

分散モデルのパラメータ推定

著者	田中 雅史
雑誌名	三重大學農學部學術報告 = The bulletin of the Faculty of Agriculture, Mie University
巻	63
ページ	123-134
発行年	1981-12-01
その他のタイトル	Parameter Estimation of Dispersion Models
URL	http://hdl.handle.net/10076/3088

分散モデルのパラメータ推定

田 中 雅 史

Parameter Estimation of Dispersion Models

Masafumi TANAKA

I 概 説

流れ系における水質の混合・伝播過程, すなわち, 分散過程は物質収支に基礎をおいた分散モデルによって表される。代表的な分散モデルである Taylor¹⁾モデルによって表現される水質の濃度分布形が実河川での実測結果を十分に説明しないとして, J. R. Hays²⁾ ら, E. L. Thackton³⁾ ら, F. B. Pedersen⁴⁾, あるいは E. M. Valentine ら⁵⁾は流れの一部に死水域 (Dead Zone) あるいは流水の一時的な貯留域 (Storage Zone) が存在する分散モデルを考えた。

著者は分散過程におよぼす流れの内部構造の影響についての研究を進めている。そのためには, まず実測された水質の濃度分布形にもとづいてモデルパラメータを推定し, 分散モデルが分散過程を正しく表現しているのかどうかを検討する必要がある。本報は分散モデル, とりわけ流れの一部に貯留域をもつ貯留域モデルのパラメータ推定の方法を取り扱ったものである。

Taylor モデルではパラメータの推定は簡単なモーメント法によっても行なえるが, 前報で報告したように非線形最適化法を適用する方がモデルの妥当性を評価する上からも望ましい⁶⁾。すなわち, 実測された瞬間面源のもとでのトレーサの時間的濃度分布形に最も良く近似するようにモデル式のパラメータを推定するのが一般的であろう。貯留域モデルでは直接実測分布形と対比しうるモデル式による分布形はえられず, ラプラス変換領域での解しかえられないので, パラメータ推定はかなり面倒になる。本報では貯留域モデルのパラメータ推定を非線形関数 2 乗和の最小値を求める方法である Marquardt 法⁷⁾を適用しておこなう。

貯留域モデルのパラメータ推定は Nordin らによってもおこなわれている⁸⁾が, 非常に手数のかかる手続きを

とっており本報と類似の方法と思われるが具体的なアルゴリズムの説明がないので詳細はわからない。

本報の構成について述べておくと, まず II では分散モデルの理論的背景を総括した後にシミュレーションデータを用いて Taylor モデルのパラメータ推定をラプラス変換領域で Marquardt 法を適用しておこない, 前報⁹⁾のこの配法による結果と比較検討しアルゴリズムの有効性を確かめる。ついで, 貯留域のパラメータ推定において直接的な適用では計算不安定となるがパラメータの形を変えることにより比較的少数のデータ点でも正しい推定が可能であることを示す。III では粗度の存在する流れでのトレーサによる分散実験データに対して貯留域モデルの 4 個のパラメータを推定し, 結果について考察する。IV では推定されたパラメータをもつモデル式による濃度分布形と実測分布形の比較検討をおこなう。貯留域モデルの濃度分布形は前述のように直接にはえられないので, まず分布形の時間モーメントについて検討した後に, モーメントを介して貯留域モデルの濃度分布形をガンマ分布近似により再構成して検討する。

II 問題の設定

II-1 理論的背景

流れ系における分散過程を表現する最も基本的なモデルは次式で与えられる Taylor の分散モデルである。

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = E \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} \dots \dots \dots (1)$$

ここに, \bar{c} は水質の断面平均濃度, U は流れの平均流下速度, E は分散係数あるいは縦分散係数と称される定数パラメータ, x は流下方向の距離, t は時間を表す。

$t = 0$ で, $x = 0$ に瞬間面源がある場合の(1)式の解は

$$\bar{c}(x, t) = \frac{W}{wA\sqrt{4\pi Et}} \exp \left(-(x - Ut)^2 / 4 Et \right) \quad (2)$$

となる⁹⁾。

ここに W は物質の全重量, w は水の単位重量, A は

流水断面積を表す。

あるいは(2)式を基準化して

$$c(x, t) = \frac{U}{\sqrt{4\pi Et}} \exp \left(-\frac{(x-Ut)^2}{4Et} \right) \dots \dots \dots (3)$$

と書ける。ここに、

$$c(x, t) = \bar{c}(x, t) / \int_0^\infty \bar{c}(x, t) dt \dots \dots \dots (4)$$

である。

Taylor モデルに従えば瞬間面源のもとでの水質の濃度分布形は(1)式、あるいは(3)式で表わされることになる。

ところで、一般に実測される濃度分布形は(3)式で与えられる分布形よりも分布形の立上り部が急で低減部分で長く尾を引くことから分散過程が(3)式では十分に表現されないことがしばしば指摘されてきた¹⁰⁾。Hays と Krenkel²⁾ あるいは Pedersen⁴⁾ らはこの原因は流水断面の一部が貯留域あるいはよどみ域として機能し、貯留域にとり込まれた流れの一部が一時的に滞留するためと考えて、流れの一部に貯留域をもつような分散モデルを提案した。貯留域モデルの基礎式は次の2つの式で表現される⁹⁾。

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + U \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = E \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + \frac{\epsilon}{T} (C_d - \bar{c}) \dots \dots \dots (5)$$

$$\frac{\partial C_d}{\partial t} = \frac{1}{T} (\bar{c} - C_d) \dots \dots \dots (6)$$

ここに、 \bar{c} は主流部の水質の断面平均濃度、 C_d は貯留域の断面平均濃度、 U は主流部の平均流下速度、 E は分散係数、 ϵ は単位長さあたりの貯留域の主流域に対する比率、すなわち流水断面で貯留域の占める割合、 T は流れと貯留域との交換程度を表す時定数である。貯留域モデルでは(5)式の最終項で表される主流部と貯留域の間での水の交換を示す項を導入して濃度分布形のひずみを説明しようと試みている。

貯留域モデルの解は直接は求まらない。Hays は次のような(5)式のラプラス変換領域での解を示した²⁾。

$$\begin{aligned} f(s, x) &= \int_0^\infty e^{-st} \cdot \bar{c}(x, t) dt / \int_0^\infty \bar{c}(x, t) dt \\ &= \frac{1}{m(s)} \exp \{ U \cdot x / 2 E (1 - m(s)) \} \dots (7) \end{aligned}$$

ここに、

$$m(s) = \left[1 + \frac{4ES}{U^2} \left(1 + \frac{\epsilon}{1 + s \cdot T} \right) \right]^{1/2} \dots \dots \dots (8)$$

以上あげた分散モデルにより分散過程を表現するには

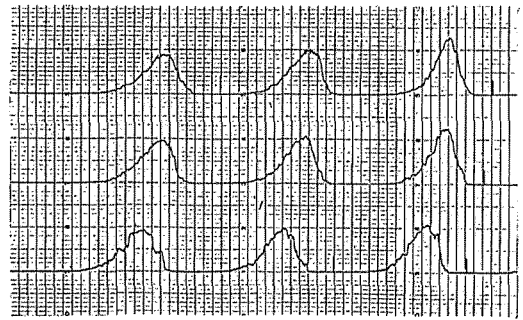


Fig. 1 Records of Dispersion experiments

Taylor モデルでは U 、 E なる2つのパラメータを、貯留域モデルでは U 、 E 、 ϵ 、 T なる4つのパラメータを実測によりえられるトレーサの濃度分布曲線（以下では分散曲線とよぶ）から推定することが問題となる。すなわち、Fig.1 に例示されるような瞬間面源のもとでの実測されたトレーサの分散曲線に最も良く近似する(3)式や(7)式のパラメータを推定すればよい。なお、任意の湧源の場合も重ね合せの原理から分布形がえられるので瞬間面源での分布形について検討することは重要である。

(3)式や(7)式はいずれも非線形式であるので、パラメータ推定には非線形の最小2乗法を適用することになる。その1つは種々のこう配法のアルゴリズムを適用する方法であり、いま1つはモデル式をテイラー展開し、局所的に線形化し反復計算によりパラメータを逐次修正していく方法である。前報⁹⁾では前者の方法により Taylor モデルのパラメータ推定をおこなったが、本報では後者の方法である Marquardt 法を適用する。

II-2 Marquardt 法のアルゴリズム

実測された分散曲線のラプラス変換に最小2乗の意味で最も良く適合する(7)式のパラメータ U 、 E 、 ϵ 、 T を推定することが問題である。改めて $U = x_1$ 、 $E/U = x_2$ 、 $\epsilon = x_3$ 、 $T = x_4$ と書くことにする。ここで E そのものをパラメータとせず E/U としたのは後述するように正規方程式の一部の要素が小さい数値となりパラメータ推定が出来なくなるためである。 $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ をもちいて(7)式と(8)式を書直すと、

$$f(s, x) = \frac{1}{m(s, x)} \exp \left\{ \frac{l}{2 x_2} (1 - m(s, x)) \right\} \dots (9)$$

$$m(s, x) = \left[1 + 4 \frac{x_2}{x_1} s \left(1 + \frac{x_3}{1 + s x_4} \right) \right]^{1/2} \dots (10)$$

となる。なお、上式で流下距離 $x = l$ とおいた。

いま、いくつかの選ばれた $s_i (i=1, 2, \dots)$ について実測された分散曲線をラプラス変換式

$$C_0(s, x) = \int_0^\infty e^{-st} \cdot c(t, x) dt \quad \dots\dots\dots(11)$$

により数値的にラプラス変換し、これらの値を $C_{0i}(s_i)$ として、それに対する(9)式の値を f_i とすると、問題は評価関数 J

$$J(x) = \sum_{i=1}^n (C_{0i} - f_i)^2 = (C_0 - f)^T (C_0 - f) \quad \dots\dots\dots(12)$$

を最小化することに帰着する。

ここに、 n はデータの点の数で、

$$f = [f_1, f_2, \dots, f_n]^T$$

$$c_0 = [C_{01}, C_{02}, \dots, C_{0n}]^T$$

T は転置を示す。

いま、 $f(x)$ を最小化するパラメータ・ベクトルの第 k 近似 x_k がえられているとすると、 $f(x)$ をテイラー展開して、

$$\langle f(x_k + \Delta x_k) \rangle \approx f(s_i, x_k) + P(x_k) \cdot \Delta x_k \quad \dots\dots\dots(13)$$

と表せる。ここに Δx_k は $(k+1)$ 次近似への修正量で、

P はヤコビアン、すなわち

$$P = - \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}, & \dots, & \frac{\partial f_1}{\partial x_4} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}, & \dots, & \frac{\partial f_n}{\partial x_4} \end{pmatrix} \quad \dots\dots\dots(14)$$

(13)式を(12)式へ代入すると、

$$\langle J \rangle = (C_0 - \langle f \rangle)^T (C_0 - \langle f \rangle) \quad \dots\dots\dots(15)$$

つまり、 J のかわりに線形化した(15)式の最小化問題を考えると、修正量 Δx_k は通常の最小2乗法により、

$\partial \langle J \rangle / \partial \Delta x_k = 0$ の条件より

$$P^T \cdot P \cdot \Delta x_k = P^T \cdot (c_0 - f) = g \quad \dots\dots\dots(16)$$

なる正規方程式の解としてえられる。

(16)式はいわゆるニュートン・ガウスの反復式であるが、この方法は反復により発散する可能性があり、また最急降下法では x_k を最急降下方向に修正するが、この方法だと最適解の近傍でジグザグ運動を起し、収束が遅いといわれている⁷⁾。

この両者の欠点をおぎなうために Marquardt は次の方程式により Δx_k を決定することを提案した⁷⁾。

$$(P^T \cdot P + \lambda I) \Delta x_k = -p^T (c_0 - f(x_k)) \quad \dots\dots\dots(17)$$

ここに、 I は単位行列、 $\lambda > 0$ はマルカート数と呼ばれる数で以下のように各ステップで状況に応じて変化させ

る。

v を $v > 1$ なる数 ($v=10$ 位が適当か) とし、 $\lambda^{(k-1)}$ を前回の反復計算の λ として、 $J(\lambda^{(k-1)})$ と $J(\lambda^{(k-1)}/v)$ を計算し、

i $J^{(k)}(\lambda^{(k-1)}/v) \leq J^{(k-1)}$ ならば $\lambda^{(k)} = \lambda^{(k-1)}/v$

ii $J^{(k)}(\lambda^{(k-1)}/v) > J^{(k-1)}$ で $J^{(k)}(\lambda^{(k-1)}) \leq J^{(k-1)}$ ならば $\lambda^{(k)} = \lambda^{(k-1)}$

iii $J^{(k)}(\lambda^{(k-1)}/v) > J^{(k-1)}$ で $J^{(k)}(\lambda^{(k-1)}) > J^{(k-1)}$ ならば、 λ を v 倍ずつ増加し、 $J^{(k)}(\lambda^{(k-1)} \cdot v^w) \leq J^{(k-1)}$ となる w をみつけて $\lambda^{(k)} = \lambda^{(k-1)} \cdot v^w$ とする。

Marquardt 法にはいくつかの改良が加えられており、Ball は(17)式の左辺の対角項に λ を加えるかわりに、 $(1 + \lambda)$ 倍する方が収束が早いことを見出している¹¹⁾ また、(17)式を直接解くのではなく、数値計算上の安定性から(17)式と等価な

$$\begin{pmatrix} c_0 - f \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} P \\ \lambda I \end{pmatrix} \Delta x_k = r_k \quad \dots\dots\dots(18)$$

なる式の右辺ベクトル r_k の2乗和ノルムを最小化する問題に帰着させる方法もある^{12),13)}。

いずれにしても、Marquardt 法のアルゴリズムは x の適当な初期値を与え、 x_k が収束するまで状況に応じて λ の値を変化させながら Δx_k についての式を解いていけばよい。収束の判定条件としては一般には J の値が前回の J の値よりも改良されなくなった時、あるいは ε を適当に小さい数として $|x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$ になった時とすればよい。なお、 λ の初期値としては $\lambda = 10^{-2}$ 程度が適当とされている⁷⁾。

Marquardt 法の計算プログラムは引用文献11)や12)に紹介されており、ここでは文献11)のプログラムを参考にしたが一般の計算センターの科学計算用ライブラリーでも利用出来る。

II-3 アルゴリズムについての二、三の検討

分散実験データによるパラメータ推定に先立って、アルゴリズムに二、三の点について検討しておく。

貯留域モデルでは分散曲線そのものではなく、そのラプラス変換によりパラメータ推定をおこなう。そのために数値的なラプラス変換をおこなう必要がある。この点を確かめるためにまず時間領域とラプラス変換領域での解析解が共にえられている Taylor モデルの数値実験データにより検討する。

まず、(3)式で $x=1000(m)$ 、 $U=30.0(cm/s)$ 、 $E=400(cm^2/s)$ とすると、

$$c(t) = \frac{30}{\sqrt{4\pi \cdot 400t}} \exp(-(1000-30t)^2/1600t) \dots (19)$$

がえられる。上式は前報⁶⁾の数値実験データと同じものである。 $s = \{0.0005, \dots, 0.15\}$ の範囲の適当な10個の s の値について(11)式により(19)式のラプラス変換値を数値積分により求める。分散曲線は $t \rightarrow 0$ と $t \rightarrow \infty$ で共に $c(t) \rightarrow 0$ なる関数形をしているので数値積分は台形公式で十分である。ここでは0.5秒ごとに c が十分にゼロとなる積分範囲で数値積分をおこなった。この様にしてえられた離散的なデータ $C_i(s_i)$ ($i = 1, 2, \dots, 10$)を用いて(7), (8)式で $\epsilon = 0$ とした場合の U, E なる2つのパラメータを逆に推定した。結果によれば、3回の反復で $U = 30.001, E = 400.005$ がえられ、数値ラプラス変換とアルゴリズムの有効性が確かめられた。次に前報⁹⁾で適用したこう配法のアルゴリズムであるFletcher-Reeves法とMarquardt法を比較する意味で、実際に分散実験データを用いてパラメータ推定をおこなった。結果をTable.1に示す。 U はNo.4を除いてほぼ同じ値がえられている。分散係数もほぼ同程度の値である。R. M. S 値で誤差の評価をおこなうと、ややFletcher-Reeves法の方が小さいが分散実験の実験誤差やTaylorモデルによるモデル化誤差を考慮すると両法による違いは大きくないと判断される。むしろMarquardt法はFletcher-Reeves法に比して反復回数が1/7~1/12とはるかに少なくすむことが注目される。このことは推定すべきパラメータの数が4個となる貯留域モデルのパラメータ推定ではMarquardt法が有利なことを示している。

次にシミュレーション・データにより貯留域モデル(7), (8)式のパラメータ推定をおこなう。(7), (8)式で $U = 25(\text{cm/s}), E = 200(\text{cm}^2/\text{n}), \epsilon = 0.05, T = 10(\text{s})$ とすると、

$$f(s, x) = m(s)^{-1} \exp(62.5(1 - m(s)) \dots (20)$$

$$m(s) = [1.0 + 1.28s \{1 + 0.05/(10 + 10 \cdot s)\}]^{1/2}$$

となる。Fig.2はこの関数形を示したものである。前述のように、パラメータ U, E, ϵ, T を直接推定することは次の理由により好ましくない。(17)式の正規方程式を解く際、左辺行列のいくつかの要素が非常に小さい数値となり悪条件行列となって方程式を数値的に解くことが不可能となる。そこで、 $E/U = x_2$ とにおいて E のかわりに x_2 の推定をおこなう。したがって、パラメータ推定には(9), (10)式をもちい、 P 行列の要素となる数値が直接推定する場合と異なる。Nordin⁹⁾らは、いくつかの流下距離における分散曲線を数値的にラプラス変換した後、(7)式の両辺の対数をとると与えられた s について流下距離の1次式となるのでその傾きを求め、しかるのちに傾きを s の関数としてパラメータ推定を非線形最小2乗法でおこなっている。アルゴリズムの説明がないので不明であるが、本報の方法による方がただ1つの特定の流下距離の分散曲線に適用出来て、しかも1つの段階ですむ点で有利である。

パラメータ推定のプロセスをFig.3に示す。結果によれば25回の反復でほぼ真値に収束する。 $x_1 (= U)$ は比較的収束が早い、他の3つのパラメータの収束はきわめ

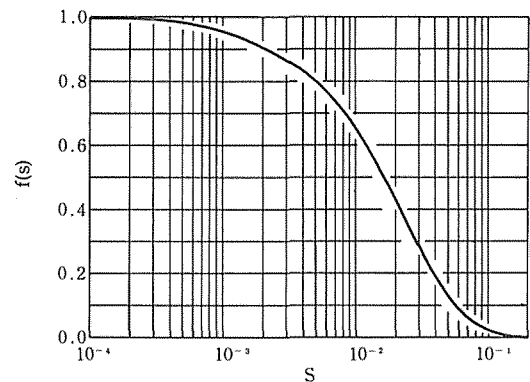


Fig. 2 Example of Laplace transform of Storage zone model (Exp.(20))

Table. 1 Comparison of estimated parameters of Taylor's model.

(UMQ, EMQ : from Marquardt's method, UFR, EFR, from Fletcher Reeves's method)

Ex.No.	L/k	U		E		R.M.S ERROR		Num. Iteration	
		U _{MQ}	U _{FR}	E _{MQ}	E _{FR}	ϵ_{MQ}	ϵ_{FR}	MQ	FR
1	10	20.8	20.9	263.8	279.9	1.22×10^{-3}	9.71×10^{-4}	3	32
2	20	21.0	21.2	182.9	190.5	2.05	1.88×10^{-3}	3	36
3	50	21.4	21.5	123.8	105.9	6.21	5.40	3	21
4	100	22.9	23.6	97.0	86.4	9.56	8.05	3	32

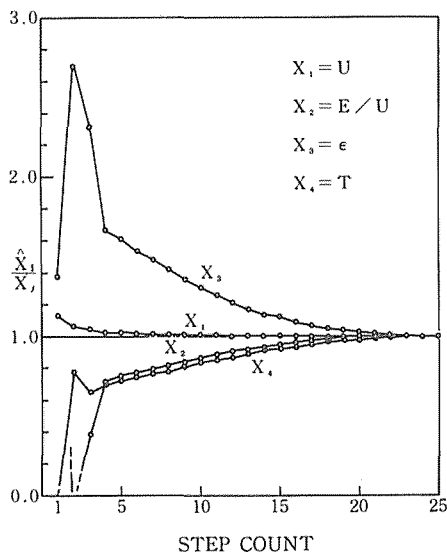


Fig. 3 Parameter estimation of Marquardt method (Simulation data)

てゆっくりしており、とりわけ x_3 や x_4 の収束が遅いことがうかがわれる。

III 適用結果

III-1 実験概要

分散実験に使用した実験設備は Fig.4 に示す、長さ21.6m、幅50cm、底こう配1/750の長方形断面水路である。水路上流端より16mの位置を濃度測定断面として、それより上流の断面を適宜の距離においてトレーサの放出断面とした。水路床には Fig.5 に模式的に示すように幅20mm、厚さ2mmの等辺山型網を人工粗度として設置した。設置法は2種類あり、前者をL型(Ser I)、後者を

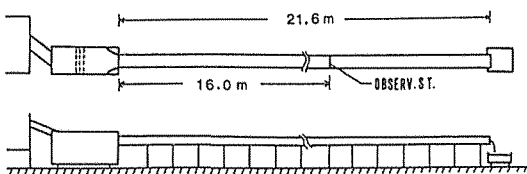


Fig. 4 Flumes of Dispersion experiments

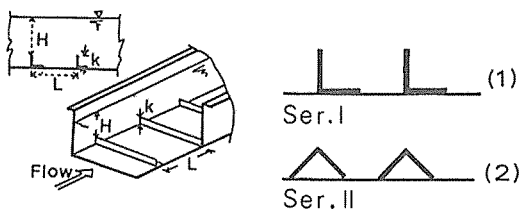


Fig. 5 Arrangement of Roughness elements

山型(Ser. II)と称する。実験は粗度間隔Lを種々変えながらおこなった。水路床に粗度を設置したのは貯留域をより拡大させることを意図したものである。流量は10l/sで一定とし、水深はほぼ10cm前後である。

分散実験はほぼ0.17%の食塩水300ccをトレーサーとして放出断面で水面直上から瞬間的に水路幅方向に一様に面源として投入し、濃度測定断面で5割の水深に設置した導電率計で、特定の流下距離に応じた導電率の時間的変化を連続測定することによりおこなわれた。導電率計の受感部は横断方向に3点設置してあるが、流下距離が8m以上になると各測点での分布形には大差がない。Fig.1 は得られた導電率計の時間的変化をいくつかの流下距離について示したものである。

導電率の時間的変化を0.1秒ごとに離散化して検定式にしたがって濃度値に変換したのち基準化し、さらに0.5秒ごとにサンプリングしてデータとした。

III-2 推定結果

前項でえられた分散実験のデータを20個のsの特定の値について(11)式により数値的にラプラス変換し、 $C_i(s)$ を求めた。Fig.6 はこのようにしてえられたデータの1例を Ser. II Ex. 4 の場合について示している。図中の20の点が推定に用いるデータ点である。

Marquardt 法の適用に際し、推定の初期値としては x_1, x_2 は Taylor モデルの値を目安とし、 $x_3=0.005, x_4=5.0$ に設定し、終了条件は $|x_k - x_{k-1}| < 10^{-5}$ を採用した。

パラメータ推定のプロセスの例を Ser. II, Ex. 4 について Fig.7 に示す。反復回数は400ステップ近くかかり最終的にそれぞれ $x_1=23.76, x_2=1.0805, x_3=0.1133, T=2.08$ がえられた。このときの評価関数 J の値は $J=0.36 \times 10^{-14}$ である。推定のプロセスはきわめてゆっくりしているが少なくともデータのラプラス変換値は(9)式で良く近似される。

4つのパラメータ $x_1 \sim x_4$ は相互に関連し合い収束の過程では図のように収束に向うにつれて U, ϵ は共に大きくなり E と T は小さくなっていく。これは貯留域モデルのパラメータ推定の典型的なプロセスである。貯留域の流れの断面に占める割合 ϵ が大きくなるにつれて U が大となるのは主流域の断面積が減少するために流速が増加することを意味している。分布形の拡がり支配するパラメータは E と T であるが、貯留域が大きくなるにつれて E が小さくなるのは Taylor モデルにはない貯留域モデルのパラメータ ϵ, T が導入されること

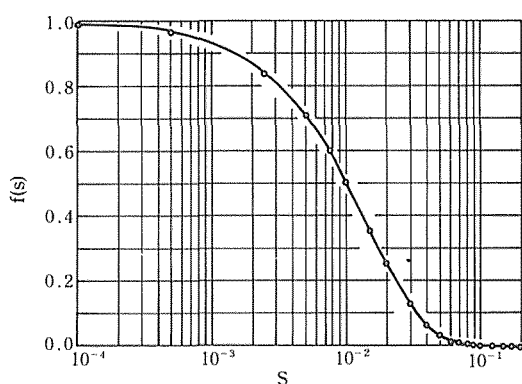


Fig. 6 Example of Laplace transform of Time-concentration distribution of observed data (Ser. II, Ex. 4)

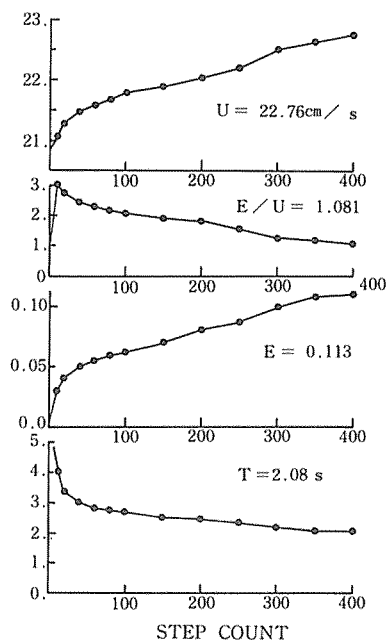


Fig. 7 Parameter estimation of Storage zone model (Ser. II, Ex. 4)

により分散係数 E の役割が減じ、分布形の拡がりは分散作用のみならず流水の一時的な貯留機構によっても説明できることを示している。このことは逆にいえば、管内流れや一様な流れでは Taylor モデルにおける分散係数は物理的な意味をもつが、実河川においてはその物理的意義のあいまいなことを示している。

貯留域モデルの分散過程への影響度は空間スケールを表すパラメータで表されるが、両者は相互に関連し合っ

ており、 ϵ が大きくなると T は小さくなり、必ずしも個々のパラメータの果す役割はパラメータ推定のみからは明確にならない。むしろ ϵ は流れの内部構造について調べることににより何らかの基準で決定し、パラメータ推定からは除く方がよい。

Table.2 は Ser. I (L型), Ser. II (山型) のそれぞれのシリーズについてパラメータ推定の結果をのせたものである。表以外の分散曲線についても推定をおこなっているが同表は相対粗度間隔 L/k (ここに k は粗度の高さ, L は粗度間隔) のひろい範囲についての代表的結果を示している。結果によれば、流れの中で単位長さあたりの貯留域の占める割合は 1%~30% の範囲の値が、 T については 2~4 秒の範囲の値が多くえられている。評価基準 J についてみると、貯留域モデルの方が、Taylor モデルよりも適合度が良い。もっとも貯留域モデルは Taylor モデルよりもパラメータが 2 つ多いので一般的な関数あてはめの観点からすれば当然のことともいえる。

Ser. I (L型) の場合、相対粗度間隔 L/k が大きくなると E と ϵ は小さくなり T は大きくなる、一方、Ser. II (山型) の場合、 L/k による一定の傾向はない。特に、Ex. 2, $L/k=20$ の場合 E が非常に小さくなっても ϵ を極端に大きくすればよいことが示されている。この場合 $U=23.6$, $E=70.8$, $\epsilon=0.184$, $T=1.84$ としても $J=0.178 \times 10^{-8}$ となり表の結果と大差ない。すなわちこの結果は次のことを示している。一般にパラメータ推定では誤差ノルムを評価基準として何ら物理的配慮をせずにパラメータを見つける操作をおこなっている。貯留域モデルのパラメータ推定では 4 つのパラメータを数値的なラプラス変換領域で間接的に、しかも (9), (10) 式のかなり複雑な非線形式のパラメータの組合せを求める必要がある。したがって、誤差ノルムの評価基準のみで最終的にえられたパラメータについて厳密な物理的意味づけをおこなうことは困難で前述のように若干の物理的配慮によりパラメータの数をへらすか、あるいは必ずしも誤差ノルムの小さいパラメータを最適としない方がよい。実際、流れの内部構造を調べると、粗度間隔により流れの様相はかなり異なっている¹⁴⁾。パラメータの物理的意味を詳しく検討することは本報の主目的ではないのでこれらの点については機会を改めて公表したい。

Table. 2 Summary of estimated parameter of storage zone model

Ex.No.		STORAGE ZONE MODEL					TAYLOR MODEL		ERROR	
		x(m)	U(cm/s)	E(cm ² /s)	ε	T(s)	U(cm/s)	E(cm ² /s)	ε ² _{ST.}	ε ² _{TAY.}
Ser. I	1	14.0	24.4	99.8	0.286	2.45	19.2	267.8	0.627×10 ⁻¹⁰	0.560×10 ⁻⁸
	2	14.0	22.6	61.1	0.133	2.53	20.1	163.4	0.149×10 ⁻¹¹	0.526×10 ⁻⁸
	3	14.0	22.3	63.4	0.047	3.56	21.4	123.8	0.769×10 ⁻¹¹	0.509×10 ⁻⁸
	4	14.0	23.2	63.4	0.014	6.31	22.9	97.0	0.164×10 ⁻⁹	0.503×10 ⁻⁸
Ser. II	1	12.0	23.1	122.0	0.160	2.88	20.1	251.3	0.179×10 ⁻⁹	0.156×10 ⁻⁷
	2	14.0	28.2	0.01	0.424	1.47	20.0	168.4	0.173×10 ⁻⁸	0.366×10 ⁻⁸
	3	14.0	20.6	92.6	0.023	5.15	20.2	120.5	0.163×10 ⁻⁹	0.391×10 ⁻⁸
	4	14.0	22.8	24.6	0.113	2.08	20.5	104.4	0.361×10 ⁻¹⁴	0.270×10 ⁻⁸

IV 濃度分布形の検討

貯留域モデルが推定されたパラメータによりどの程度時間的濃度分布形(分散曲線)を表すかについて検討する。貯留域モデル(7)式を逆ラプラス変換することは困難であり、かつもとの基礎式(5)、(6)式の数値解を求めるのもかなり面倒であるので、ここでは実測された分散曲線の時間モーメントと貯留域モデルのそれを比較し、ついでモーメントを介して分散曲線を貯留域モデルのパラメータをもつガンマ分布近似により再構成して検討する。

1) 分布形の時間モーメントによる検討

分散曲線の時間モーメントは

$$M_i = \int_0^{\infty} t^i \cdot c(x, t) dt \quad (i = 1, 2, \dots) \quad (21)$$

により計算される。

一方、貯留域モデルの分布形の i 次モーメントは(7)式より

$$M_i = (-1)^i \frac{\partial^i f(s, x)}{\partial s^i} \bigg|_{s=0} \quad (22)$$

で計算される⁸⁾。

$i = 1, 2, 3, 4$ の2次までのモーメントを計算することにより以下の分布形の形状を表す統計的パラメータがえられる。

平均時間 \bar{T} :

$$\bar{T} = M_1 = (x/U + 2E/U^2)(1 + \epsilon) \quad (23)$$

分散値 σ_i^2 :

$$\sigma_i^2 = M_2 - \bar{T}^2 = (x/U + 4E/U^2) 2E(1 + \epsilon)^2/U^2 + (x/U + 2E/U^2) 2T\epsilon \quad (24)$$

ひずみ度 S_k :

$$g_i = M_3 + 3\bar{T} \cdot \sigma_i^2 - \bar{T}^3$$

$$\begin{aligned} &= (3x/U + 16E/U^2) \cdot 4E^2(1 + \epsilon)^3/U^4 \\ &+ (x/U + 4E/U^2) \cdot 12ET\epsilon(1 + \epsilon)/U^2 \\ &+ (x/U + 2E/U^2) \cdot 6T^2\epsilon \dots \dots \dots (25) \end{aligned}$$

$$S_k = g_i / \sigma_i^{3/2} \dots \dots \dots (26)$$

偏平度 F_i :

$$\begin{aligned} f_i &= M_4 - 4g_i \cdot \bar{T} + 6\sigma_i^2 \cdot \bar{T}^2 - \bar{T}^4 \\ &= 3\sigma_i^4 + (x/U + 2E/U^2) 24\epsilon T^3 \\ &+ (x/U + 4E/U^2) 48E/U^2(1 + \epsilon)\epsilon \cdot T^2 \\ &+ (x/U + 4E/U^2) 24E/U^2\epsilon^2 T^2 \\ &+ (9x/U + 48E/U^2) 16(E/U^2)^2(1 + \epsilon)^2\epsilon T \\ &+ (15x/U + 96E/U^2) 8(E/U^2)^3(1 + \epsilon)^4 \dots \dots \dots (27) \\ F_i &= f_i / \sigma_i^4 \dots \dots \dots (28) \end{aligned}$$

上の諸式で $\epsilon = 0$ とすれば Taylor モデルの分布形の時間モーメントを与える。なお3次モーメントまでは Nordin ら⁸⁾により計算されたものであり4次モーメントについては著者が新たに計算したものである。

実測された分散曲線の時間モーメントは(21)式より直接計算されるので両者を比較することが出来る。

Fig.8は分散値についての比較を、Fig.9はひずみ度についての比較をおこなったものである。図には Table.2に挙げた以外のパラメータ推定の結果についてものせてある。偏平度については散らばりが大きいためにのせてない。モデルによる分散値 σ_i^2 は実測の分散曲線のそれとほぼ一致しているが、ひずみ度についてはモデルと分散曲線ではかなり違うものもある。両者の違いが大きい場合にはいずれも推定されたパラメータ T の値が大きく T の推定が正しくない可能性がある。いずれにしても、これらの結果は分散過程の機構が必ずしも貯留域モデルのみでは説明しきれないことを示唆している。

Fig.10は Table.2にのせた Ser. I (L型)の推定されたパラメータをもちいた分散値の流下距離による変

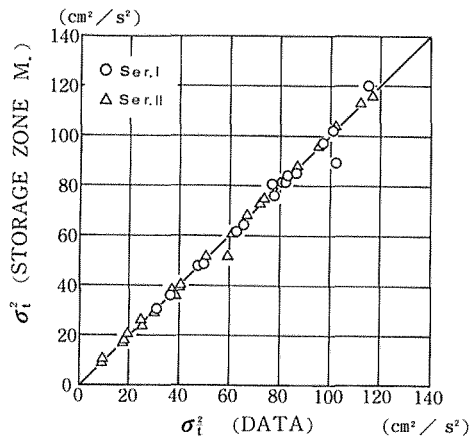


Fig. 8 Comparison of variance between observed data and Storage zone model

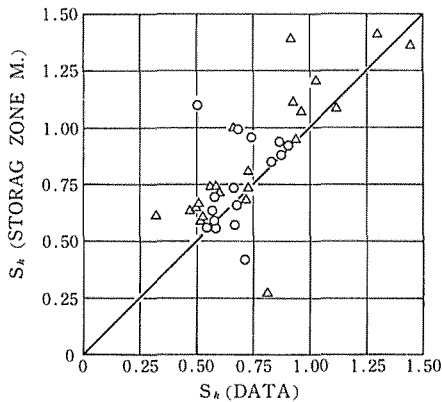


Fig. 9 Comparison of skewness factor between observed data and storage zone model

化、④式を分散曲線のそれと共に示したものである。パラメータが特定の距離 ($x=14\text{m}$) の分散曲線のみから推定されているにもかかわらず分散値の距離的变化は貯留域モデルで良く説明されている。図中破線は Taylor モデルによる分散値の変化であるが、 $L/k=10$ を除いては分散曲線の分散値よりもやや小さくなっている。

Fig.11.1~Fig.11.4は④式による貯留域モデルのひずみ度 S_k の流下距離による変化を分散曲線から計算されたひずみ度と共に示したものである。相対粗度間隔 $L/k=10, 25, 50$ の場合は貯留域モデルの S_k は分散曲線の傾向に近いが $L/k=100$ の場合は実測された分散曲線のそれよりも大きくなっている。また、Taylor モデルの場合は S_k の値は小さく実測される分散曲線よりも対称形であることがうかがわれる。

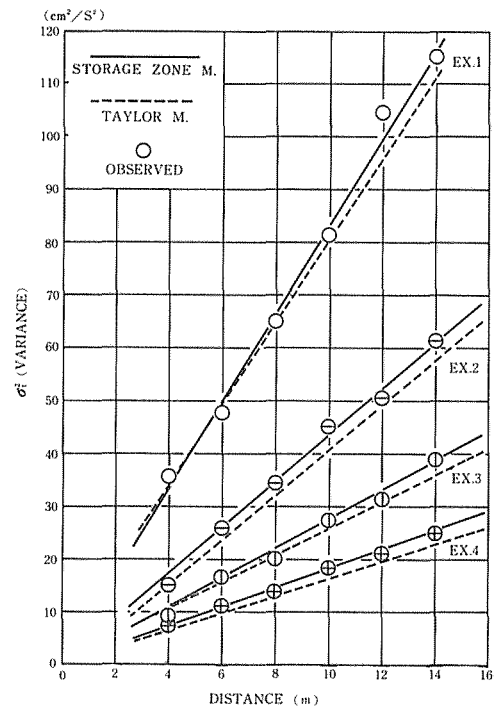


Fig.10 Variance σ_i^2 as a function of distance (Ser. I)

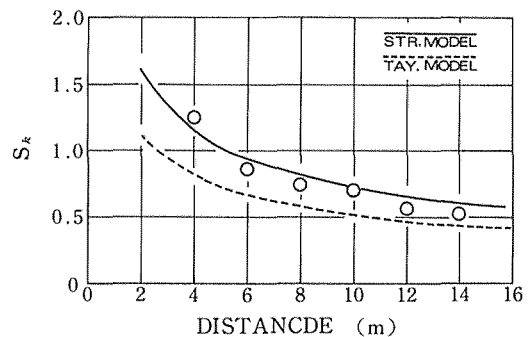


Fig.11.1 Skewness factor as a function of distance (Ser. I, Ex. 1)

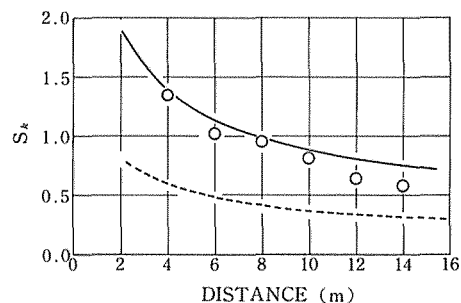


Fig.11.2 Skewness factor as a function of distance (Ser. I, Ex. 2)

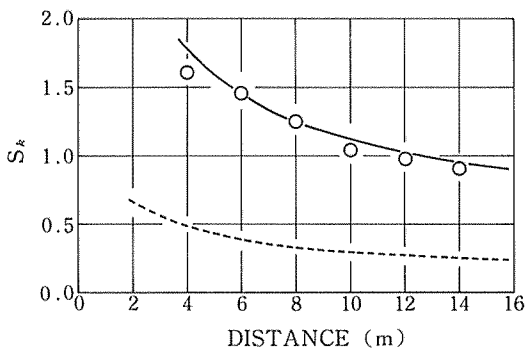


Fig. 11.3 Skewness factor as a function of distance (Ser. I, Ex. 3)

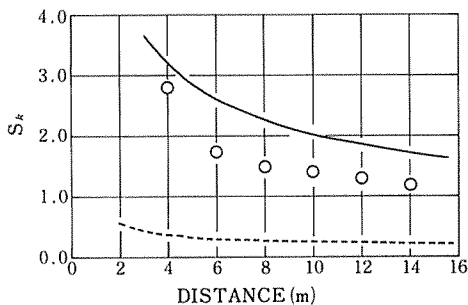


Fig. 11.4 Skewness factor as a function of distance (Ser. I, Ex. 4)

2) 分布形のガンマ分布近似による検討

分散曲線をガンマ分布で近似することがしばしばおこなわれてきている¹⁵⁾。W. W. Sayre は流速の対数分布のもとでの応答関数の考察から¹⁶⁾、島田は確率論的考察から¹⁷⁾、いずれも分散曲線がガンマ分布で表わせることを導いた。著者も以前、仮想的な連続した完全混合槽により分散過程を表現し、ガンマ分布で分散過程が近似できることを示した¹⁸⁾。

いま、Fig. 12 に示す連続した完全混合槽を考えると、連続の式より

$$\frac{dc}{dt} = \frac{Q}{V}(c_{in} - c) \quad \dots\dots\dots (29)$$

ここに、 c は完全混合槽内の平均水質濃度、 c_{in} は流入水の水質濃度、 Q は流入流量、 V は混合槽の容量を示す。

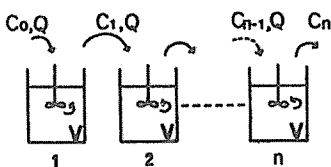


Fig. 12 Continuously Complete mixing tank

流入する前の槽内の水質濃度を 0 とすれば(29)式より

$$C = \frac{1}{K} \int_0^t C_{in}(\tau) \cdot e^{-\frac{t-\tau}{K}} \cdot d\tau \quad \dots\dots\dots (30)$$

ここに、 $K = V/Q$ 。

瞬間的に混合槽内での平均濃度 C_0 の水を 1 番目の混合槽に流入させ、以下順次の混合槽から流入出させると、第 n 槽の平均水質濃度は

$$C = \frac{C_0}{K \cdot \Gamma(n)} \left(\frac{t}{K}\right)^{n-1} e^{-\frac{t}{K}} \quad \dots\dots\dots (31)$$

となる。ここに、 $\Gamma(n)$ はガンマ関数を示す。

ここで、混合槽間の移送によるムダ時間 t_0 を考慮すると、上式は

$$C = \frac{C_0}{K \cdot \Gamma(n)} \left(\frac{t-t_0}{K}\right)^{n-1} \cdot e^{-\frac{t-t_0}{K}} \quad \dots\dots\dots (32)$$

となる。すなわち、分散過程を連続した完全混合槽で表した場合の時間的濃度分布形は(32)式のガンマ分布で与えられる。ガンマ分布のパラメータ t_0 や K , n は流下距離によって変化するので一般的な分散モデルではないが分散曲線を近似するには十分であろう¹⁷⁾。

ところで、(32)式の分布形のパラメータ t_0 , n , K は(32)式の時間モーメントをとることよりも \bar{t} , σ_t^2 , S_k と

$$\bar{t} = t_0 + n \cdot K$$

$$\sigma_t^2 = K^2 \cdot n \quad \dots\dots\dots (33)$$

$$S_k = 2/\sqrt{n}$$

なる関係があることがわかる。貯留域モデルパラメータ U , E , ϵ , T が推定されれば、(23), (24), (26)式により(33)式の左辺の量は評価されるのでガンマ分布のパラメータが決定出来る。

Fig. 13 は Ser. I (L 型) について、Fig. 14 は Ser. II (山型) について、それぞれ Table. 2 のパラメータ推定の結果を用いて上述の手続きにより貯留域モデルの分布形をガンマ分布で近似した結果である。図には実測値および Taylor モデルによる結果をものせてある。また、Table. 3 は実測値への適合度を R. M. S 値で評価したものである。最終欄は実測された分散曲線のモーメントをもちいてガンマ分布近似をおこなったときの誤差を示している。なお、Ser. I, Ex. 4 については Table. 3 にみられるように誤差が大きいため図には示さなかった。

Fig. 13 と Fig. 14 から、貯留域モデルによれば、Taylor モデルよりも立上りの前面部と後面のスノの部分で実測値に適合していることがわかる。また、Ser. I (L 型) の方が Ser. II (山型) の場合に比してやや実測値への適合

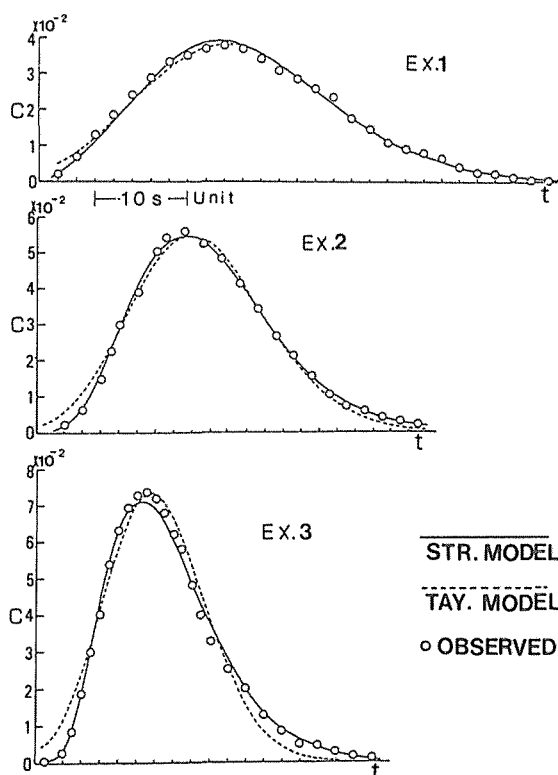


Fig.13 Concentration distribution predicted from dispersion models (Ser. I)

Table. 3 Root mean square errors of models

Ex.No.	L/k	$\epsilon_{STR.}$	$\epsilon_{TAY.}$	$\epsilon_{DATA.}$
Ser. I	1 10	1.18×10^{-3}	1.43×10^{-3}	1.31×10^{-3}
	2 25	9.15×10^{-4}	2.26 "	9.48×10^{-4}
	3 50	1.68×10^{-3}	412 "	1.70×10^{-3}
	4 100	1.15×10^{-2}	5.92 "	3.74 "
Ser. II	1 10	1.05×10^{-3}	1.82×10^{-3}	1.25×10^{-3}
	2 20	2.19 "	4.48 "	1.42 "
	3 40	2.30 "	4.28 "	1.43 "
	4 80	2.16 "	5.10 "	2.14 "

$\epsilon_{STR.}$ Storage zone model.

$\epsilon_{TAY.}$ Taylor's model.

$\epsilon_{DATA.}$ Data

度が良い。これは Ser. I と Ser. II の流れの内部構造の差
違によるものと考えられる¹⁴⁾が、ここでは詳しく論じな
い。

貯留域モデルは Taylor モデルよりも実測される分散
曲線を表してはいるが、粗度間隔が大きい場合には分散
曲線の形状を十分に表現しているとはいえず、粗度間隔
の大きい、いわば実河川での分散機構が貯留域モデルで
説明されるか否かはなお検討の余地がある。

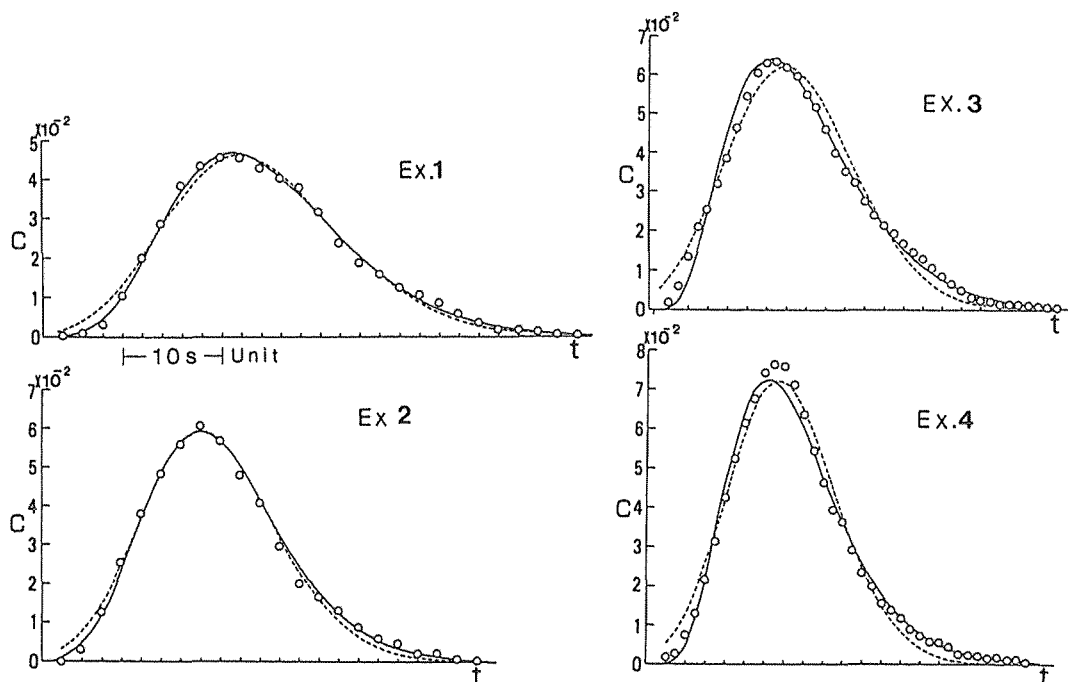


Fig.14 Concentration distribution predicted from dispersion models (Ser. II)

V ま と め

分散モデルの1つである流れの一部に滞留域をもつ貯留域モデルのパラメータ推定を Marquardt 法（非線形最小2乗法）を適用しておこなった。えられた結果をまとめると次のようである。

1) 貯留域モデルの基礎式のラプラス変換領域での理論解に、数値実験および実測の時間濃度分布形（分散曲線）に数値的なラプラス変換をおこなったのちにえられたデータが最もよく適合するようにパラメータを推定した。もとの理論解に直接 Marquardt 法を適用すると、計算不安定を生じやすいが、パラメータの組合せを変えることにより有効なパラメータ推定が出来る。

アルゴリズムとしてはこう配法に比し反復回数が少なくてすむので4個のパラメータをもつ貯留域モデルのパラメータ推定法として適している。

2) 粗度をもつ流れの分散実験データにより貯留域モデルのパラメータ推定をおこなった。条件を厳しくすると実測データの場合、計算の反復回数は多くなるが、推定されたパラメータにより、データは貯留域モデルのラプラス変換領域での理論式により精度良く表される。しかし、えられたパラメータの物理的意義は必ずしも明確でない。とりわけ、貯留域モデルの重要なパラメータである貯留域の流れに占める割合を示すパラメータ ϵ と時定数 T は相互に関連し合い、その値は誤差ノルムを基準としたパラメータ推定のみからは一意的に決定されない。

3) 推定されたパラメータをもつ貯留域モデルの時間モーメントと実測された分散曲線の時間モーメントを比較すると、モデルによる分散値の流下距離による変化は実測分散値のそれを良く表している。一方、ひずみ度については、粗度間隔が長くなると、モデルによるひずみ度が実測による分散曲線のひずみ度よりも大きくなる。

貯留域モデルの分布形をモーメントを介してガンマ分布で近似して実測された分散曲線の形状と比較検討した。

貯留域モデルの分布形は Taylor モデルよりも分散曲線の立上り部や低減部のスソの部分の形によく合致している。しかしながら、粗度間隔、粗度の形状により適合度が異なり、Taylor モデルと同様に粗度間隔が長くなると適合しなくなるので貯留域モデルはすべての分散過程の物理機構を説明するものではない。

分散実験に際しては昭和54年度、55年度の水利工学研究室内の専攻生諸氏の援助を受けた。ここに深謝の意を表します。

参 考 文 献

- 1) Taylor, G. I.: The Dispersion of Matter in Turbulent Flow through a Pipe, *Roc. Roy. Soc. L*, A223, pp.446~468, 1954.
- 2) Hays, J. R., P. A. Krenkel, and K. B. Schnell : Mass transport mechanism in open-channel flow, Rep.138 pp. Dep. of Civil Eng. Vanderbilt Univ., Nashville, Tenn., 1966.
- 3) Thackton, E. L. and K. B. Schnell : Predicting effects of dead zones of strear mixing, *Roc. A. S. C. E*, 96, SA2. pp.319-331, 1970.
- 4) Pedersen, F. B.: Prediction of longitudinal dispersion in natural streams, Ser. Pap. 14, Ins. of Hydro. and Hydraul. Eng. Tech. Univ. of Denmark, Lyngby, 1977.
- 5) Valentine, E. M. and I. R. Wood.: Experiments in longitudinal dispersion with dead zones, *Proc. A. S. C. E*, 105, HY8, pp.999-1016, 1979.
- 6) 田中雅史：非線形最適化法による分散モデルのパラメータ推定, 三重大学農学報, 60, pp.35-41, 1980.
- 7) Marquardt, D. W : An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, *Jour. Soc. Indust. Appl. Math.*, 11, No. 2, 1963.
- 8) Nordin, C. F. and B. M. Troutman : Longitudinal Dispersion in Rivers, *water Res. Res.*, 16, No. 1, 1980.
- 9) 例えば Fischer, H. B.: Mixing in Inland and Coastal waters, Academic Press., 1979.
- 10) Nordin, C. F. and G. V. Sabol : Empirical data on longitudinal dispersion in rivers, U. S. Geolog. Survey, *water Res. Inv*20-74, 1974.
- 11) 岩井重久編：水質データの統計的解析, pp.107-112, 森北出版, 1980.
- 12) 刀根薫：BASIC, pp.137-146, 培風館, 1981.
- 13) J. コワリック, M. R. オスボーン, 山本訳：非線形最適化問題, pp.89-93, 1970.
- 14) 田中雅史：大きな粗度上の流れの内部構造と分散作用, 昭和55年度農土木学会大会講演要旨集,

- 1-24, 66.56~57, 1980.
- 15) 綾史郎, 岩佐義朗, 戸田圭一: 河川における移流分散実験データの解析, 第25回水理講演会論文集, pp.423-432, 1981.
- 16) Sayre, W. W : Discussion of "Convective Model of Longitudinal Dispersion", Proc. A. S. C. E. 102, HY7, pp.820-823, 1977.
- 17) 島田晋: 移流分散現象の確率論的解析, 第24回水理講演会論文集, pp.1-7, 1980.
- 18) 田中雅史: 開水路流れの分散作用, 昭和53年度農土木学会大会講演要旨集, 1-10, pp.20-21, 1978.

Summary

Mixing and transportation process of water quality in river flow is usually predicted by dispersion models which describe concentration distribution of contaminants. The application of the nonlinear least squares method to the parameter of one of dispersion models, namely storage zone or dead water zone model, is developed in this paper. Though parameters of storage zone model can not be estimated directly because of the unstable condition of numerical calculations, Marquardt's method is applicable by the modification of the combination of parameters as given by eq. (9) and eq. (10).

Applying Marquardt's algorithm, four parameters of storage zone model are estimated by the use of observed concentration distribution which is obtained from experiments carried out in the flow over rough beds. It is found that the solution of Laplace transform domain of the storage zone model is well fitted to the numerical Laplace transform of the observed concentration distribution. However, the physical meaning of estimated parameters is not definite. The comparison of temporal moments of storage zone model with those of observed data is presented in fig.10, for the statistical variance and in fig.11, for the skewness factor. The gamma distribution approximation of the concentration distribution based on the storage zone model is presented in fig.13 and fig.14. In these figures, the results of the well known Taylor's model are also presented. The observed concentration distribution is well described by the storage zone model when the density of the boundary roughness element is high. On the contrary, the model fitness to the observed data is not good when the roughness density is low.