

地下水理逆解析における計算機記憶容量 節約アルゴリズム

Computer Memory Saving Algorithm for Inversion in Groundwater Model

増本 清¹
Kiyoshi MASUMOTO

¹正会員 博(工) 島根大学講師 総合理工学部地球資源環境学科 (〒690-8504 島根県松江市西川津町1060)

Computer memory saving algorithm for inverse analysis of heterogeneous hydraulic property was developed. Inversion for heterogeneous model needs so many unknown parameters. To compute inversion and to identify the large number of unknowns, high-speed inversion code must be used. For groundwater inverse modeling, the combination of SSVM (Self Scaling Variable Metric method) and adjoint state method, one of the most efficient algorithms for a problem of many unknown parameters, is used. This paper shows memory saving algorithm for this with keeping calculation speed. The memory of developed algorithm is almost proportional to N_p , the number of unknowns, while that of usual algorithm is almost proportional to N_p^2 . By the method, a problem of even more than 100,000 unknown parameters is possible to calculate with usual pc, when the problem is well-posed. Numerical case studies show the code of the algorithm is efficient.

Key Words : *memory saving algorithm, heterogeneous hydraulic property, groundwater inverse modeling*

1. はじめに

不均質な地下の水理特性を評価し、適切な地下水流動モデルを構築することが、ダムや地層処分などで重要な課題となっている。特に強い不均質性を呈する地盤あるいは岩盤における地下水モデリングにおいて、空間的な物性分布を表すために多数の未知パラメータを想定した逆解析が必要となる。

このような多数の未知パラメータで表される物性分布を逆解析により推定するために、ハイドロパルストモグラフィ¹⁾のような非定常データを多量に取得する計測法が提案されている。ハイドロパルストモグラフィは、人為的に非定常流動を起こし、多点同時計測を多数行うものである。こうした多量の非定常計測データを逆解析して不均質地下水理を推定する試みが近年、行われるようになってきている²⁾³⁾⁴⁾⁵⁾。

このような不均質水理逆解析は、多量のデータを用いて大規模な順解析を要する非線形逆解析として定式化される。したがって、計算量(計算速度と記憶容量)が重要な課題となっている。非線形逆問題の非適切性の問題も併せて解決するためのツールとして、高速・低容量の

逆解析アルゴリズムを開発することが重要である。これまでに大規模未知パラメータに対して高速計算アルゴリズムとしてSSVM法とAdjoint法を組み合わせた方法が提案されている⁶⁾⁷⁾。この逆解析法により1000個以下程度の未知パラメータ数に対してもワークステーションレベルの逆解析が可能となる。しかし数万個以上の未知パラメータ数に対しては記憶容量が問題となる。そこで本研究は、数万個以上の未知パラメータ数に対応するための逆解析ツールとして、計算速度を落とさずに記憶容量を大幅に節約したアルゴリズムを開発することを目的とする。

一方で、逆問題の観点からは未知パラメータ次元をむやみに増大させることは不適切性の問題を生じることがある。こうした不適切性を回避する方法として、未知パラメータになんらかの制限ないし拘束条件を与えることが行われる。その内で、最も典型的な方法として、ゾーニングなどにより未知パラメータ数(未知パラメータ次元)を減らす方法がある。しかし、不均質な地盤を対象とするわれわれの問題に対しては、安易に未知パラメータ次元を減らすためのゾーニングは大きなモデル誤差を生じる危険性が高い⁸⁾。逆問題解析においては、モデル

誤差や計測誤差などのバランスが重要であり、「折衷」により適切な未知パラメータの設定を行うことが肝要である。また、未知パラメータ数を減らさずに適切化をはかる方法として「正則化」がある。これは、未知パラメータに関するなんらかの拘束条件（しぼり）をペナルティ関数の形で表し、評価関数にこのペナルティ関数を加えることにより実現する。この場合、未知パラメータ数が多くても逆解析が適切化することになる。すなわち、逆解析上、独立な未知パラメータ数を減らすのと同様の効果がある。ペナルティ関数の形態としては未知パラメータベクトルのノルム（最小ノルム問題）や、物性変動の滑らかさを表す空間変数による微分値などが用いられる。元来、こうした正則化法は線形逆問題において有力な方法であったが、われわれが対象とする非線形逆問題においても適用は可能と考えられる。本研究が対象とする不均質性を扱う逆問題においては、こうした未知パラメータ数が多い問題に対応できる逆解析コードをツールとして準備することが極めて重要である。ゾーニングによらない未知パラメータ数削減方法も種々あり、これらの方法との比較研究はまだ発展途上の段階にあり、これらの検討を行うためにも多数未知パラメータに対応したツールが不可欠である。

また、不適切問題の対処法として、計測データの質と量などと併せて検討することも重要である。しかし、ここでは、計測形態に関する議論までは踏み込まない。本論文では、増大した未知パラメータ数に対しては、計測法あるいは適切な正則化法を適用することにより不適切性の問題が排除できる場合もあることを想定して、多数の未知パラメータに対応した効率的逆解析手法を示すことを目的とする。本手法により、数万個ないし数十万個のパラメータを同時に未知として逆解析の計算にのせることが期待できる。

新しく開発したアルゴリズムによる数値実験を行い、従来法との比較検討を行い、有効性を検討する。数値実験においてはスムージングによるペナルティを評価関数に加えることにより不適切問題に対処した。

2. SSVM法と高速勾配計算法による3次元不均質地下水理逆解析アルゴリズムの概要

2.1 逆解析アルゴリズムの基本形

(1) 逆問題の定式化

不均質な水理特性を推定するために、複数孔を用いて多点非定常圧力データを観測して、逆解析手法により3次元的水理特性分布を得るハイドロパルストモグラフィ手法が提案されている。ハイドロパルストモグラフィの計測法および解析法の詳細は文献を参照されたい。ここでは解析法の概要を示す。

地下水流動を支配する基礎方程式は、ダルシーの法則

と連続の式より導かれた次の支配方程式(1)で表される。

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{\phi c} \left[\nabla \cdot \left\{ \frac{K}{\mu B} \nabla (p - \rho g z) \right\} - Q \right] \equiv f \quad (1)$$

ただし、 ϕ ：間隙率、 c ：圧縮率、 K ：浸透率(permeability)、 μ ：粘性係数、 B ：容積係数(formation volume factor)、 p ：間隙水圧、 ρ ：流体密度、 g ：重力加速度、 z ：鉛直深度、 Q ：流量である。また、右辺を f とおく。

ここでは、順解析は水理物性値と適当な初期・境界条件を与えることにより解くことをいう。ここで対象とする不均質な地下水理特性を扱うために、有限差分法のような数値解析手法を用いて解くことになる。

一方、逆解析は順解析の入力情報である水理特性値等を未知パラメータとして解く問題となる。具体的には、順解析で得られた計算圧力値と計測して得られた計測圧力値の差異から構成される評価関数値を最小とするような水理物性等の未知パラメータを求める非線形最適化問題として定式化することができる。評価関数 J の基本形は次式(2)で表される。

$$J = P + \sum_{n=1}^N j^n \quad (2a)$$

$$j^n = \sum_{m=1}^{N_w} \sum_{\ell=1}^{N_t} W_{\ell}^{m,n} \left\{ p_{cal,\ell}^{m,n}(\mathbf{u}) - p_{obs,\ell}^{m,n} \right\}^2 \quad (2b)$$

ここで、 P はペナルティ関数を表す。 W は重み、 p_{cal} 、 p_{obs} はそれぞれ計算圧力値と観測圧力値を表す。 \mathbf{u} は未知パラメータからなるベクトルを表す。 N_t 、 N_w 、 N はそれぞれ総時間ステップ数、観測点数、試験回数（ハイドロパルステストの場合、注水点数）をそれぞれ表す。評価関数の発展的形態として正則化項を追加した形態や圧力時間変化率の残差2乗和⁷⁾などが考えられているが、ここでは簡単のため基本形を想定する。不均質な地下水理特性分布を未知とする場合、有限差分法において隣接する差分格子間の浸透率などが未知パラメータとなり、差分格子数の増加に伴い、未知パラメータの数が増大することになる。未知パラメータベクトルは例えば、有限差分法における格子間浸透率のみを未知とした場合は、次のように表される。

$$\mathbf{u} = \left(K_{\frac{3}{2},1,1}, \dots, K_{N_x-\frac{1}{2},1,1}, K_{\frac{3}{2},2,1}, \dots, K_{N_x,N_y,N_z-\frac{1}{2}} \right)^T \quad (3)$$

ここで、下付添字 N_x, N_y, N_z はそれぞれ、 x, y, z 方向の差分格子数を表している。

未知パラメータとして、各差分格子の間隙率をとることも可能である。

(2) SSVM法による非線形最適化

評価関数の形態から最小2乗問題としてガウスニュートン法を用いることもできる。しかし、多数の未知パラメータを用いる場合は、評価関数の勾配計算の計算量の問題から準ニュートン法のような勾配法を用いる方が計算量は少ないことが知られている⁶⁾⁷⁾。勾配法を用いるのは後述するAdjoint法と組み合わせることにより順解析計算回数を大幅に減らすためである。ガウスニュートン法に対してAdjoint法を適用しても、各圧力値に対する微分値を必要とするため順解析計算回数を大幅に減らすことができない。ここでは、未知パラメータ数を多数必要とするため、計算速度の観点からAdjoint法と準ニュートン法の組み合わせが有効である。特に準ニュートン法においては直線探索に伴う計算量増加を極力抑えたSSVM法公式族が効率的とされている。SSVM法では、ヘッセ行列の逆行列を近似した行列 \mathbf{B} が次のSSVM公式族を用いて更新される。

$$\mathbf{B}_{k+1} = \omega_k \left(\mathbf{B}_k - \frac{\mathbf{B}_k \mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k} + \alpha_k \left(\mathbf{y}_k^T \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k \right) \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k^T \right) + \frac{\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} \quad (4)$$

ただし、

$$\mathbf{v}_k = -\frac{\mathbf{s}_k}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} + \frac{\mathbf{w}_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{w}_k} \quad (5)$$

$$\omega_k = (1 - \beta_k) \frac{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{w}_k} + \beta_k \frac{\mathbf{s}_k^T \nabla J_k}{(\nabla J_k)^T \mathbf{w}_k} \quad (6)$$

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{u}_{k+1} - \mathbf{u}_k \quad (7)$$

$$\mathbf{y} = \nabla J_{k+1} - \nabla J_k \quad (8)$$

$$J_k \equiv J(\mathbf{u}_k) \quad (9)$$

$$\nabla J_k = \left(\frac{\partial J}{\partial u_{k,1}}, \frac{\partial J}{\partial u_{k,2}}, \dots, \frac{\partial J}{\partial u_{k,Np}} \right)^T \quad (10)$$

$$\mathbf{u}_k = (u_{k,1}, u_{k,2}, \dots, u_{k,Np}) \quad (11)$$

添字 k は準ニュートン法の反復回数を表す。上付き添字 T は転置を表す。 α_k, β_k は、1以下の任意正数をとることができる。下付添字 N_p は未知パラメータの数を表す。 ω はスケールングファクターと呼ばれ、上に示したように ω をヘッセ逆行列 \mathbf{B}_k に反復毎に乗じることにより直線探索をほとんど行わない準ニュートン公式となる。これがSSVMの特徴である。

上記のように、準ニュートン法の反復公式をそのまま使用する場合、対称行列であるヘッセ行列の逆行列の近似行列 \mathbf{B}_k (以下、ヘッセ逆行列と略す) を反復毎に記憶しておく必要があることがわかる。

(3) 随伴法による勾配計算法

随伴法(Adjoint法)は、新たに随伴関数を導入することにより、順解析1回とそれに付随する差分方程式(随伴方程式)を1回解くだけの計算量で評価関数 J の勾配を計算するものである。随伴方程式は終端条件を用いて数値的に解くことができる。(1)式を離散化した式に対応した随伴方程式は(12)式のようになる。

$$\frac{\delta q_i^n}{\delta \mathbf{x}^n} = -\sum_{\ell=1}^{Nb} \left(q_\ell^n \frac{\partial f_\ell^n}{\partial p_i^n} \right) + \frac{\partial J^n}{\partial p_i^n} \quad (12)$$

$$q_i^{Nt} = 0 \quad (13)$$

ここで、 δt^n は n ステップ目の時間ステップ間隔、 $\delta q_i^n / \delta t^n$ は随伴関数の時間変化率を表し、順解析の離散化の方法に応じた差分式とする。 f_ℓ^n は(1)式右辺を離散化して得られる n 時間ステップの差分式である。 Nb は差分格子数を表す。

計算された随伴関数と順解析で得られた圧力値から、評価関数 J の勾配は次の(14)式により計算することができる。

$$\frac{\partial J}{\partial u_m} = \sum_{i=1}^{Nb} \sum_{n=1}^{Nt} \left(-q_i^n \frac{\partial f_i^n}{\partial u_m} \right) \delta \mathbf{x}^n \quad (14)$$

(14)式による勾配計算の計算量は順解析に比べて無視できる程度である。したがって、勾配計算に要する計算量は、順解析1回と随伴方程式を解く計算量を合わせたものとなる。準ニュートン法の反復1回につき、勾配計算が1回と直線探索に必要な順解析回数分の計算量を必要とする。ここでは、SSVM法により直線探索をほとんど行わないアルゴリズムとなっているので、準ニュートン法の反復1回につき、勾配計算に要する順解析1回と随伴方程式1回の計算量となる。なお、順解析が非線形の場合でも、随伴方程式は線形方程式となるので時間ステップ毎の計算量は順解析の2~3割程度になる(非線形方程式

を解く際の平均反復回数の逆数倍に相当)。また、未知パラメータ数に関わらず、順解析1回の計算量で計算量が決まる。このことは、実際の複雑なモデルに対して、計算時間（あるいは計算速度）に関しては未知パラメータの数は制約条件にならないことを示しており、順解析計算時間が同じなら未知パラメータ数をいくら増やしても良いことを示している。ただし、不適切性の問題などで、収束までの準ニュートン反復回数が増える場合はそれに応じて順解析回数が増えるのでこの限りでない。不適切性の問題は別途議論する必要があるが、本論文では扱わない。

2.2 計算機記憶容量の現状と問題点

通常準ニュートン法に対して、未知パラメータ増大に伴い増大する記憶容量を節約するアルゴリズムが示されている⁹⁾。本節では、この手法を拡張してSSVM法に適用することにより、高速の計算速度を損なわずに計算記憶容量を節約する方法を示す。すなわち、スケーリングファクター ω を含む準ニュートン公式に対する記憶容量節約アルゴリズムを示すものである。

計算速度を優先した場合、逆解析プログラム内の変数の記憶容量Mの大部分は、未知パラメータ数 Np とタイムステップ数 \times パルステスト回数 \times 差分格子数 ($Ntsb$) によって決まってくる。具体的には、

$$M \propto \frac{Np^2}{2} + 2Ntsb \quad (15)$$

と書ける。(15)式の右辺第1項は準ニュートン法において、近似ヘッセ行列または逆行列（対称行列）の記憶容量に相当する。 Np の2乗に比例するので未知パラメータ数が増えるにしたがって必要とする記憶容量が増大することになる。(15)式の右辺第2項は、順解析計算で得られた全差分格子全時間ステップの圧力値を記憶する領域に相当し、随伴方程式(12)を解く際に必要となる。

随伴方程式を解く際に必要となる係数行列の計算には順解析と同様のサブルーチンを用いることができる。線形の場合はこの係数行列を一度計算して記憶しておけば順解析同様係数行列を時間ステップ毎に計算しなくても済む。しかし、問題が非線形の場合は順解析において時間ステップ毎に係数行列を計算する必要がある。このような非線形問題に対する随伴方程式を解く場合は、終端時刻から逆時間に解く必要から全時間ステップ毎の係数行列を全て記憶することになる。ただし、係数行列の計算自体は行列方程式を解くことに比べて微小であるため、係数行列の計算に必要となる全時間ステップ毎の全差分格子の圧力値のみを記憶しておけば十分である。この部分の記憶容量については後に議論する。

3. 記憶容量節約アルゴリズム

3.1 ヘッセ行列の逆行列の記憶容量節約法

(1) SSVM公式の変形

前節で示したように、計算機記憶容量に占めるヘッセ逆行列の部分すなわち、(15)式の Np の2乗に相当する部分の記憶容量が大規模問題では重要な課題となる。本研究では最適制御理論⁹⁾の方法を拡張してSSVMに適用する方法を新たに示す。これにより、計算速度を損なわずに、この部分の記憶領域をアルゴリズムの修正により Np に比例する容量にすることができる。結果として $Np^2/2$ の部分を「 $Np \times$ 逆解析反復回数 $\times 3$ 」とすることが可能となる。なお、(15)式の第2項の扱いに関しては次節で述べる。以下に記憶容量節約のためのSSVM公式の変形方法を示す。

$$\mathbf{B}_{k+1} = \omega_k \mathbf{B}_k + \lambda_k^1 \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T + \lambda_k^2 \mathbf{v}_k \mathbf{v}_k^T + \lambda_k^3 \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^T \quad (16)$$

ただし、

$$\mathbf{w}_k = \mathbf{B}_k \mathbf{y}_k \quad (17)$$

$$\lambda_k^1 = \frac{1}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{y}_k} \quad (18)$$

$$\lambda_k^2 = \omega_k \phi_k \mathbf{y}_k^T \mathbf{w}_k \quad (19)$$

$$\lambda_k^3 = -\frac{\omega_k}{\mathbf{y}_k^T \mathbf{w}_k} \quad (20)$$

正値対称行列 \mathbf{B}_0 として単位行列 \mathbf{I} を与えるものとする、(16)式の漸化式を解くと、ヘッセ逆行列 \mathbf{B}_k は(21)式のように表すことができる。初期ヘッセ逆行列として単位行列 \mathbf{I} の定数倍などを与えることもできるが、その場合も以下の計算法は同様である。

$$\mathbf{B}_k = a\mathbf{I} + \sum_{j=0}^{k-1} b_j \mathbf{s}_j \mathbf{s}_j^T + \sum_{j=0}^{k-1} c_j \mathbf{v}_j \mathbf{v}_j^T + \sum_{j=0}^{k-1} d_j \mathbf{w}_j \mathbf{w}_j^T \quad (21)$$

ただし、

$$a = \prod_{i=0}^{k-1} \omega_i \quad (22)$$

$$b_j = \lambda_j^1 \prod_{i=j+1}^{k-1} \omega_i \quad (23)$$

$$c_j = \lambda_j^2 \prod_{i=j+1}^{k-1} \omega_i \quad (24)$$

$$d_j = \lambda_j^3 \prod_{i=j+1}^{k-1} \omega_i \quad (25)$$

(21)式の右辺の形からわかるように、 \mathbf{B}_k はベクトルのダイアデック（1次元縦ベクトル×1次元横ベクトル）と単位行列の線形和で構成されている。これにより、未知パラメータの修正ベクトルの方向ベクトル \mathbf{d}_k は、

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_k &= -\mathbf{B}_k \nabla J_k \\ &= - \left\{ a \nabla J_k + \sum_{j=0}^{k-1} b_j (\mathbf{s}_j^T \nabla J_k) \mathbf{s}_j \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=0}^{k-1} c_j (\mathbf{v}_j^T \nabla J_k) \mathbf{v}_j + \sum_{j=0}^{k-1} d_j (\mathbf{w}_j^T \nabla J_k) \mathbf{w}_j \right\} \end{aligned} \quad (26)$$

として計算できることがわかる。この(26)式による計算では、ベクトルの内積計算を先に行うために未知パラメータ次元の行列を記憶する必要がない。さらに、(17)式の右辺の \mathbf{B}_k に(21)式を代入することにより、

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_k &= \left\{ a \mathbf{y}_k + \sum_{j=0}^{k-1} b_j (\mathbf{s}_j^T \mathbf{y}_k) \mathbf{s}_j \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=0}^{k-1} c_j (\mathbf{v}_j^T \mathbf{y}_k) \mathbf{v}_j + \sum_{j=0}^{k-1} d_j (\mathbf{w}_j^T \mathbf{y}_k) \mathbf{w}_j \right\} \end{aligned} \quad (27)$$

とすれば全アルゴリズムの中から、 \mathbf{B}_k とダイアデックを消去することができる。これにより対称行列 \mathbf{B}_k ないダイアデックからなる行列の記憶領域を必要としないアルゴリズムを導くことができた。ただし、(26)式、(27)式からわかるように、反復ステップの度に算出される3つのベクトル $\mathbf{s}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ ($3 \times Np$ 個の数値)をすべて記憶することが必要になる。したがって、このアルゴリズムを適用するときは、計算機容量の限界まで反復計算をおこなって収束条件に達しないときは、再度初期ヘッセ逆行列を $\mathbf{B}_k = \mathbf{I}$ などとして準ニュートン法の反復を繰り返すことになる。このように準ニュートン法におけるヘッセ逆行列の初期行列をリセットすることは、評価関数の収束に若干の影響を与える可能性があるものの、SSVM法自体が粗い直線探索でも収束するアルゴリズムとなっているため、逆解析計算上の大きな支障は無いと考えられる。

非線形最適化問題で一般に良く使われる準ニュートン法公式であるBFGS法やDFP法に対する記憶容量節約の場合、(22)式、(23)式、(24)式、(25)式から計算される a, b_j, c_j, d_j は反復の度に計算する必要は無いが、ここで示したようにSSVM法においては反復毎に変化するスケールングファクター ω の存在があるために a, b_j, c_j, d_j の計算を反

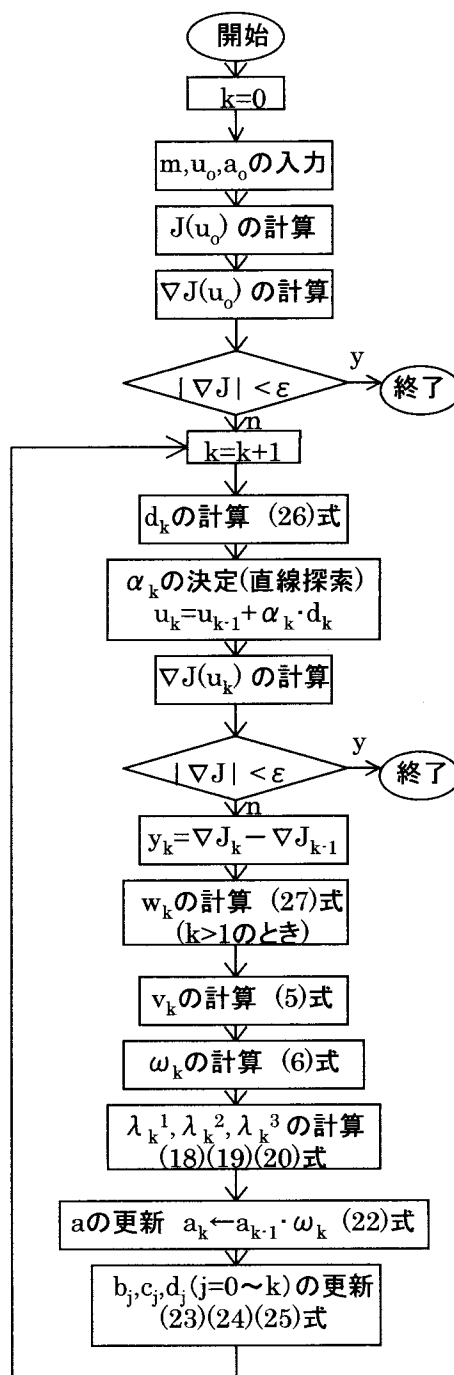


図-1 メモリ節約準ニュートン法のアルゴリズム

復毎に行うことが必要になる。

ここで示したアルゴリズムは図-1のように整理され、(17)式や(21)式など対称行列 \mathbf{B}_k を必要とする数式を使用しないアルゴリズムであることがわかる。

(2) 多重ループ計算排除による高速計算維持法

準ニュートン法におけるヘッセ逆行列の記憶領域を節約するために、各反復ステップ毎に $\mathbf{s}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ なるベクトルを記憶し、かつ、(26)式、(27)式に示されるように、これらのベクトルを用いて反復毎に多数の内積計算を行う必要がある。これに伴う計算速度が問題となる。計算速

度を犠牲にしないで記憶容量を節約するためには、(26)式、(27)式の計算において多重ループを避けるアルゴリズムが必要となる。例として、図-2に(27)式による w_k の計算部分のアルゴリズムを示す。図-2(a)の方法は多重ループ計算により計算速度が無視できないほど大きくなる。一方、図-2(b)のように、各反復ステップ毎に、 $s^T y$, $v^T y$, $w^T y$ の内積計算を $k-1$ ステップまでの分だけ先に計算して記憶しておき、これらを用いて、(27)式右辺の和を計算することにより、未知パラメータ数 Np に関する2重ループを避けることができ、計算速度の犠牲は無視できる程度となる。この際に追加される記憶容量は全体に比べて十分小さいので問題とならない。(26)式の計算も同様のことが言える。

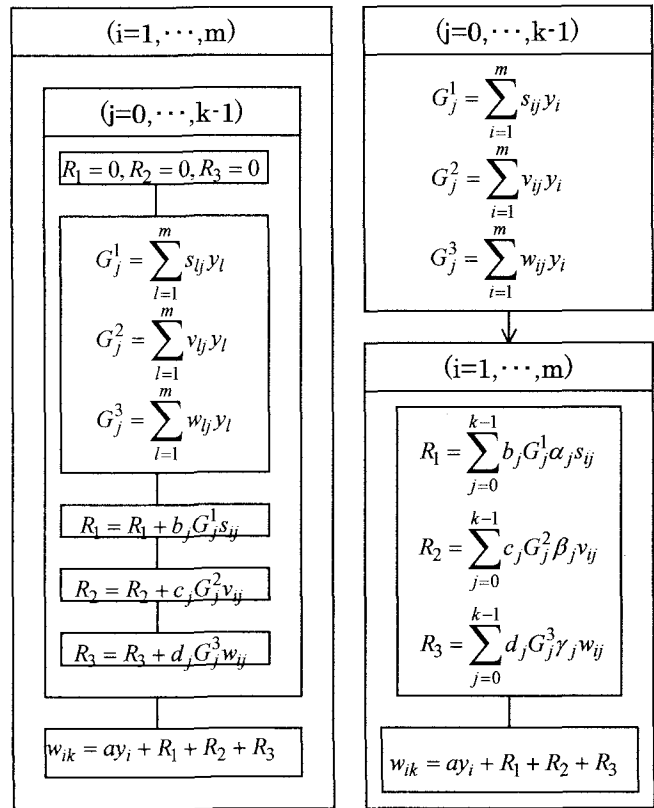
3.2 勾配高速計算における圧力計算値の記憶容量節約法

勾配高速計算法として Adjoint state 法を適用する場合、順解析計算回数に関わらず随伴関数を計算する際に全格子全時間ステップにおける圧力値（ないし全水頭）を一時的に記憶しておく必要がある。これは(12)式の随伴方程式を終端条件(13)式より終端時間から逆時間に解いていく際に、各時間ステップ毎に全格子圧力値を利用するためである。また、準ニュートン法における直線探索のときに順解析回数を最小限におさえたい場合はさらに全時間ステップ全差分格子の圧力値を2通り記憶する必要がある。SSVM法では直線探索をほとんど行わずに済むようなアルゴリズムとなっているが、解析の安定性を考慮すると、最低限の粗い直線探索（評価関数の減少を保証する程度の直線探索）を組み込むことは必要のためにこのような圧力記憶容量が必要となる。

しかし、随伴方程式のための記憶容量は必要不可欠であるが、直線探索のための記憶容量は同じ順解析計算を繰り返すことにより節約することが可能である。したがって(15)式において $2Ntsb$ を半分の $Ntsb$ とするアルゴリズムを構築することができる。この場合は直線探索のたびに1回多く順解析計算を行うことになる。準ニュートン法のスケールングファクターを用いた場合は、直線探索が限られることが考えられるので、記憶容量の問題に比べて計算時間の犠牲が小さいと判断できる場合は後者のアルゴリズムを用いることが有効となる。

さらに、ハイドロパルストモグラフィーにおける注水区間の交換回数が多い場合は、1注水区間試験毎に順解析計算を分けて行い、1注水区間毎に随伴方程式も解くことにより記憶容量を大幅に節約することも可能である。これにより記憶容量は、注水試験の回数（注水区間の交換回数）に影響を受けないアルゴリズムとなることがわかる。この場合、注水試験の内で最大の時間ステップ数が制約条件に関係することになる。

3次元地下水理逆解析において、順解析における時間ステップ回数（設定および格子分割）の設定はこれらの記



(a) 計算速度：大

(b) 計算速度：小

図-2 多重ループ計算解消アルゴリズムによる w_k の計算法（反復 k ステップ目）

憶容量を考慮して行うことが大切な要件となる。

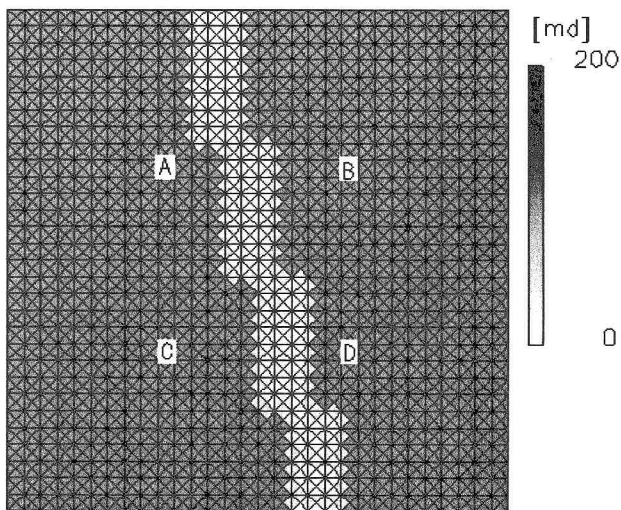
4. 数値実験

4.1 数値実験モデル

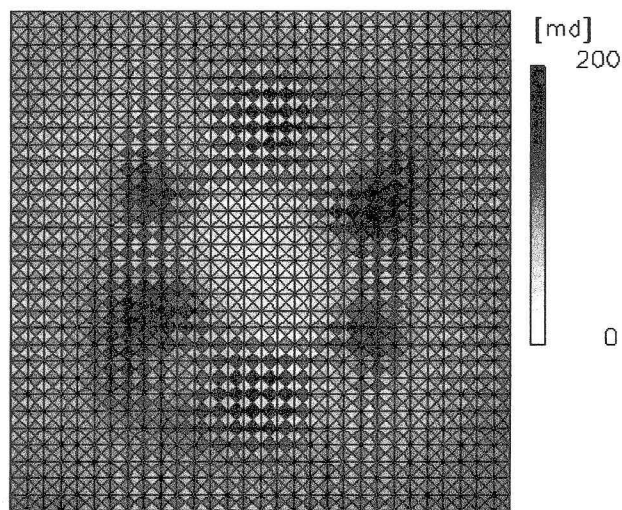
図-3に示す2次元モデルを用いて、ハイドロパルステストを想定した逆解析数値実験を行った。図中のA, B, C, Dをハイドロパルステストの観測点および注水点とした。この4点で計測される圧力挙動（数値計算で生成）から領域の浸透率分布を推定する逆解析計算を行った。その際、従来の方法と新たに計算機記憶容量を節約したアルゴリズムによる方法で同じ計算を行った。格子数は $32 \times 32 \times 1$ で、4辺の各1列は開放境界条件を与えるためのダミーセルとした。2次元モデルで未知パラメータは各格子間浸透率の合計1860個とした。合計時間ステップ数は400とした。従来のアルゴリズムによる計算（ケース1）および記憶容量節約アルゴリズムによる計算（ケース2）を行って、計算容量および計算結果を比較検討した。

4.2 数値実験結果

従来のアルゴリズムおよび記憶容量節約アルゴリズムによる計算結果をそれぞれ図-4に、図-5に示す。これ



図—3 数値実験モデル格子



図—4 数値実験結果（ケース1：従来法）

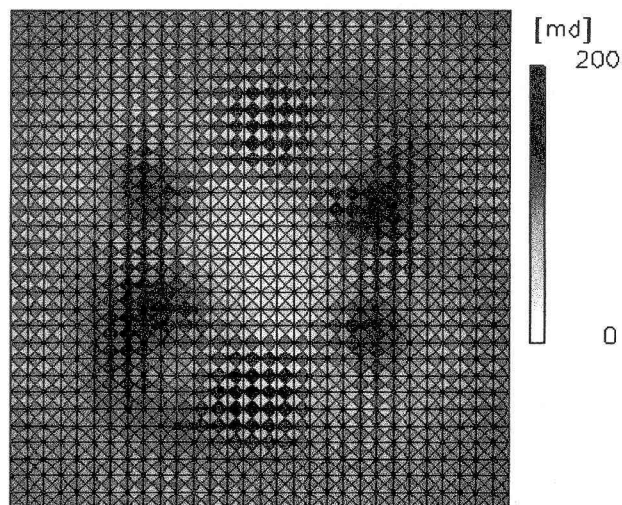
らの図から、計算量比較の都合により反復100回目で計算を打ち切ったため浸透率分布の再現性は不完全だが、両者の計算結果はほぼ完全に一致することがわかる。数値的にも全ての格子間浸透率値は有効数字6桁以上が一致した。また、記憶容量はケース1では、 4.4×10^7 byte だったのに対して、ケース2では 6.7×10^6 byte となり、大幅に記憶容量が節約できたことが示された。計算時間はケース1が1858.14秒に対してケース2は1879.61秒となり、アルゴリズム変更に伴う計算時間のロスはほとんど無かった（計算機はVT-Alpha6を使用した）。

以上より新たに開発したアルゴリズムがハイドロパルステストの逆解析に有効であることが示された。

5. 考察

5.1 大規模モデルの記憶容量

さらに、大規模の3次元問題に対する記憶容量節約アルゴリズムの有効性を調べるために、記憶容量の試算を行った。差分格子モデルにおいて、全ての格子間浸透率を未知パラメータとした場合（モデル番号奇数）と、格子間浸透率に加えて各格子の間隙率も未知とした場合（モデル番号偶数）の未知パラメータ数と記憶容量の関係の例を表-1に示した。ここでは、ハイドロパルステストにおける注水時間ステップの最大値を100、準ニュートン法の最大反復回数(Nq)を100回と固定して、 x, y, z 方向の差分格子数を変えて比較した。表中のM1はメモリ節約アルゴリズムを使わない従来法の必要記憶容量、M2は本論で示したメモリ節約アルゴリズムを用いた場合に必要とする記憶容量を、それぞれ倍精度で計算するものとして示した。現時点におけるpcあるいはワークステーションの限界記憶容量が、約1.5ギガバイトであることを考慮すると、従来法では、 $N_x=25, N_y=25, N_z=10$ 程度の問題を扱うことが限界であるのに対して、本論で示した



図—5 数値実験結果（ケース2：記憶容量節約法）

メモリ節約アルゴリズムでは、 $N_x=100, N_y=100, N_z=20$ 程度のモデルで間隙率を未知としないモデル（モデル9）を計算することが可能であることが示されている。

5.2 逆解析反復回数と記憶容量に関する考察

本解析法では準ニュートン法の最大反復回数 Nq に比例するので、膨大な反復回数を必要とする場合、メモリ節約アルゴリズムの効果は無い。しかし、準ニュートン法では、メモリ限界まで反復計算を行った後、再度ヘッセ行列の逆行列を初期単位行列から始めることが許される。許容メモリに合わせて、ヘッセ逆行列をリセットする反復回数を定めれば容量の問題は解決できる。また、計算時間の問題から、反復回数の合計を無制限に増やすことはできない。収束判定の問題は、計測形態や評価関数の設定法、不適切性の問題との関連で総合的に検討する必要がある。本研究により示された記憶容量節約アルゴリズムは、こうした問題を検討するための有効なツ-

表-1 差分格子数と計算機記憶容量の関係(倍精度を想定した例)

	Nx	Ny	Nz	Nt	Nq	Nb	Nk	Nporo	Np	M1	M2
モデル1	10	10	10	100	100	1000	2700	0	2700	29960000	7280000
モデル2	10	10	10	100	100	1000	2700	1000	3700	55560000	9680000
モデル3	20	20	10	100	100	4000	11200	0	11200	504960000	30080000
モデル4	20	20	10	100	100	4000	11200	4000	15200	927360000	39680000
モデル5	25	25	10	100	100	6250	17625	0	17625	1247562500	47300000
モデル6	25	25	10	100	100	6250	17625	6250	23875	2285062500	62300000
モデル7	50	50	20	100	100	50000	145500	0	145500	84721000000	389200000
モデル8	50	50	20	100	100	50000	145500	50000	195500	1.52921E+11	509200000
モデル9	100	100	20	100	100	200000	586000	0	586000	1.37374E+12	1.566E+09
モデル10	100	100	20	100	100	200000	586000	200000	786000	2.47134E+12	2.046E+09
モデル11	100	100	50	100	100	500000	1480000	0	1480000	8.762E+12	3.952E+09
モデル12	100	100	50	100	100	500000	1480000	500000	1980000	1.5682E+13	5.152E+09

Nx:x方向差分格子数, Ny:y方向差分格子数, Nz:z方向差分格子数, Nt:最大時間ステップ数
 Nq:準ニュートン反復回数, Nb:差分格子総数, Nk:格子間浸透率の個数, Nporo:未知とする間隙率総数
 Np:未知パラメータ数(Nk+Nporo), M1:従来法による記憶容量(単位:byte)
 M2:節約アルゴリズムの記憶容量(単位:byte)

ルとなり得る。

5.3 不適切性と大規模未知パラメータ数に関する考察

膨大な未知パラメータを扱うことのできる逆解析アルゴリズムが示されたが、不適切問題となる可能性が否めない。不適切問題に対処するためには、十分な計測データを取得することと、未知パラメータに関する何らかの仮定を導入することが必要と考えられる。データ量に関しては、ハイドロパルステストのような試験法が提案されているものの、限界が無いとは言えない。したがって、なんらかの仮定の導入が必要になるケースが多いと思われる。何らかの仮定を導入して、未知パラメータを限定する方法としては、ゾーニングのように未知パラメータの数を直接減らす方法がある。しかし、不均質性を扱う場合は、物性分布の滑らかさを仮定するスムージング法などによる正則化法が有効と考えられる。4節で示した数値実験においてもゾーニングでは表現できない不均質性を多数の未知パラメータを用いることで表現でき、また、スムージング法により際立った偽像も生じずにある程度適切化できることがわかる。このような場合に、膨大な未知パラメータを扱うことのできる本論で示した逆解析法が有効と考えられる。不適切問題に関しては、本手法を用いて計測法と併せてさらに検討することが効果的と考えられる。

6. 結論

不均質な地下水理モデル構築のために、多数の未知パラメータに対応した逆解析コードとして計算速度を落とさずに計算機記憶容量を節約するアルゴリズムを開発した。

成果は以下のようにまとめられる。

- (1) 最適制御問題に対する準ニュートンアルゴリズムを拡張し、SSVM法に適用する方法を開発した。その結果、計算速度を維持したまま、メモリを大幅に節約したアルゴリズムを構築できた。準ニュートン法におけるヘッセ逆行列の記憶領域を節約し、 $Np^2/2$ から $3 \times Np \times Nq$ に比例する容量で済むことを示した。
- (2) 計算速度とメモリを整理して総合的に効率的な逆解析アルゴリズムを論じ、数値実験により開発したコードの有効性を検証した。実用的な規模の例として、未知パラメータ数が数十万個でもワークステーションあるいはpcで可能なレベルまでメモリを抑えて計算可能となることを示した。

謝辞

本研究をまとめるに当たり、登坂博行博士(東京大学工学系研究科)には貴重なコメントをいただきました。ここに記して感謝いたします。

参考文献

- 1) Tosaka, H., Masumoto, K. and Kojima, K. : Hydropulse Tomography for Identifying 3-D Permeability distribution. Proc. Int. High Level Radioactive Waste Management Conf., Las Vegas, Nevada, U.S., pp.955-959, 1993.
- 2) Tomimori, S., Iseki, S., Masumoto, K., Itoh, K. and Tosaka, H. : Three dimensional reconstruction of hydraulic properties of rock mass with hydraulic and geophysical tomography, Proc. of the 3rd International Workshop on the Application of Geophysics to Rock and Soil Engineering, Melbourne, Australia. pp.34-42, Nov., 2000.
- 3) 増本清、細谷真一: 孔間透水試験データの3次元非定常逆解析によるグラウト効果判定の試み、地盤工学シンポジウム論文集、287-294、2002.
- 4) Velimir V. Vesselinov, Shlomo P. Neuman and Walter A. Illman: Three-dimensional numerical inversion of pneumatic cross-hole

- tests in unsaturated fractured tuff 1. Methodology and borehole effects, WRR, Vol. 37, No. 12, 3001-3017, Dec. 2001.
- 5) Marsh Lavenue and Ghislain de Marsily: Three-dimensional interference test interpretation in a fractured aquifer using the pilot point inverse method, WRR, Vol.37, No. 11, 2659-2675, Nov. 2001.
 - 6) Yang,P.H.,Watson,A.T. : Automatic History Matching With Variable Metric Methods., Soc. Pet. Eng. Reservoir Engineering.,995-1001, 1988.
 - 7) 増本清、登坂博行、小島圭二：多点非定常圧力とその時間変化率の同時自動マッチングによる岩盤水理特性逆解析－ 3次元基本アルゴリズムの開発、日本地下水学会誌、Vol. 40, No. 3, pp. 273-287, 1998.
 - 8) Sun, N.-Z. and W.W.-G. Yeh : Identification of Parameter Structure in Groundwater Inverse Problem, WRR, Vol.21, No.6. 869-883, 1985.
 - 9) 嘉納秀明：システムの最適理論と最適化，コロナ社，1987.
 - 10) Oren,S.S. and Luenberger,D.G.:”Self-scaling variable metric (SSVM) algorithms, Part1: Criteria and sufficient conditions for scaling a class of algorithms”, Management Science, Vol.20, 845-862, 1974.
 - 11) ASNOP研究会：非線形最適化プログラミング，日刊工業新聞社，1991.
 - 12) 杉村淑人、富森叡、松田育子、増本清、渡辺邦夫：水みちネットワークモデルを用いた浸透流逆解析に関する数値実験、土木学会論文集、No. 638/III-49, 41-50, 1999. 12
 - 13) Masumoto,K., Tosaka,H., Kojima,K., Ito,K. and Otsuka,Y. : New Measuring System and High Speed Three Dimensional Inversion Method for Hydropulse Tomography., Proc. International Congress on Rock Mechanics, ISRM, pp.847-850, 1995.
 - 14) Sun, Ne-Zheng: Inverse Problems in Groundwater Modeling, Kluwer Academic Publishers, 1994.

(2004年4月16日 受付)