日本建築学会大会学術講演梗概集
（中国） 2008年 9 月

統計的信頼性評価法を持つ拡散系システム同定理論

正会員 ○ 奥山 博康*1

熱回路網 システム同定 最小二乗法
誤差評価 多数室換気測定 方程式残差

はじめに

一般に測定の多くは方程式モデルのパラメータのシステム同定と見なせる．しかし方程式の構造やパラメータが前提とする線形性，不変性や一様性等が正確には成り立たないことが多い．これによる同定誤差は多くの場合に測定誤差よりも影響が大きい．幾つかの測定条件で同定されたパラメータであっても，さらに様々な条件での測定を行えば，比較的大きな方程式残差として表れる．従来の測定法[1]の信頼性評価には測定誤差だけが考慮されてきた．そこで本論では，著者の拡散系の汎用モデルに関して最小二乗法でパラメータ同定する既往の方法[2]を改善して，さらに新たに考案した信頼性評価指標について述べる．

パラメータの測定方程式

拡散系の空間的領域型の離散化モデルの骨組みは一般に(1)式の完全連結システムの節点方程式で記述できる．これにより状態方程式とも呼ぶ連立常微分方程式(2)が構成される．ここに x_j，$m_{i,j}$，$c_{i,j}$，$r_{i,j}$は各々，節点 j の温度等の拡散ポテンシャル，節点 i に関する一般化容量，節点 j から節点 i への一般化コンダクタンス，熱流等の発生源 j から節点 i への自由入力係数である．また n は未知数扱いの，no は既知数扱いの節点数，ng は発生源の総数である．

$$\sum_{j=1}^{n} m_{i,j}\cdot\dot{x}_j = \sum_{j=1}^{n+no} c_{i,j}\cdot(x_j - x_i) + \sum_{j=1}^{ng} r_{i,j}\cdot g_j \quad (1)$$

$$\mathbf{M}\cdot\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{C}\cdot\mathbf{x} + \mathbf{C_o}\cdot\mathbf{x_o} + \mathbf{R}\cdot\mathbf{g} \quad (2)$$

この(2)式を次のパラメータの測定方程式(3)に変形する．一つの節点まわりには既知パラメータが少なくとも一個あるとし，変数 x_j か g_j との積によって作られる項は左辺の $\boldsymbol{y}$ の中に移項する．また被同定パラメータ $m_{i,j}$，$c_{i,j}$，$r_{i,j}$によるベクトルを $\mathbf{m}$，$\mathbf{c}$，$\mathbf{r}$ として，これに係るマトリックスは $\mathbf{D}$，$\mathbf{X}$，$\mathbf{G}$ と定める．これらをまとめてサイズ na の $\mathbf{a}$ と $n\times na$ の $\mathbf{Z}$ を定める．

$$\mathbf{y} = \mathbf{D}(\dot{x}_i)\cdot\mathbf{m} + \mathbf{X}(x_i)\cdot\mathbf{c} + \mathbf{G}(g_i)\cdot\mathbf{r} = [\mathbf{D},\mathbf{X},\mathbf{G}]\cdot\begin{bmatrix}\mathbf{m}\\\mathbf{c}\\\mathbf{r}\end{bmatrix} = \mathbf{Z}\cdot\mathbf{a} \quad (3)$$

測定時間間隔 Δt，総測定時点数は nt で測定期間は T とする．$(k-1)\Delta t$ から $k\Delta t$ までの線形補間積分により次式の $\mathbf{y}_k$，$\mathbf{Z}_k$ を定義し(6)をパラメータの測定方程式とする．

$$\mathbf{y}_k = \int_{(k-1)\Delta t}^{k\Delta t}\mathbf{y}\,dt \quad (4) \qquad \mathbf{Z}_k = \int_{(k-1)\Delta t}^{k\Delta t}\mathbf{Z}\,dt \quad (5) \qquad \mathbf{y}_k = \mathbf{Z}_k\cdot\mathbf{a} \quad (6)$$

最小二乗法の回帰式と解式

パラメータ $\mathbf{a}$ を最小二乗推定する回帰式を導く．パラメータ間には，流量収支，伝導の対称性，伝導率等の上位のパラメータへ回帰する際の従属関係等の拘束条件が存在する．これらは線形関係式であるから，マトリックス $\mathbf{S}$ とベクトル $\mathbf{d}$ によって(7)式で表現される．(6)式と(7)式を束ねて(8)式の方程式誤差 $\mathbf{e}$ を定義する．

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{a} = \mathbf{d} \quad (7) \qquad \mathbf{e}_k = \begin{bmatrix}\mathbf{y}_k\\\mathbf{d}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\mathbf{Z}_k\\\mathbf{S}\end{bmatrix}\cdot\mathbf{a} \quad (8)$$

ここで(8)式記述の簡単化のために，次の記号のベクトル $\mathbf{b}$ とマトリックス $\mathbf{F}$ を導入する．

$$\mathbf{F}_k = \begin{bmatrix}\mathbf{Z}_k\\\mathbf{S}\end{bmatrix} \quad (9) \qquad \mathbf{b}_k = \begin{bmatrix}\mathbf{y}_k\\\mathbf{d}\end{bmatrix} \quad (10)$$

こうして(8)式は次式で書き直される．

$$\mathbf{e}_k = \mathbf{b}_k - \mathbf{F}_k\cdot\mathbf{a} \quad (11)$$

最小二乗化する評価関数 J を $\mathbf{e}_k$の総時点数 nt にわたる総和によって定義する．この J を $\mathbf{a}$ で微分して 0 とおいた(13)式から，最小二乗解は(14)式となる．また非負最小二乗法[3]も(13)式から得られる方程式に適用できる．

$$J = \sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{e}_k\cdot\mathbf{e}_k = \sum_{k=1}^{nt} {}^t(\mathbf{b}_k - \mathbf{F}_k\cdot\mathbf{a})\cdot(\mathbf{b}_k - \mathbf{F}_k\cdot\mathbf{a}) \quad (12)$$

$$\frac{\partial J}{\partial\mathbf{a}} = 2\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}_k\cdot\mathbf{F}_k\cdot\mathbf{a} - 2\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}_k\cdot\mathbf{b}_k = \mathbf{0} \quad (13)$$

$$\hat{\mathbf{a}} = \left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}_k\cdot\mathbf{F}_k\right)^{-1}\cdot\left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}_k\cdot\mathbf{b}_k\right) \quad (14)$$

また推定パラメータの誤差分散共分散マトリックス Λ は，方程式誤差の期待値マトリックスからの伝搬として計算すれば次式が得られる．

$$\boldsymbol{\Lambda} = \left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}\cdot\mathbf{F}\right)^{-1}\cdot\left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}\cdot E(\mathbf{e}\cdot{}^t\mathbf{e})\cdot\mathbf{F}\right)\cdot{}^t\left\{\left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}\cdot\mathbf{F}\right)^{-1}\right\} \quad (15)$$

この方程式誤差期待値マトリックスは残差からのものと測定誤差からのものと二通り定義できる．

方程式残差からの誤差伝播と決定係数

方程式残差は，(14)式による推定パラメータによって，(11)式と同様な次の(16)式で計算される．

$$\mathbf{v}_k = \mathbf{b}_k - \mathbf{F}_k\cdot\hat{\mathbf{a}} \quad (16)$$

これにより方程式誤差期待値マトリックスは(17)式で計算され，これを適用した場合の Λ を $\Lambda\mathbf{a}$ とする．単に nt で割らないのは，na の分だけ自由度を下げたからである．次に決定係数の算出に必要な残差二乗和は(18)式で計算される．

Diffusion System Identification Theory with Statistical Reliability Evaluation Method

OKUYAMA Hiroyasu

$$E(\mathbf{e}_k \cdot {}^t\mathbf{e}_k) = \frac{1}{nt-na}\sum_{k=1}^{nt}\mathbf{v}_k \cdot {}^t\mathbf{v}_k \quad (17) \qquad s(\hat{\mathbf{a}}) = \sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{v}_k \quad (18)$$

総変動は次の(19)式で計算される．さらにこれらの残差二乗和と総変動から決定係数は次の(20)式で計算される．

$$s_y = \sum_{k=1}^{nt} {}^t(\mathbf{b}_k - \bar{\mathbf{b}})\cdot(\mathbf{b}_k - \bar{\mathbf{b}}) = \sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{b}_k \cdot \mathbf{b}_k - \frac{1}{nt}\left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{b}_k\right)\cdot\left(\sum_{k=1}^{nt}\mathbf{b}_k\right) \quad (19)$$

$$COD = 1 - \frac{s(\hat{\mathbf{a}})}{s_y} \qquad (20)$$

測定誤差からの誤差伝播

温度や日射量の測定誤差やガス濃度やガス発生量の測定誤差分散から推定パラメータへの誤差伝播を記述する．いま x_i と g_i の測定値が瞬時的な観測誤差分散 σx^2 と σg^2 を持つとする．これらの x_i と g_i を Δt の区間で積分した値と増分を時系列方向に総和して使用するが，x_i と g_i に関する Δt 積分結果の誤差分散 $s\,\sigma x^2$，$s\,\sigma g^2$ や，増分計算結果の誤差分散 $b\,\sigma x^2$ は，誤差伝播則により次の様に計算される．

$${}_b\sigma_{xi}^{\ 2} = 2\cdot\sigma_{xi}^{\ 2} \qquad (21)$$

$${}_s\sigma_{xi}^{\ 2} = \frac{1}{2}\cdot\Delta t^2\cdot\sigma_{xi}^{\ 2} \quad (22) \qquad {}_s\sigma_{gi}^{\ 2} = \frac{1}{2}\cdot\Delta t^2\cdot\sigma_{gi}^{\ 2} \quad (23)$$

ここで測定データのベクトルと，これらが持つ誤差分散ベクトルを次のように定義する．

$${}_b\mathbf{x}_k = {}^t\left({}_bx_{1k},\cdots,{}_bx_{nk}\right) \quad (24) \qquad {}_b\boldsymbol{\sigma}_k = {}^t\left({}_b\sigma_{x1},\cdots,{}_b\sigma_{xn}\right) \quad (25)$$

$${}_s\mathbf{x}_k = {}^t\left({}_sx_{1k},\cdots,{}_sx_{nk},\cdots,{}_sx_{n+no,k}\right) \qquad (26)$$

$${}_s\boldsymbol{\sigma}_x = {}^t\left({}_s\sigma_{x1},\cdots,{}_s\sigma_{xn},\cdots,{}_s\sigma_{xn+no}\right) \qquad (27)$$

$${}_s\mathbf{g}_k = {}^t\left({}_sg_{1k},\cdots,{}_sg_{ngk}\right) \quad (28) \qquad {}_s\boldsymbol{\sigma}_g = {}^t\left({}_s\sigma_{g1},\cdots,{}_s\sigma_{gng}\right) \quad (29)$$

${}_b\mathbf{x}_k$，${}_s\mathbf{x}_k$，${}_s\mathbf{g}_k$ は各々真値に誤差 ${}_b\mathbf{s}_{xk}$，${}_s\mathbf{s}_{xk}$，${}_s\mathbf{s}_{gk}$ が加わったものと見なす．パラメータの推定誤差原因は x_j と g_j の測定誤差だけとすれば，真値の x_j と g_j は状態方程式誤差を 0 にする．また(7)の拘束条件は測定誤差と無関係だから，(8)式等から次式が記述できる．

$$\boldsymbol{\varepsilon}_k = \begin{bmatrix} -\mathbf{M}\cdot{}_b\mathbf{x}_k + [\mathbf{C},\mathbf{C_o}]\cdot{}_s\mathbf{x}_k + \mathbf{R}\cdot{}_s\mathbf{g}_k \\ \mathbf{d} - \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{a}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{M}\cdot{}_b\mathbf{s}_{xk} + [\mathbf{C},\mathbf{C_o}]\cdot{}_s\mathbf{s}_{xk} + \mathbf{R}\cdot{}_s\mathbf{s}_{gk} \\ \mathbf{d} - \mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{a}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{M}\cdot{}_b\mathbf{s}_{xk} + [\mathbf{C},\mathbf{C_o}]\cdot{}_s\mathbf{s}_{xk} + \mathbf{R}\cdot{}_s\mathbf{s}_{gk} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (30)$$

この ε_k の上半分を ${}_u\varepsilon_k$ と表すことにする．

$${}_u\boldsymbol{\varepsilon}_k = -\mathbf{M}\cdot{}_b\mathbf{s}_{xk} + [\mathbf{C},\mathbf{C_o}]\cdot{}_s\mathbf{s}_{xk} + \mathbf{R}\cdot{}_s\mathbf{s}_{gk} \qquad (31)$$

状態方程式誤差が x_j と g_j の測定誤差だけに起因するとすれば，方程式誤差 ${}_u\varepsilon_k$ の期待値マトリックスは次式で計算される．

$$\begin{aligned} E({}_u\boldsymbol{\varepsilon}_k\cdot{}_u\boldsymbol{\varepsilon}_k) &= \mathbf{M}\cdot E({}_b\mathbf{s}_{xk}\cdot{}_b{}^t\mathbf{s}_{xk})\cdot{}^t\mathbf{M} \\ &\quad + [\mathbf{C},\mathbf{C_o}]\cdot E({}_s\mathbf{s}_{xk}\cdot{}_s{}^t\mathbf{s}_{xk})\cdot{}^t[\mathbf{C},\mathbf{C_o}] \\ &\quad + \mathbf{R}\cdot E({}_s\mathbf{s}_{gk}\cdot{}_s{}^t\mathbf{s}_{gk})\cdot{}^t\mathbf{R} \\ &= \mathbf{M}\cdot diag({}_b\boldsymbol{\sigma}_x\cdot{}_b{}^t\boldsymbol{\sigma}_x)\cdot{}^t\mathbf{M} \\ &\quad + [\mathbf{C},\mathbf{C_o}]\cdot diag({}_s\boldsymbol{\sigma}_x\cdot{}_s{}^t\boldsymbol{\sigma}_x)\cdot{}^t[\mathbf{C},\mathbf{C_o}] \\ &\quad + \mathbf{R}\cdot diag({}_s\boldsymbol{\sigma}_g\cdot{}_s{}^t\boldsymbol{\sigma}_g)\cdot{}^t\mathbf{R} \end{aligned} \qquad (32)$$

これにより下半分のベクトルも加わった ε_k の期待値マトリックスは次式で計算される．

$$E(\boldsymbol{\varepsilon}_k\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_k) = \begin{bmatrix} E({}_u\boldsymbol{\varepsilon}_k\cdot{}_u\boldsymbol{\varepsilon}_k) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \qquad (33)$$

ここに誤差 ${}_b\mathbf{s}_{xk}$，${}_s\mathbf{s}_{xk}$，${}_s\mathbf{s}_{gk}$ の間での共分散は 0 であることと，これら３つのベクトル内の要素間の共分散も 0 である性質を用いた．また $diag$ はこの括弧の中のマトリックスの対角要素だけによって構成されるマトリックスを表す．この(33)式による方程式誤差の期待値マトリックスを，(17)式のそれの代わりに用いることで，測定誤差からの推定パラメータの分散共分散マトリックス ${}_m\boldsymbol{\Lambda}_a$ が計算される．

$${}_m\boldsymbol{\Lambda}_a = \left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}\cdot\mathbf{F}\right)^{-1}\cdot\left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}\cdot E(\boldsymbol{\varepsilon}_k\cdot{}^t\boldsymbol{\varepsilon}_k)\cdot\mathbf{F}\right)\cdot{}^t\left\{\left(\sum_{k=1}^{nt} {}^t\mathbf{F}\cdot\mathbf{F}\right)^{-1}\right\} \quad (34)$$

モデル前提の不適合率

数学モデルの前提が，どの程度実現象で成り立っているかの判断を，この ${}_m\Lambda_a$ に対して Λ_a の大きさを比較することによって行うことができる．ここで ${}_m\Lambda_a$ の j 番目の対角要素を ${}_m\sigma_{\lambda\,j,j}^{\ 2}$ で，Λ_a の j 番目の対角要素を $\sigma_{\lambda\,j,j}^{\ 2}$ で表す．これらの対角要素の平方根をとって，次式の比率 β を定義する．全ての対角要素についての β を平均化したものはモデル前提の不適合率と呼ぶことにする．

$$\beta_j = \frac{\sigma_{\lambda\,j,j}}{{}_m\sigma_{\lambda\,j,j}} \quad (35) \qquad \bar{\beta} = \frac{1}{na}\sum_{j=1}^{na}\beta_j \quad (36)$$

このモデル前提の不適合率が大きい場合には測定の条件やモデルに不適切なところがあると考えられるので，やり直す必要がある．

さらに不合理な負のコンダクタンスが推定された場合の状況から考案した評価指標もあるが紙幅により割愛する．

まとめ

多くの測定法は，実現象を単純化した方程式モデルでのパラメータ推定である以上，モデル前提と実現象の食い違いは避けられない．この信頼性評価指標として，最小二乗法に基づき，方程式残差および測定誤差からの伝播式を導き，モデル前提の不適合率と呼ぶ指標を定義した．今後は事例検討も行っていきたい．

【参考文献】

[1] 例えば：空気調和･衛生工学会規格「SHASE-S116-2003 トレーサーガスを用いた単一空間の換気量測定法」,2004 年 6 月 2 日第一刷発行

[2] 奥山博康：「一般拡散システムの回路網による状態方程式とそのシステムパラメーターの同定理論」，日本建築学会論文報告集，Vo1．344，1984 年 10 月，pp103-115

[3] Charles L. Lawson, Richard J. Hanson (1974) “Solving Least Squares Problems”, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia ISBN0-89871-356-0 (pb)

*1 清水建設(株)技術研究所・上席研究員・工博

*1 Chief Research Engineer, Institute of Technology, Shimizu corporation, Dr. Eng.