第Ⅶ部門　　スパース同定の低次生態系モデルへの適用

大阪大学大学院工学研究科　学生員　○吉門　遼大
大阪大学大学院工学研究科　学生員　鹿島　千尋
大阪大学大学院工学研究科　正会員　中谷　祐介

1. はじめに

湖沼・沿岸海域の水質や物質循環の解析には，水域内の生物化学過程を表現した低次生態系モデル [1]が活用される．しかし取り扱う現象の環境変動に対する応答が複雑であることから，出力値には大きな不確実性が含まれている [2]．その要因の一つにモデル構造やモデル式（時間変化項），パラメータによって，出力値が大きく変化することが挙げられる．そのため，対象とする水域特性に適した設定を行う必要がある．

スパース同定 [3]は，時系列データから非線形のモデル式とパラメータを同定する手法である．本研究では低次生態系モデルにスパース同定を適用し，その適用性を評価した．

2. 研究手法

(1) スパース同定

本研究では，スパース同定手法である SINDy[3]を完全混合槽閉鎖系の低次生態系モデルに適用した．スパース同定では，同定するモデル式に必要最小限の項で構成されているというスパース性を仮定する．また，モデル式を特徴づける候補関数を要素に持つ行列であるライブラリ$\boldsymbol{\Theta}(\boldsymbol{X})$と，ライブラリから変数選択を行う係数行列$\boldsymbol{\Xi}$を導入する．ライブラリとスパース性を促進した係数行列を乗ずることで，対象とする現象の時系列データを少数の候補関数の線形結合で表現する．

(2) 学習データとテストデータの作成

低次生態系モデル（図-1）を用いて，水質状態変数の時系列データを学習データとして作成した．その際，状態変数の初期値の一部に乱数による摂動を与え，各状態変数について 50 セットの時系列データを作成した．また学習データと異なる初期値より，精度検証のためのテストデータを作成した．学習データ，テストデータともに，データ長さは 30 日間，低次生態系モデルのタイムステップおよび出力間隔は 120 秒とした．なお，本研究では水温は一定条件とし，光量のみの変動に対する水質応答を扱った．

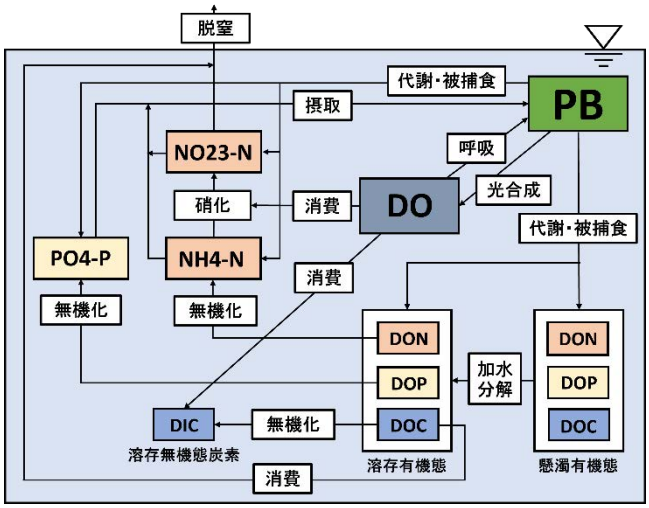

図-1　完全混合槽閉鎖系の低次生態系モデルの概念図

(3) 低次生態系モデルへの SINDy の適用

SINDy では正則化パラメータλによって同定結果が大きく変化する．そこで，各状態変数について複数のλを用いて SINDy を適用し，複数の同定結果を得た．同定結果による出力値とテストデータとの二乗平均平方根誤差（RMSE）を比較し，最適なλを決定した．さらに，最適なλによる同定結果について，同定されたモデル式の式形とパラメータの同定精度に基づいて，低次生態系モデルへの SINDy の適用性を評価した．

3. 結果

(1) 植物プランクトン（PB）

植物プランクトンの正しいモデル式は，PB の増殖と代謝・被捕食を考慮して次式のように表される．

$$\dot{PB} = 2.5PB \cdot f - 0.15PB \qquad (1)$$

ここで，fは外部環境要因による増殖制限項である．複数のλに対する同定結果と RMSE 及び最適なλにおけるパラメータ同定精度を表-1 に，同定結果による水質

Haruka YOSHIKADO, Chihiro KASHIMA and Yusuke NAKATANI
yoshikado_h@civil.eng.osaka-u.ac.jp

濃度の再現精度を図-2 に示す．$\lambda = 10^{-1}$以下で RMSE が最小となった．また式(1)と同様の式形のモデル式が同定され，パラメータの同定精度も良好であった．よって最適なλは10^{-1}以下であり，適用可能であった．

(2) 硝酸態窒素（NO23）

硝酸態窒素の正しいモデル式は，PB による摂取，硝化，脱窒を考慮して次式のように表される．

$$\dot{NO23} = 0.18PB \cdot f \cdot PN - 0.18PB + 0.070NH4 \cdot Nit - 0.933DOC \cdot Denit \quad (2)$$

ここでPN，Nit，$Denit$はそれぞれアンモニア態窒素の嗜好係数，硝化速度，脱窒速度である．複数のλに対する同定結果と RMSE 及び最適なλにおけるパラメータ同定精度を表-2 に，同定結果による水質濃度の再現精度を図-3 に示す．$\lambda = 10^{-2}$以下で式(2)と同様の式形のモデル式が同定され RMSE は最小になったが，パラメータ同定精度は大きく低下した．よって SINDy は硝酸態窒素には適用できないと考えられる．

(3) その他の水質状態変数

詳細は示さないが，有機物，その他の溶存無機態栄養塩のモデル式について，正しい式形と良好なパラメータ同定精度が得られた．よって適用可能であった．

4. 考察

硝酸態窒素を除く状態変数に対する同定結果は，式形，パラメータ同定精度ともに良好であった．これはスパース同定を適用することで，低次生態系モデルにおけるパラメータの不確実性を低減できる可能性を示唆している．一方，硝酸態窒素については，現時点では適用不可であった．これは硝酸態窒素のモデル式が非線形項のみで構成されていることが原因だと考えられ，非線形性が非常に強いモデル式ではスパース同定の適用性が低下すると考えられる．

5. まとめ

本研究では，低次生態系モデルにスパース同定を適用し，その適用性を評価した．硝酸態窒素を除く状態変数に対して適用可能であり，低次生態系モデルにおける生物化学パラメータの不確実性を低減できる可能性が示唆された．

参考文献

1) Cerco C and Cole T: Three-dimension00al eutrophication model of Chesapeake Bay., *Journal of Environmental Engineering*,1993.

2) 吉江直樹：栄養塩循環から高次栄養段階生態系までを取り扱う統合モデルの現状と課題, 沿岸海洋研究, 60(1),2022

3) Steven L. Brunton, Joshua L. Proctor and J. Nathan Kutz.: Discovering governing equation from data by sparse identification of nonlinear dynamical system., *PNAS*, Vol.357,2016.

謝辞：本研究の一部は JSPS 科研費 JP23KJ1430 の助成を受けて実施した．ここに記し，深く感謝の意を表する．

表-1 同定されたモデル式と最適なλにおけるパラメータ同定精度(PB)

λ	同定されたモデル式	RMSE
10^{1}	$\dot{PB} = 0$	0.204
10^{0}	$\dot{PB} = 1.9PB \cdot f$	1.741
10^{-10}~10^{-1}	$\dot{PB} = 2.3PB \cdot f - 0.16PB$	0.075

パラメータ	正解値	同定値	相対誤差[%]
最大増殖速度	2.5	2.3	8.0
代謝・被捕食速度	-0.15	-0.16	6.7

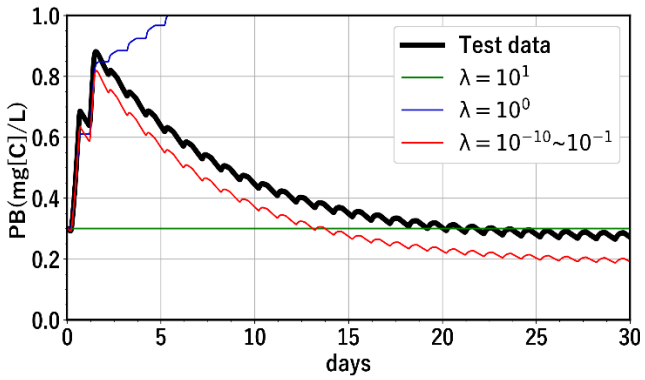

図-2 同定結果による PB 濃度変化の再現

表-2 同定されたモデル式と最適なλにおけるパラメータ同定精度(NO23)

λ	同定されたモデル式	RMSE
10^{-1}	$\dot{NO23} = 0.43PB \cdot f \cdot PN - 0.42PB \cdot f$	0.107
10^{-10}~10^{-2}	$\dot{NO23} = 0.42PB \cdot f \cdot PN - 0.42\,PB \cdot f + 0.069NH4 \cdot Nit + 0.388DOC \cdot Denit$	0.002

パラメータ	正解値	同定値	相対誤差[%]
PB の摂取速度 1	0.18	0.42	133
PB の摂取速度 2	-0.18	-0.42	133
硝化速度	0.070	0.069	1.4
脱窒速度	-0.933	0.388	142

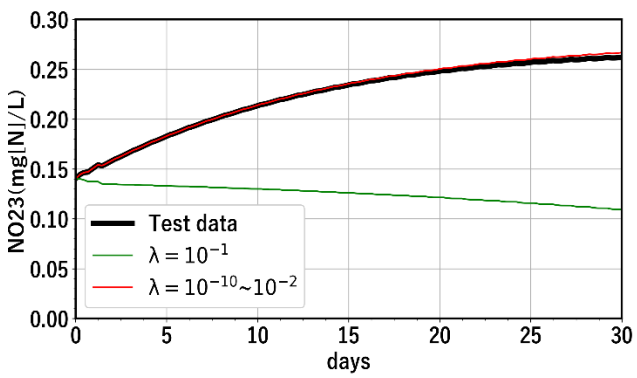

図-3 同定結果による NO23 濃度変化の再現