

**最適化**

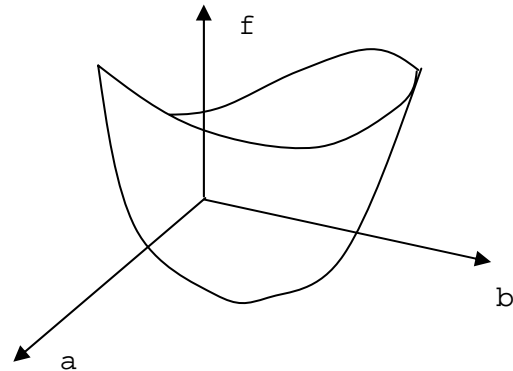
ここに、あるパラメータ  $p, q, r, \dots$  で表現される関数  $f(p, q, r, \dots)$  がある。このとき目的となる関数  $f$  を最小化 (あるいは最大化、あるいは 0 を含む定数化) するパラメータを求めることを最適化と言う。

今まで学習した最適化の例

最小二乗法：ある  $N$  個のデータ  $(x_i, y_i)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) をある関数  $g$  で表現したい。このとき関数  $g$  はパラメータ  $a, b, \dots$  で表現される (一次方程式の場合は  $a$  と  $b$ )。

→ あるパラメータ  $a_1, b_1, \dots$  を仮に決めれば、 $x_i$  に対して計算値  $y'_1, y'_2, \dots, y'_N$  を求めることができ、さらに実際のデータ  $y_1, y_2, \dots, y_N$  と比較することができる。

→ 比較によって計算できる残差の二乗和  $R = \sum (y'_i - y_i)^2$  を最適化のための目的関数  $f$  とすれば、この目的関数  $f$  のパラメータも  $a, b, \dots$ 。したがって目的関数  $f$  を最小にするようなパラメータを求めると、結局ある  $N$  個のデータを最も良く表現する関数  $g$  を求めたことになる。



**この最適化の概念は物質収支の概念に引けを取らないくらいに Super 重要。**

Excel には最適化を簡潔に行うために「ソルバー」なるツールが用意されている。そこで指定するのは目的セル (目的関数) と目的値 (最小化、定数、最大化) と変化させるセル (パラメータ) である。もちろん目的セルを決めるのは我々。

例題 0

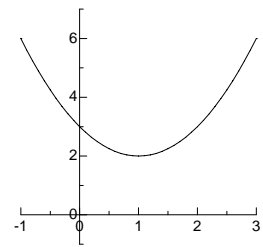
$y = x^2 - 2x + 3$  の最小値を与える  $x$  を求めなさい。 (答え  $x=1$ )  
 (目的関数は  $y$  でパラメータを  $x$  とすれば上の「ソルバー」が使えるぞ。)

	A	B	C
1	x=	3	
2	y=	6	
3			
4			
5			

初期値として適当な数字を入れておく。ここでは 3

=B1^2-2\*B1+3  
 セル (B1) の 2 乗から 2 倍のセル (B1) を引き、3 を足す。

まず目的セル (B2) を選択した状態でソルバーを立ち上げる。



	A	B	C
1	x=	1	
2	y=	2	
3			

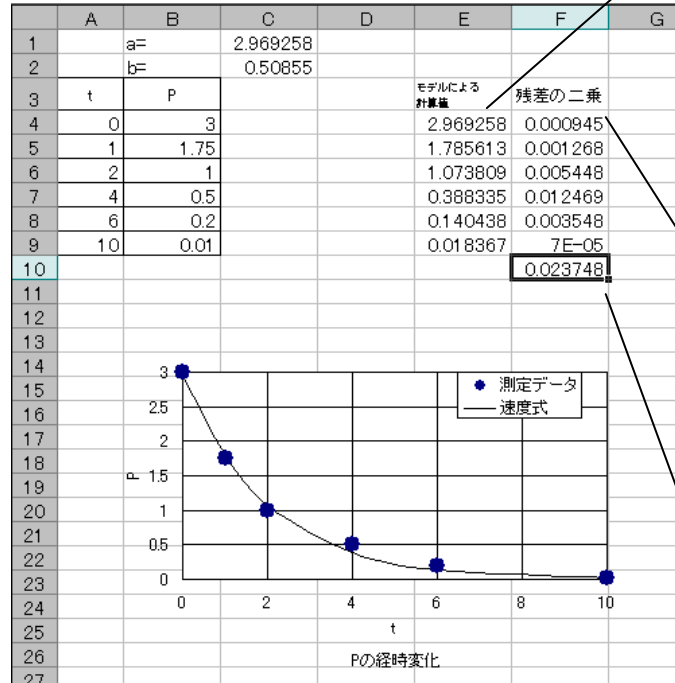
目的セル (B2) 目標値 (最小値) 変化させるセル (B1) を選択して実行。

例題 1

ここに、時間  $t$  と物理量  $P$  の5つの実験データの組がある。経験的に理論式  $P=a \cdot \exp(-b \cdot t)$  に従うことが分かっているとき。パラメータ  $a$  と  $b$  を決めなさい。

Table 1 P の経時変化

t	P
0	3
1	1.75
2	1
4	0.5
6	0.2
10	0.01



= $\$C\$1 * EXP(-\$C\$2 * A4)$   
 "\$"マークはセルをコピーしても動かしたくないセルの列と行に付ける。この場合c列1行とc列2行のセルは動かしたくない。

モデルによる計算値 (F列) と実際の値 (B) 列をそれぞれ評価する (差の2乗を求める)。2乗にする理由を考えよう。

=SUM(F4:F9)  
 F4からF9までの総和を求める。  
 このセルの値が最も小さくなれば、モデルによる計算値とPの値とが一致することになる。  
 すなわちこのセルが目的セル

応用問題

$n$  次反応の A 成分の反応速度式が  $-\frac{dC_A}{dt} = k \cdot C_A^n$  で表現されるとき、 $C_A$  の初期値を  $C_{A0}$  とすると  $\frac{C_A}{C_{A0}} = (1 + (n-1) \cdot k \cdot C_{A0}^{n-1} \cdot t)^{\frac{1}{1-n}}$  となる。与えられた条件で反応次数  $n$  と反応速度定数  $k$  を求めよ。

Table 2 ある  $n$  次反応の濃度変化

t[h]	$C_A$ [mol/m <sup>3</sup> ]	$C_A/C_{A0}$
0	50	1
0.5	30	0.6
1	18	0.36
2	12	0.24
4	8	0.16
10	4	0.08