# モデルの最適係数探索法の改良と収束条件

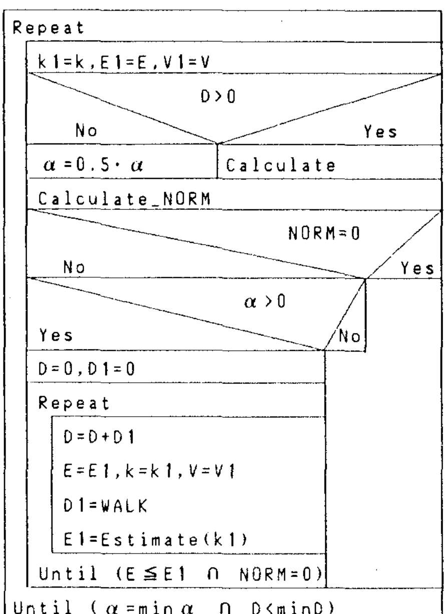
山口大学工学部　正　員　関根　雅彦
同上　学生員○永田有利雄
同上　正　員　浮田　正夫
同上　正　員　中西　弘

**1．はじめに**　近年の富栄養化問題に関連して河川における汚濁物質流下機構を解明するため、従来より、当研究室では、連続調査で得られた総合的な水質データから数理計画法を用いて河川内部の物質移動過程を推定することを試みており、用いた各々の基礎式[1]の一般化を図るため種々の改良を施してきた。本研究は用いた基礎式の各移動経路にかかる係数の値を探索するために昨年度まではNewton法を用いてきたが、これに代わり最急降下法を用いることにより、計算の簡略化と収束性の向上を計った。

**2．最急降下法の原理と改良**　係数探索法として、Newton法を用いたプログラムではパラメーター１つずつについて逐次Newton法を適用し計算させ最終的に全パラメーターについて値の変化が無くなる点を最適係数として取り扱ってきたが、パラメーターによっては、定義域内でNewton法の収束特性により振動するものもあった。そこで、目的関数ｆ上の点ｘｋ の近傍でｆを二次関数近似するNewton法より、点ｘｋ における一階微係数を利用し、収束性の保証された最急降下法を用いることにした。また、一つずつ係数探索するのではなく、各パラメーターを同時探索し一層精度を高めることを試みた。

今回用いた最急降下法のフローチャートを図１に示す。アルゴリズムは、（１)各パラメーターのVECTORを無次元化したものを合成する、（２)評価値が小さくなる方向に向かって進んでゆかせる、（３)計算後の評価値が計算前の評価値よりも悪くなれば元の点に戻り、（４)ステップ幅を小さくして、再び評価値計算を行い解を探索していく、というものである。停止条件は、前後評価値の差がなくなるか、または、VECTORのNORMが０になったとき停止するようにした。

**3．最急降下法に関する数値実験**　本研究で使用した最急降下法や昨年のNewton法によって最適係数値を探索する場合、求めた係数が真の解であるかどうかという疑問が残っていた。そこで、係数探索法による解の再現性を調らべることとして、まず、設定した係数値を満たす基本データを人為的に作成し、その基本データに対して係数の正解値と異なる値を初期値として係数を探索させ、元の正解係数列を再現できるか否かを調べることにより、最適係数探索法の妥当性を検討した。




D：歩幅，k：PARAMETER，V：方向VECTOR
α：STEP率，min：最小値
WALK：Dを変更する関数
ESTIMATE：モデルの評価値計算
図－１　最急降下法 Flow Chart

基本データの作成法は、式①、②、③を用いて行った。式中の係数A､B､Cを変化させ，表－１のような任意の変動（周期的変動）をもつ流量、水量、上流水質濃度および初期堆積量データを作成し、これを用いて水質シミュレーションモデルにより下流の水質濃度と堆積量を計算させる。この下流濃度を実測下流濃度と見立てて先に作成した上流濃度・流量データと組み合わせれば、このデータ列は最初に与えた係数列を解として持つことになる。データ数は１１種を作成し、各々について比較した。モデルのパラメータ値、つまり係数の解は全て0.5とした。

**(ａ)１つだけ係数を探索した場合**　パラメータのうち９つ中８つを固定して、１つだけを最急降下法を用いて探索させたところ、表－２に示すようにどのデータに対しても解とほとん

ど一致した。

（b）全パラメータを探索した場合　全パラメータをNewton法と比較して探索計算した結果を表－3に示す。最急降下法においてDATA1〜DATA3までERRORが起きているが、これは大型計算機の計算時間の時間制限を越えたためで計算時間を十分に取れば計算結果が得られるであろう。二つの方法を比べた場合、最急降下法の方が解の0．5に近く、解の再現性が良いと思われる。

（c）データの種類による収束性の比較　全く濃度変化の無いデータを作成し計算した場合、探索したパラメータの数が幾つであっても値が振動し収束しなかった。しかし、データ中の水質濃度に多少でも変動を与えた場合、収束がみられたこの事から、さらに変動の割合を微小にして計算を行った場合、収束するための限界条件が明らかになると思われる。

4．結論　可変パラメータを1として計算した場合、Newton法においても解に近い値が得られたが、精度（再現性）では最急降下法よりもやや劣る。そして、評価値はNewton法に対して最急降下法の方がオーダーで10桁以上小さく、良好な値が得られた。また、9つのパラメータを同時探索させたことにより逐次探索よりも計算時間が短縮でき、得られた係数解に対する再現性も向上した。理論的にパラメータ値が分かっている場合にはそれを代入してパラメータ数を減らすことにより、さらに信頼性が向上する。結論としてNewton法よりも最急降下法を用いた場合、計算時間の短縮、再現性が良好といった利点が得られた。また、最急降下法の収束性については実際に入力するデータの値によって変化することが明かとなり、収束条件の定式化には至らなかったものの入力データの性質により最適係数解が得られるか否かの判断が可能となることを示すことができた。

<<参考文献>>

(1)・・・・・・・・土木学会第42回年次学術講演概要集第2部 p.946〜947

$X=X0+dX\cdot N$ ・・・・・・・・①

(N:1〜NDAY)

$Q=A\cdot \mathrm{SIN}(\frac{\pi}{180}\cdot X-B)+C$ ・・②

$V=D\cdot Q^{0.6}$ ・・・・・・・③

表－1　基礎データ群一覧表

| | | Q | Cs | Cd | 位相差[rad] Q-Cs | Q-Cd |
|---|---|---|---|---|---|---|
| DATA1 | S.D. | 0.071 | 0.424 | 0.424 | π | 0 |
| | AV. | 1.000 | 1.100 | 1.200 | | |
| DATA2 | S.D. | 0.141 | 0.424 | 0.424 | π | 0 |
| | AV. | 1.000 | 1.100 | 1.200 | | |
| DATA3 | S.D. | 0.424 | 0.424 | 0.424 | π | 0 |
| | AV. | 1.000 | 1.100 | 1.200 | | |
| DATA4 | S.D. | 0.636 | 0.424 | 0.424 | π | 0 |
| | AV. | 0.999 | 1.100 | 1.200 | | |
| DATA5 | S.D. | 0.424 | 0.424 | 0.424 | π | 0 |
| | AV. | 0.700 | 1.100 | 1.200 | | |
| DATA6 | S.D. | 0.424 | 0.424 | 0.424 | π | 0 |
| | AV. | 1.300 | 1.100 | 1.200 | | |
| DATA7 | S.D. | 1.060 | 0.424 | 0.424 | π | 0 |
| | AV. | 1.599 | 1.100 | 1.200 | | |
| DATA8 | S.D. | 0.358 | 0.215 | 0.215 | − | − |
| | AV. | 0.516 | 0.310 | 0.310 | | |
| DATA9 | S.D. | 0.215 | 2.147 | 2.147 | − | − |
| | AV. | 0.310 | 3.098 | 3.098 | | |
| DATA10 | S.D. | 0.215 | 2.147 | 2.147 | − | − |
| | AV. | 0.310 | 3.098 | 3.098 | | |
| DATA11 | S.D. | 0.358 | 3.579 | 3.579 | − | − |
| | AV. | 0.516 | 5.163 | 5.163 | | |

表－2　可変パラメータ1の場合

| | DATA 8 | DATA 9 | DATA 10 | DATA 11 |
|---|---|---|---|---|
| Ksd | 5.000E-01 | 4.999E-01 | 4.994E-01 | 5.000E-01 |
| Estimate | 1.969E-10 | 1.187E-09 | 8.758E-08 | 7.678E-13 |
| Kds | 5.000E-01 | 5.000E-01 | 4.982E-01 | 4.986E-01 |
| | 1.940E-10 | 4.186E-11 | 4.191E-07 | 4.013E-08 |
| Ksa | 4.997E-01 | 4.992E-01 | 4.995E-01 | 4.997E-01 |
| | 1.567E-07 | 1.096E-06 | 4.149E-07 | 9.449E-08 |
| Kas | 4.988E-01 | 4.978E-01 | 5.000E-01 | 4.999E-01 |
| | 1.569E-06 | 1.088E-07 | 3.758E-08 | 6.857E-07 |
| Kda | 4.988E-01 | 4.996E-01 | 4.998E-01 | 4.998E-01 |
| | 1.870E-06 | 1.710E-07 | 3.264E-08 | 4.094E-08 |
| Kad | 5.000E-01 | 4.991E-01 | 4.999E-01 | 4.996E-01 |
| | 2.067E-09 | 9.403E-07 | 1.026E-08 | 2.156E-07 |
| Kso | 4.999E-01 | 4.999E-01 | 4.995E-01 | 4.999E-01 |
| | 3.466E-01 | 1.181E-10 | 2.360E-08 | 1.534E-10 |
| Kdo | 5.000E-01 | 4.999E-01 | 4.996E-01 | 5.000E-01 |
| | 2.150E-10 | 1.550E-10 | 9.658E-09 | 1.661E-11 |
| Kao | 5.000E-01 | 5.000E-01 | 4.998E-01 | 4.985E-01 |
| | 5.546E-10 | 3.460E-10 | 6.418E-08 | 2.584E-06 |

表－3　最急降下法とNewton法の比較（可変パラメータ9の場合）

最急降下法

| | sd | ds | sa | as | da | ad | s0 | d0 | a0 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 初期値 | 0.001 | 0.999 | 0.001 | 0.999 | 0.001 | 0.999 | 0.001 | 0.001 | 0.001 |
| DATA 1 | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR |
| DATA 2 | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR |
| DATA 3 | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR |
| DATA 4 | 0.520 | 0.669 | 0.516 | 0.682 | 0.502 | 0.441 | 0.536 | 0.839 | 0.528 |
| DATA 5 | 0.600 | 0.246 | 0.509 | 0.652 | 0.507 | 0.519 | 0.294 | 0.880 | 0.460 |
| DATA 6 | 0.524 | 0.629 | 0.501 | 0.695 | 0.497 | 0.470 | 0.401 | 0.244 | 0.478 |
| DATA 7 | 0.461 | 0.660 | 0.552 | 0.750 | 0.509 | 0.494 | 0.378 | 0.816 | 0.495 |

Newton法

| | sd | ds | sa | as | da | ad | s0 | d0 | a0 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 初期値 | 0.001 | 0.999 | 0.001 | 0.999 | 0.001 | 0.999 | 0.001 | 0.001 | 0.001 |
| DATA 1 | 0.365 | 0.536 | 0.465 | 0.218 | 0.467 | 0.827 | 0.641 | 0.660 | 0.173 |
| DATA 2 | 0.361 | 0.535 | 0.466 | 0.227 | 0.468 | 0.820 | 0.643 | 0.652 | 0.179 |
| DATA 3 | 0.343 | 0.534 | 0.467 | 0.236 | 0.468 | 0.793 | 0.661 | 0.617 | 0.206 |
| DATA 4 | 0.216 | 0.550 | 0.452 | 0.108 | 0.453 | 0.842 | 0.788 | 0.568 | 0.157 |
| DATA 5 | 0.223 | 0.555 | 0.448 | 0.063 | 0.448 | 0.872 | 0.780 | 0.599 | 0.128 |
| DATA 6 | 0.367 | 0.526 | 0.475 | 0.302 | 0.476 | 0.768 | 0.637 | 0.613 | 0.231 |
| DATA 7 | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR | ERROR |