

京都大学工学部 学生員 寺 脇 正文
 京都大学工学部 正 員 井 上 頼 輝
 京都大学工学部 正 員 古 市 徹

1. はじめに. 帯水層における地下水汚染シミュレーションの流れ場の算定に際し, 水位(h)のデータから透水量係数(T)を推定するという, いわゆる逆問題を考える. 逆問題は, 観測や離散化に起因する制御しきれない誤差の存在により, 一般に ill-posed problem となる. すなわち, 一意に解が決まらず, または観測データの変動に対し解が連続的に応答せず, 不適切問題となる. 不適切問題を解く鍵は, 適切なモデル化, 事前情報の有効な追加にある. その手法は大きく直接法と間接法に分類される(Fig-1). 本報では, 直接法のもとを受け, 逆問題に対する統計的アプローチとして Newman & Yakowitz⁽¹⁾によって開発された手法を用いて, 模擬帯水層で計測したデータから T を推定した結果を示し, その構造を考察する.

2. 定式化とアルゴリズム. 本アプローチの特徴は, 逆問題へ統計的理論を導入し T についての事前情報を有効に利用できることである. 導入した基礎となる理論は Chavent⁽²⁾によって開発され, 一般化された非線形最小自乗の場合まで拡張した変分理論であり, その理論の計算手法としては有限要素法を適用している. また最適解を求めるために Newton法と結合した Fletcher-Reeves法⁽³⁾(微係数を用いる共役傾斜法)を用いている. そして, 感度係数と呼ばれる h の微分項を計算しなくともよい. さらに, 逆問題は T の代わりにその対数 $Y = \log T$ の形によって提示される. 具体的には以下のように定式化される. 等方性の一様でない帯水層中の定常流れは一般に Poisson 方程式(1)式で記述される. q は流量生成率, (1)式を Galerkin法による有限要素法で離散化すると(2)式となる. A は N 次正方行列, h, Q は N 次元ベクトル, N は離散点数. フラックスや sink/source データの誤差やモデル化による誤差は水位の初期推定値 h^* における誤差 ϵ に比べて無視しえることが理論的に示せるので(3)式を(2)式に導入して(4)式を得る. ϵ の平均と共分散は(5)式, (6)式で与えられる. $\hat{Y}$ を Y の推定値とする. $\hat{Y}$ は(7)式の合成された最小自乗基準 $J(\hat{Y})$ を最小にするような特別なベクトルとして求まる. この際, 最適化手法

Fig.1 Direct Method & Indirect Method

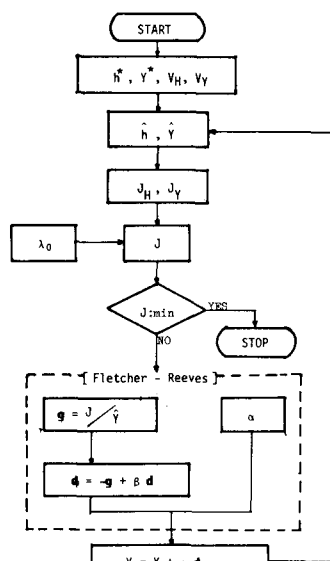


Fig.2 Argolysm

として Fletcher-Reeves法を用いる. (7)式中の J_H は(8)式で表わされ, モデルをデータに適合させたいというモデル

- (1) $\nabla \cdot T \nabla h - q = 0$ ル適合化基準といえる. J_Y は(9)式で, (4)式の確率有限要素モデルと矛盾することなく, 初期推定値 Y^* に矛盾しない良好な推定値 $\hat{Y}$ を求めるためのパラメータの合理性を保つ基準で
 (2) $A \cdot h - Q = 0$ 平滑化の効果を与える. この J_Y の導入の根拠として, ①拡張した Bayes 帰帰理論, ②多目的計画法, ③正則化法, 等が考えられる. Y^* は Y の初期推定値で(10)式で表わされる. v は
 (3) $h^* = h + \epsilon$ ランダム誤差でその平均と共分散は(11), (12)式で表わされる. (6), (12)式
 (4) $h^* - A^{-1} \cdot Q = \epsilon$ の $\sigma_h^2, \sigma_\epsilon^2$ は正のスカラー, V_h, V_ϵ は正方行列で geostatistical 理論に
 (5) $E(\epsilon) = 0$ 基づく Kriging 法等によって決められる. この手法のアルゴリズムを
 (6) $V(\epsilon) = \sigma_\epsilon^2 \cdot V_h$ Fig-2 に示す. 本手法のポイントは(7)式中の λ_0 の決定の仕方にあり Fig-3 のように三通りに分かれる. 第一は h と T の観測データ h_0, T_0 が得られ, それらから $\sigma_h^2, \sigma_\epsilon^2$ がわかる場合
 (7) $J(\hat{Y}) = J_H(\hat{Y}) + \lambda_0 J_Y(\hat{Y})$
 (8) $J_H(\hat{Y}) = [h^* - A^{-1} \cdot Q]^T V_h^{-1} [h^* - A^{-1} \cdot Q]$
 (9) $J_Y(\hat{Y}) = (Y^* - \hat{Y})^T V_Y^{-1} (Y^* - \hat{Y})$
 (10) $Y^* = Y + v$
 (11) $E(v) = 0$
 (12) $V(v) = \sigma_v^2 \cdot V_Y$

で、 $\lambda_0 = \sigma_h^2 / \sigma_T^2$ とする。第二は λ の観測データしか得られない(暗しわかからない)場合で、このときは操作パラメータ λ に対する平均残差和の二乗 $S = \sum_{i=1}^n y_i^2$ を指標とし、 S が λ_0 と等しくなる λ を λ_0 とする。第三は λ_0 も σ_h^2 もわからない場合で、このときは残差誤差の平均、 $\bar{y}$ 等の統計量を比較することによって λ_0 の存在する範囲を同定する。

3. 計算結果と考察. 本研究では、仮想データとある模擬帯水層からの実測データについて適用を行なった。まず仮想データへの適用の結果について考察する。Fig-4は $\sigma_T^2 = 1, 25, 100 (\% \text{ day})^2$ のそれぞれについての σ_h^2 と R_T の関係である。 R_T は T についての初期推定値誤差の分散に対する計算された推定値誤差の分散の比であり、Fig-5は σ_h^2 と R_h の関係で、 R_h は h についての初期推定値誤差分散に対する推定値誤差分散の比である。Fig-4・5から、 T についても h についても推定値の誤差分散が減少していることがわかる。すなわち、初期推定値より真の値に近い推定値が得られる。Fig-4からは、 R_T の減少は σ_h^2 が小さいほど大きいことがわかる。これは、 σ_h^2 が h における測定または初期推定の精度と考えられることから、 h の測定および初期推定の精度が高いほど、 T についてより良い推定値が得られることを意味する。また σ_T^2 が大きい方が R_T が小さい。これは、 T についての初期推定値誤差分散が大きいほど、その改善率は良いといえるが、推定値誤差分散の絶対値が小さくなっているとはいえない。さらにFig-4とFig-5を比べると、 σ_h^2 に対する R_T の増加率と R_h の減少率がほぼ同じであることがわかる。このことは、(7)式の J におけるモデル適合化基準 J_h とパラメータ合理性基準 J_T がトレードオフすることを示しており、 J の合成において多目的計画法のテクニックを導入していた本手法の意義が示せる。

次に実測データへの適用の結果について述べる。実測データからKriging法によって $\sigma_h^2 = 1.7 \times 10^{-6} (\text{cm}^2)$ という値を得た。Fig-6は $J_T^{1/2} - S^2$ の関係である。Fig-6から明らかに S が λ_0 と等しい値の前後で勾配が急に変化しているのがわかる。したがって λ_0 が既知で σ_T^2 が未知のとき、逆問題を解く指標として S を用いればよいことが確かめられた。Fig-7には T の初期推定値 T^* と推定値 $\hat{T}$ のコンターを示した。後者の方が全体的になだらかとなっているのがわかる。Fig-8は h の初期推定値 h^* と推定値 $\hat{h}$ のコンターで、後者の方が物理的に予測されるものにかなり近くなっているのがわかる。

4. おわりに. 今後の課題として、本研究で推定した T により算定した流れ場を用いた拡散シミュレーションが、汚染物質(R.I., 重金属等)のシミュレーションをより精確に行なえることを検証してみる必要がある。

[参考文献]

- (1) 清水 健; 京大工学部衛生工学科特別卒業論文 1980
- (2) Newman S.P. & S.Yakowitz; W.R.R.vol.15, No.4 1978

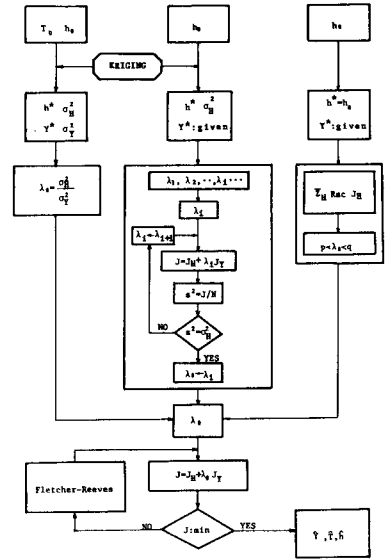


Fig.3 Ditermination of λ_0

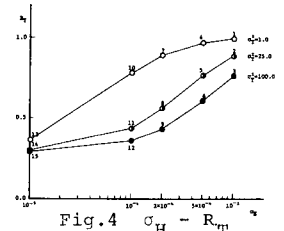


Fig.4

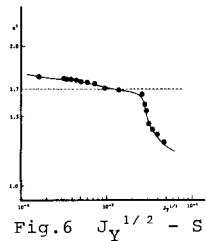


Fig.6 $J_T^{1/2} - S^2$

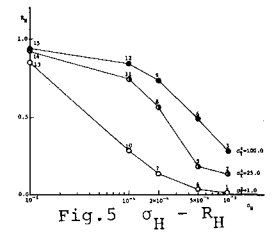
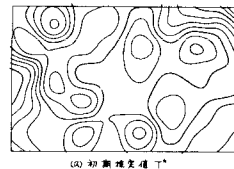
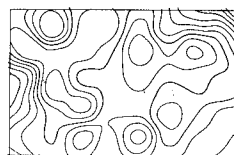


Fig.5 $\sigma_h^2 - R_h$

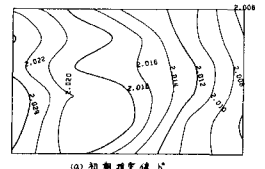


(a) 初期推定値 T^*

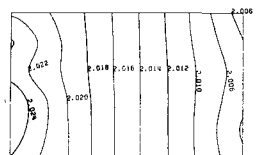


(b) 計算された推定値 $\hat{T}$

Fig.7 Contour of T



(a) 初期推定値 h^*



(b) 計算された推定値 $\hat{h}$

Fig.8 Contour of h