

# ハミルトニアンモンテカルロ法を用いた逆解析による定常流の透水係数の推定

## Estimation of Hydraulic Conductivity from Steady State Seepage Flow

### Using Hamiltonian Monte Carlo

○大杉 美里\*, Michael C. Koch\*, 村上 章\*, 藤澤 和謙\*

○Osugi Misato\*, Michael C. Koch\*, Murakami Akira\*, Fujisawa Kazunori\*

#### 1. はじめに

地下水解析に必要となる地盤の透水係数は、現場もしくは室内透水試験から得られるものの、空間に分布する実際の透水係数を把握することは容易ではない。通常、モンテカルロ法による逆解析には、非常に多くのサンプル（実現値）を必要とするため、未知数の多い逆問題には不利となる。しかし、ハミルトニアンモンテカルロ法（HMC）<sup>1)</sup>は、従来のマルコフ連鎖モンテカルロ法のサンプリング性能を飛躍的に向上した方法であり、多変数の事後確率分布を効率的に生成できる特徴を持つ。本論では、HMC の高いサンプリング性能を利用し、透水係数の空間分布を求める多変数を推定する逆問題に取り組み、その方法論と推定結果を示す。

#### 2. 解析手法

定常浸透問題を対象とし、有限要素法による離散化方程式及び観測方程式は以下の形をとる。

$$\mathbf{K}\mathbf{h} = \mathbf{q}, \quad \mathbf{y} = \mathbf{H}\mathbf{x} + \mathbf{w}, \quad \mathbf{x} = (\mathbf{h}, \mathbf{q})^T \quad (1)$$

ここに、 $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{h}$ ,  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{y}$ ,  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{w}$  は透水係数全体剛性マトリックス、水頭ベクトル、流量ベクトル、観測値ベクトル、観測マトリックス、ホワイトノイズである。推定対象とするパラメータを  $\boldsymbol{\theta}$  とすると、HMC により事後確率分布  $f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y})$  に従う実現値を数値的に発生させるアルゴリズムは、図1の通りである。同図中に現れる  $U(\boldsymbol{\theta})$  は以下のように定義される。

$$U(\boldsymbol{\theta}) = -\log f(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{y}) \\ = \frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x})^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{H}\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}^T \boldsymbol{\Sigma}_0^{-1}\boldsymbol{\theta} \quad (2)$$

ここに、 $\mathbf{R}$  は観測誤差共分散行列、 $\boldsymbol{\Sigma}_0$  は  $\boldsymbol{\theta}$  の分散共分散行列を表す。HMC では、ポテンシャルエネルギーの勾配  $\partial U / \partial \boldsymbol{\theta}$  を用いることで効率的な探索が可能となり、この計算には状態ベクトルの導関数  $\partial \mathbf{x} / \partial \boldsymbol{\theta} = (\partial \mathbf{h} / \partial \boldsymbol{\theta}, \partial \mathbf{q} / \partial \boldsymbol{\theta})^T$  が必要となる。これらは離散化方程式を  $\boldsymbol{\theta}$  について微分した

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \mathbf{h} + \mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \quad (3)$$

- I. 有限要素法から観測値を得る。

II. HMC により透水係数の実現値を計算する。

  1.  $n = 1$  とし、パラメータの初期値  $\boldsymbol{\theta}^1$  を与える。
  2.  $\mathbf{p} \sim N(0, \mathbf{M})$  により運動量  $\mathbf{p}$  を得る。
  3.  $\boldsymbol{\theta}^{n-1} \rightarrow \boldsymbol{\theta}^{old}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}^{old}$  とする。
  4. Hamilton 運動方程式を解き  $\boldsymbol{\theta}^{new}, \mathbf{p}^{new}$  を得る。
$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{p}) = U(\boldsymbol{\theta}) + K(\mathbf{p})$$

$$\frac{d\mathbf{p}(t)}{dt} = -\frac{dU(\boldsymbol{\theta}(t))}{d\boldsymbol{\theta}(t)}, \quad \frac{d\boldsymbol{\theta}(t)}{dt} = \frac{dK(\mathbf{p}(t))}{d\mathbf{p}(t)} = \mathbf{p}^T$$
  5. 許容確率  $\alpha_n$  を計算する。
$$\alpha_n = \min \left\{ 1, \frac{\exp(-\mathcal{H}(\boldsymbol{\theta}^{new}, -\mathbf{p}^{new}))}{\exp(-\mathcal{H}(\boldsymbol{\theta}^{old}, -\mathbf{p}^{old}))} \right\}$$
  6.  $u \sim U(0, 1)$  により判定を行う。
$$u \leq \alpha_n \rightarrow \boldsymbol{\theta}^n = \boldsymbol{\theta}^{new} \quad u > \alpha_n \rightarrow \boldsymbol{\theta}^n = \boldsymbol{\theta}^{old}$$
  7.  $n = n + 1$  とし、2.へ戻る。
  8.  $n = N$  にて終了する。

III.  $N$  個の実現値の平均を推定値とする。

図1 HMC 法のアルゴリズム

Fig. 1 Algorithm of HMC

から計算できる。

各要素の透水係数  $\mathbf{k}$  が推定対象となるが、その空間分布を近似するため、Karhunen-Loeve 展開<sup>2)</sup>を利用した。これにより、

$$\mathbf{k} = \bar{\mathbf{k}} + \sum_{i=1}^Q \sqrt{\lambda_i} \boldsymbol{\phi}_i \theta_i \quad (4)$$

と表せ、 $\bar{\mathbf{k}}$ は透水係数の平均値ベクトル、 $\lambda_i$ と $\boldsymbol{\phi}_i$ は自己共分散行列の固有値と固有ベクトル、 $Q$ は展開項数を意味する。式(4)の $\theta_i$ は確率変数であり、求めるパラメータに対応する。

### 3. 解析結果

図2のような、上下からの浸透がない単純な定常流を想定した。多様な観測値を得る目的で、

上流側の上半分・下半分に不透水のゲートを配置した。異なる透水係数を持つ4層に分かれた  $12\text{ m} \times 10\text{ m}$  の領域を、大きさが  $1\text{ m} \times 1\text{ m}$  の要素に区切り、すべての要素における透水係数を推定した。初期値 $\theta^1$ は、どの要素も均一で  $7.0 \times 10^{-4}\text{ cm/sec}$  を選んだ。また、計算するサンプル数  $N$  は 10,000 とした。観測値には、下流からの流量、図2に示す節点での水頭を用いた。図4左に示す(真値は上層から 4.0, 3.5, 3.0,  $2.5 \times 10^{-4}\text{ cm/sec}$ )に対し、図3の結果を得た。全体的に、上層ほど透水係数が高い傾向を推定することができた。合計 120 要素ある中、左上にある第1要素でのサンプリングの様子を図4に示す。左図の横軸はタイムステップ、縦軸は透水係数の値である。

異なる透水係数を持つ4層に分かれた  $12\text{ m} \times 10\text{ m}$  の領域を、大きさが  $1\text{ m} \times 1\text{ m}$  の要素に区切り、すべての要素における透水係数を推定した。初期値 $\theta^1$ は、どの要素も均一で  $7.0 \times 10^{-4}\text{ cm/sec}$  を選んだ。また、計算するサンプル数  $N$  は 10,000 とした。観測値には、下流からの流量、図2に示す節点での水頭を用いた。図4左に示す(真値は上層から 4.0, 3.5, 3.0,  $2.5 \times 10^{-4}\text{ cm/sec}$ )に対し、図3の結果を得た。全体的に、上層ほど透水係数が高い傾向を推定することができた。合計 120 要素ある中、左上にある第1要素でのサンプリングの様子を図4に示す。左図の横軸はタイムステップ、縦軸は透水係数の値である。

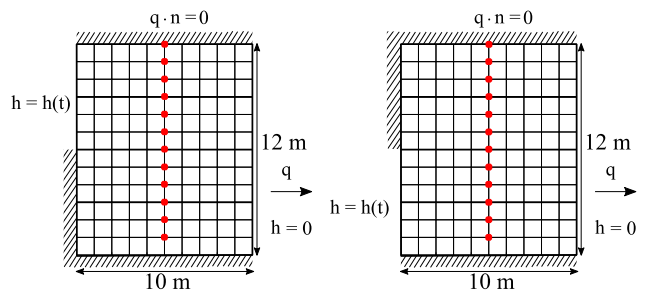
異なる透水係数を持つ4層に分かれた  $12\text{ m} \times 10\text{ m}$  の領域を、大きさが  $1\text{ m} \times 1\text{ m}$  の要素に区切り、すべての要素における透水係数を推定した。初期値 $\theta^1$ は、どの要素も均一で  $7.0 \times 10^{-4}\text{ cm/sec}$  を選んだ。また、計算するサンプル数  $N$  は 10,000 とした。観測値には、下流からの流量、図2に示す節点での水頭を用いた。図4左に示す(真値は上層から 4.0, 3.5, 3.0,  $2.5 \times 10^{-4}\text{ cm/sec}$ )に対し、図3の結果を得た。全体的に、上層ほど透水係数が高い傾向を推定することができた。合計 120 要素ある中、左上にある第1要素でのサンプリングの様子を図4に示す。左図の横軸はタイムステップ、縦軸は透水係数の値である。

### 4. まとめ

Karhunen-Loeve 展開と HMC を利用して、空間分布する透水係数の推定を行った。本論で示した結果は基礎的ではあるが、この提案手法は、透水係数に限らず、空間分布する多数の未知数の逆解析を可能にする方法論を提供する。

#### 参考文献

- 1) Betancourt, M. (2017): A Conceptual Introduction to Hamiltonian Monte Carlo, arXiv :1701: 02434, Columbia University.
- 2) Loeve, M. (1978): *Probability Theory II*, Springer-Verlag, New York.



● Observation point of hydraulic head

図2 有限要素メッシュと境界条件  
Fig. 2 FEM mesh and boundary conditions

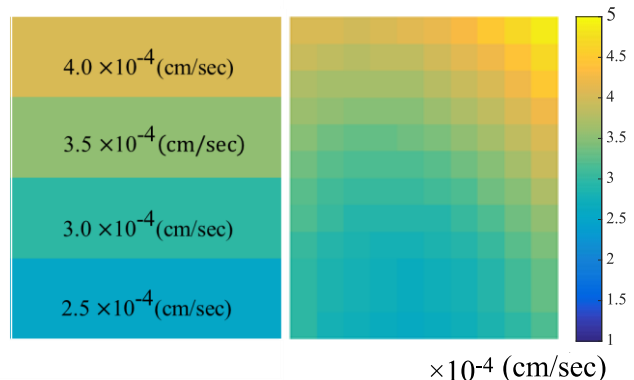


図3 透水係数の推定結果 (右: 推定値, 左: 真値)

Fig. 3 Estimated hydraulic conductivity  
(Right: Estimation, Left: True values)

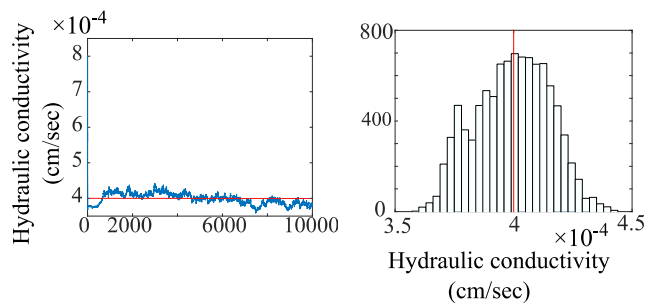


図4 第1要素における透水係数の実現値  
Fig. 4 Samples of hydraulic conductivity in the 1st element