年6月26日夕刊.

(2007.9.30受付)