JNC TJ8440 2001-002

核種移行逆解析プログラムの作成

（核燃料サイクル開発機構　契約業務報告書）

2001 年 3 月

大成建設株式会社

JNC TJ8440 2001-002
2001 年 3 月

核種移行逆解析プログラムの作成

(核燃料サイクル開発機構　契約業務報告書)

井尻裕二*，安達哲也*，鈴木俊一*，大石雅也*，杉原豊*

要　　旨

高レベル放射性廃棄物地層処分の安全評価においては，モデルやデータの不確実性を評価することが重要な課題となっており，安全評価に用いるモデルの妥当性や原位置試験から得られるデータの信頼性を客観的に評価できるツールを開発することが急務である。

本業務では，核燃料サイクル開発機構が保有している核種移行解析コード LTG を対象として，測定誤差に基づくデータの信頼性評価や最適モデルの選定が可能な確率論的手法を用いた逆解析プログラムを作成した。

その結果，作成した核種移行逆解析プログラムは，データの信頼性評価や最適モデルの選定など所定の機能を満たしていることが確認された。また，簡単な核種移行問題を設定して検証解析を実施した結果，逆解析により同定されたパラメータには初期値依存性があること，パラメータの種類や組合せによっては解が不定となることなどの問題点が明らかとなった。さらに，初期値依存性の問題に対しては，初期値の設定にあたっては事前にパラメータの分布範囲を絞り込むこと，複数の経路がある場合には各経路に同じ初期値を用いないこと，初期値を上下限値と同じ値にしないことなどが有効であることが明らかとなった。

本報告書は，大成建設株式会社が核燃料サイクル開発機構との契約により実施した業務成果に関するものである。
機構担当部課室：　東海事業所　環境保全センター　処分研究部　システム解析グループ
*　大成建設株式会社　エンジニアリング本部

JNC TJ8440 2001-002
March, 2001

Development of Inversion Code of Radionuclide Migration

Yuji IJIRI*, Tetsuya ADACHI*, Shunichi SUZUKI*, Masaya OISHI*, Yutaka SUGIHARA*

Abstract

One of key issues in assessing a safety of a deep geological disposal system for high-level nuclear waste is to evaluate the effects of model uncertainty and data uncertainty on the results of the radionuclide migration analysis. Therefore, it is crucial to develop a tool which evaluate appropriateness of a model and the reliability of data.

In this work, inversion code of LTG, which solves radionuclide migration in fractured media owned by JNC, is developed. The code identify optimum parameters that explain observed data and calculates variance (correspond to uncertainty/reliability) of optimum parameters and model identification criteria. From the results of preliminary analysis, it is found that (a) identified parameter value is initial value dependent, and (b) solution is non-unique in case of weak-sensitive parameter or a certain combination of parameters such as velocity and sectional area of fracture. In order to obtain better solution, it is effective; (a) to decrease the range of identified parameter, (b) not to use the same initial values for multiple pathways, and (c) not to set initial values equal to upper and lower limit of the range.

This work was performed by Taisei Corporation under contract with Japan Nuclear Cycle Development Agency.

JNC Liaison : Repository System Analysis Group, Waste Isolation Research Division, Waste Management and Fuel Cycle Research Center, Tokai Works

* Engineering Division, Taisei Corporation

目　　次

図　目　次

頁

表　目　次

頁

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物地層処分の安全評価においては，モデルやデータの不確実性が安全評価結果に及ぼす影響を評価することが重要な課題の１つとなっている。そのためには，安全評価に用いるモデルの妥当性や原位置測定値から求められるデータの信頼性を客観的に評価できるツールを開発することが急務である。

そこで，核燃料サイクル開発機構が保有している水理解析コード，物質移行解析コード，核種移行解析コードを対象として，最適モデルの選定や測定誤差に基づくデータの信頼性評価が可能な確率論的手法を用いた逆解析プログラムを開発し，ENTRY 室内試験データや第２次取りまとめ以降本格的に開始される深地層研究所で測定される原位置データへの適用を通じてモデルの妥当性やデータの信頼性を評価する技術を確立することとする。

本業務では，不確実性評価技術の第一歩として，核燃料サイクル開発機構が保有する核種移行解析コード LTG を対象として逆解析プログラムを作成する。

2. 核種移行解析コードLTGの概要

核燃料サイクル開発機構保有の核種移行解析コードLTGの概要を以下に示す。

2.1 核種移行支配方程式

核種は，図 2.1に示すように割れ目ネットワークモデルの割れ目交線の中点を連結したチャンネルネットワークモデルの各チャンネル内を地下水の流れに沿って亀裂中を移流分散し，その一部は亀裂表面から岩石基質中にマトリクス拡散して岩石鉱物表面への収着により遅延される（図 2.2参照)。亀裂中および岩石基質中の核種 n の移行支配方程式は，それぞれ以下のように表される。

$$A(\ell)\left[R_n(\ell)\frac{\partial C_n}{\partial t}+q(\ell)\frac{\partial C_n}{\partial \ell}-\frac{\partial}{\partial \ell}D_L(\ell)\frac{\partial C_n}{\partial \ell}+R_n(\ell)\lambda_n C_n-R_{n-1}(\ell)\lambda_{n-1}C_{n-1}\right]$$
$$+Q(\ell')(C_n-C'_n)\delta(\ell-\ell')+W(\ell)F\theta^m D^m\left.\frac{\partial C_n^m}{\partial \omega}\right|_{\omega=0}=0 \tag{2.1}$$

$$R_n^m\frac{\partial C_n^m}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial \omega}D^m\frac{\partial C_n^m}{\partial \omega}+R_n^m\lambda_n C_n^m-R_{n-1}^m\lambda_{n-1}C_{n-1}^m=0 \tag{2.2}$$

ここに，上添え字 m は岩石基質を表し，$A(l)$は亀裂断面積[m^2]，$q(l)$は亀裂内流速[m/s]，$D_L(l)$は縦方向分散係数[m^2/s]（$=\alpha_L q(l)+D_o$)，α_L は縦方向分散長[m^2]，D_o は自由水中の拡散係数[m^2/s]，λ_n は崩壊定数[1/s]，$Q(l')$は外部流出入量[m^3/s]，δ はディラックのデルタ関数，$W(l)$は亀裂幅[m]，F は亀裂単位面積あたりのマトリクス拡散に寄与する面積の割合[-]，θ^m は岩石基質部の有効間隙率[-]，D^m は岩石基質間隙中の拡散係数[m^2/s]，C_n，C_n^m，C_n'はそれぞれ亀裂，岩石基質，外部流出入源の濃度[mol/m^3]，l は亀裂ネットワーク中の位置座標[m]，l'は外部流出入点の位置座標[m]，ω は亀裂面に法線方向の距離[m]（$0\leqq\omega\leqq d$)，d はマトリクス拡散深さ[m]，t は時間[s]を表す。また，$R_n(l)$ および R_n^m は遅延係数でそれぞれ以下のように表される。

$$R_n(\ell)=1+\frac{Ka_n}{b(\ell)},\quad R_n^m=1+\frac{\rho^m Kd_n}{\theta^m} \tag{2.3}$$

ここに，Ka_n は亀裂表面への分配係数[m]，$b(l)$は亀裂開口幅の 1/2[m]，ρ^m は岩石基質の乾燥密度[kg/m^3]，Kd_n は岩石鉱物への分配係数[m^3/kg]を示す。

初期条件(t=0)は，

$$C_n=f(\ell) \tag{2.4}$$

$$C_n^m = f^m(\omega) \tag{2.5}$$

と表され，処分坑道周辺の緩み域および解析領域の下流側断面における境界条件は，以下のように表される。

$$q(\ell)C_n - D_L(\ell)\frac{\partial C_n}{\partial \ell} = q^0(\ell)C_n^0(t) \tag{2.6}$$

ここに，$q^0(\ell)$は固定流速[m/s]，$C_n^0(t)$は固定濃度[mol/m^3]を表す。亀裂表面(ω=0)およびマトリクス拡散深さ(ω=d)における境界条件は，それぞれ以下のように表される。

$$C_n^m(\ell,\omega,t) = C_n(\ell,t) \quad (\omega = 0) \tag{2.7}$$

$$\left.\frac{\partial C_n^m}{\partial \omega}\right|_{\omega=d} = 0 \quad (\omega = d) \tag{2.8}$$

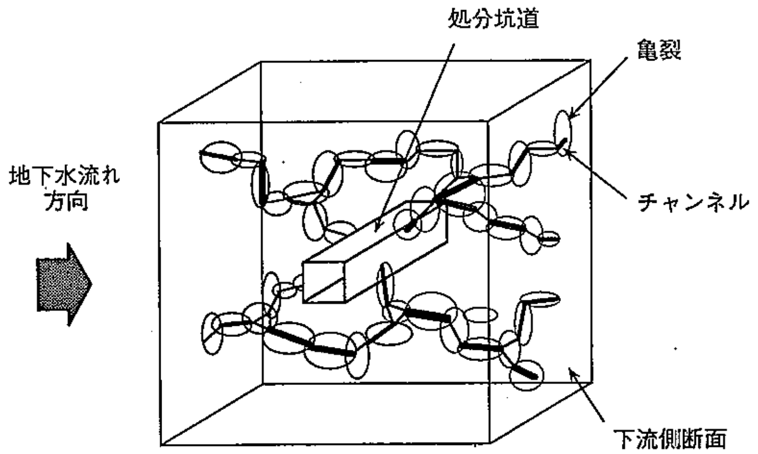


図 2.1　チャンネルネットワークモデル

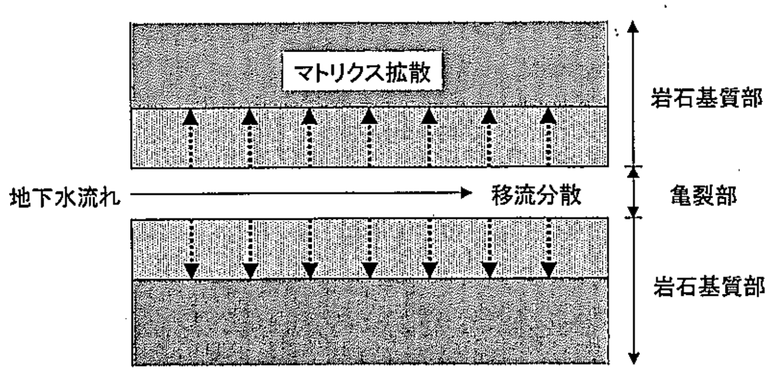


図 2.2　亀裂中の核種移行概念図

2.2　ラプラス変換有限要素法

上記問題に対してラプラス変換を用いて支配方程式中の時間微分項を消去するとともにマトリクス拡散項を簡単な式に変換する。ラプラス空間上で有限要素法により各節点の濃度を計算し，逆ラプラス変換により各節点濃度の時間履歴を算定する。時間ステップが不要なため効率的に時間領域の計算が実行できるうえに，マルチプロセッサーのコンピュータを用いたパラレル処理によって高速化も可能となる。また，クーラン数による制約がないため，流速の大きな移流支配の亀裂中と流速の小さい拡散支配の岩石基質中を同時に解く場合でも離散化が粗くても比較的精度の良い解を得ることができる（Sudicky, 1990)。

(1)　支配方程式のラプラス変換

関数$C_n(\ell,t)$のラプラス変換は，Lをラプラス変換演算子として複素数pをパラメータとする関数で表される。

$$L[C_n]=\overline{C}_n(\ell,p)=\int_0^\infty C_n(\ell,t)e^{-pt}dt \tag{2.9}$$

$$L\left[\frac{dC_n}{dt}\right]=p\overline{C}_n-C_n\big|_{t=0} \tag{2.10}$$

したがって，支配方程式(2.1)は以下のように表される。

$$\left[A(\ell)R_n(\ell)(p+\lambda_n)+\overline{g}-\sum_{k=1}^{n-1}G_{n,k}^m\right]\overline{C}_n+A(\ell)\left[q(\ell)\frac{\partial\overline{C}_n}{\partial\ell}-\frac{\partial}{\partial\ell}D_L(\ell)\frac{\partial\overline{C}_n}{\partial\ell}-R_{n-1}(\ell)\lambda_{n-1}\overline{C}_{n-1}\right]$$
$$+Q(\ell')(\overline{C}_n-\overline{C}_n')\delta(\ell-\ell')=A(\ell)R_n(\ell)C_n\big|_{t=0} \tag{2.11}$$

ここに，

$$\overline{g}=W(\ell)F\theta^m D^m\beta_n\tanh(\beta_n d) \tag{2.12}$$

$$\beta_n=\sqrt{\frac{R_n^m(p+\lambda_n)}{D^m}} \tag{2.13}$$

$$G_{n,k}^m=-W(\ell)F\theta^m D^m\times\sum_{j=k}^{n}\left[\frac{\prod_{i=k}^{n-1}(\lambda_i R_i^m)}{\prod_{\substack{i=k\\ i\neq j}}^{n}[R_i^m(p+\lambda_i)-R_j^m(p+\lambda_j)]}\cdot\beta_j\tanh(\beta_j d)\right] \tag{2.14}$$

また，境界条件式(2.6)は，以下のように書き直される。

$$q(\ell)\overline{C}_n - D_L(\ell)\frac{\partial \overline{C}_n}{\partial \ell} = q^0(\ell)\overline{C}_n^0(p) \tag{2.15}$$

(2)　ラプラス空間における有限要素法

ガラーキン法を用いた有限要素法により式(2.11)を解く。空間を離散化し，近似解$\hat{\overline{C}}_n$を以下のように設定する。

$$\overline{C}_n \approx \hat{\overline{C}}_n = \sum_{j=1}^{M}\overline{C}_{n,j}(p)\,w_j(\ell) \tag{2.16}$$

ここに，$w_j(l)$は基底関数，Mは節点数，$\overline{C}_{n,j}(p)$は節点jにおけるラプラス空間上の濃度を表す。式(2.11)は

$$\mathbf{L}(\overline{C}_n) = 0 \tag{2.17}$$

と表される。ガラーキン法では重み関数に基底関数を用いて領域Ωの近似解に関して次式を得る。

$$\int_\Omega \mathbf{L}(\hat{\overline{C}}_n)\,w_i d\Omega = 0 \qquad i = 1, 2, \cdots, M \tag{2.18}$$

グリーンの定理を用いて次式を得る。

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=1}^{M}\overline{C}_{n,j}\left\{\sum_e\int_{\Omega^e}\left[\left(A(\ell)R_n(\ell)(p+\lambda_n)+\overline{g}-\sum_{k=1}^{n-1}G_{n,k}^m\right)w_i w_j\right.\right.\\
&\left.\left.+A(\ell)\left(q(\ell)\frac{\partial w_j}{\partial \ell}w_i + D_L\frac{\partial w_i}{\partial \ell}\frac{\partial w_i}{\partial \ell}\right)\right]d\ell\right\} - \sum_{j=1}^{M}\overline{C}_{n-1,j}\left\{\sum_e A(\ell)R_{n-1}(\ell)\lambda_{n-1}\int_{\Omega^e}w_i w_j d\ell\right\}\\
&+\sum_{j=1}^{M}Q(\ell')\left(\overline{C}_{n,j}-\overline{C}'_{n,j}\right)\delta(\ell-\ell') - \sum_{j=1}^{M}\sum_e A(\ell)\int_{\Gamma^e}D_L\frac{\partial \hat{\overline{C}}_{n,j}}{\partial n}w_i d\Gamma\\
&=\sum_{j=1}^{M}C_n\big|_{t=0}\sum_e A(\ell)R_n(\ell)\int_{\Omega^e}w_i w_j d\ell \qquad i = 1, 2, \cdots, M
\end{aligned} \tag{2.19}$$

(2.19)式は以下のように表される。

$$\left([E]+\left(A(\ell)R_n(\ell)(p+\lambda_n)+\overline{g}_n-\sum_{k=1}^{n-1}G_{n,k}^m\right)[M]\right)\{\overline{C}_n\}-\left(A(\ell)R_{n-1}(\ell)\lambda_{n-1}\right)[M]\{\overline{C}_{n-1}\}$$
$$=\left(A(\ell)R_n(\ell)\right)[M]\{\overline{C}_n\}_{t=0}+\{\overline{B}\} \tag{2.20}$$

ここに，$[E]$は移流分散行列，$[M]$は質量行列，$\{\overline{C}_n\}$はラプラス空間上の節点濃度を表す未知ベクトル，$\{\overline{C}_n\}_{t=0}$は初期条件を表す既知ベクトル，$\{\overline{B}\}$はラプラス空間上の境界条件および外部流出入量を表す既知ベクトルである。この非対称の複素数行列を解いて，ラプラス空間上の節点濃度を計算する。

(3) 逆ラプラス変換

求めたラプラス空間上の各節点の濃度から逆ラプラス変換により時間 t の各節点の濃度を計算する。

$$\hat{C}_n(\ell,t)=\sum_{j=1}^{M}L^{-1}\left[\overline{C}_{n,j}(p_k)\right]w_j(\ell)=\sum_{j=1}^{M}C_{n,j}(t)w_j(\ell) \tag{2.21}$$

逆ラプラス変換の数値解法として de Hoog et al.（1982）の方法を用い，異なる $p_k(k=0, 1,\cdots, 2K)$に対して(2.20)式を解く。

$$C_{n,j}(t)=\frac{1}{T}\exp(p_0t)\left\{\frac{1}{2}\overline{C}_{n,j}(p_0)+\sum_{k=1}^{2K}\mathrm{Re}\left[\overline{C}_{n,j}\left(p_0+\frac{k\pi i}{T}\right)\exp\left(\frac{k\pi it}{T}\right)\right]\right\}+E \tag{2.22}$$

ここに，$2T$ はフーリエ級数の区間$[0, 2T]$, Re はラプラス空間上の節点濃度の実数部，$p_0+k\pi i/T=p_k$, $i=(-1)^{1/2}$を表し，Eは誤差で10^{-4}から10^{-6}の値を用いると解の精度が高くなることが知られている。また，収束のため通常 K=5 を用い，パラメータ p_0は次式により与えられる。

$$p_0=\mu-\ln(E)/2T \tag{2.23}$$

ここに，t_{max}を最大計算時間として経験的に$\mu=0$，$T=0.8t_{max}$が用いられる。

3. 逆解析手法

3.1 解析手法の概要

逆解析手法としては Carrera and Neuman（1986）の手法を踏襲する。すなわち，得られたパラメータ推定値の不確実性（誤差）を評価できるように観測値の不確実性を表す共分散行列を入力可能な最尤推定法を用いて，観測値と計算値の残差二乗和で表される目的関数を最小化する最適パラメータを推定する。また，複数のモデルの中から最適なモデルを評価できるようにエントロピー最大化原理に基づく赤池の情報量基準を算定できるものとする。逆解析プログラムの作成にあたっては，ヤコビアン行列の算定には数値微分を用い，オリジナルのコードは書き換えないこととする。逆解析のフローを図 3.1に示す。

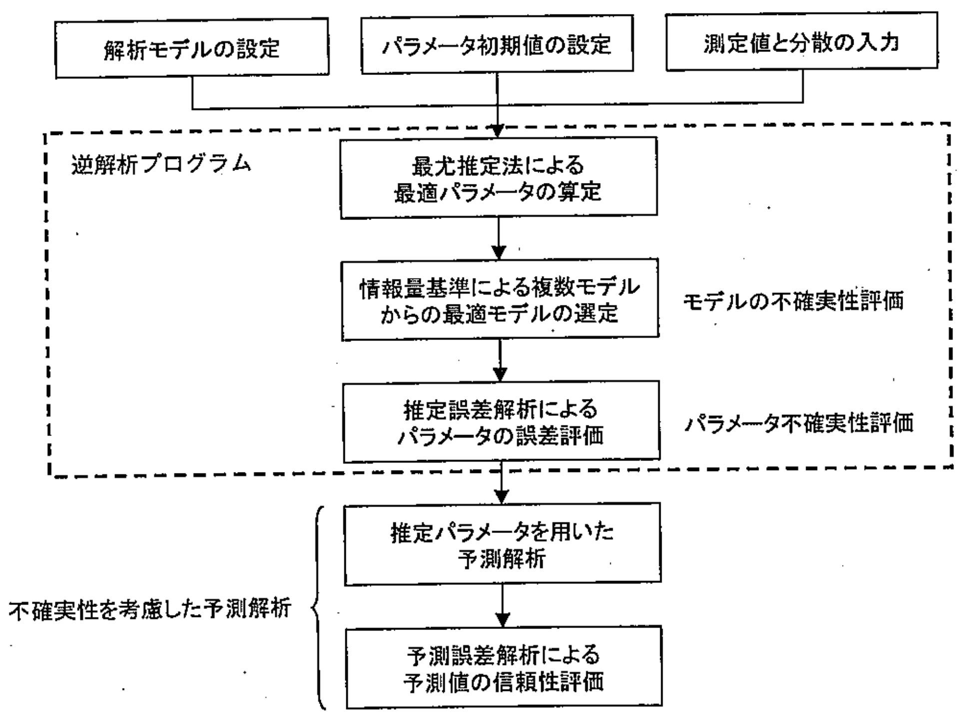


図 3.1 逆解析フロー

3.2 最尤推定法

3.2.1 尤度関数

ある観測値 z に対する母集団の確率分布 $P(z)$は，z_0 を真値として図 3.2(a)のように表される。実際に得られた観測値は，この母集団から無作為に抽出された標本であり，その中のある観測値 z_1 に対する尤度関数は，もとの確率分布関数の左右を逆転させた図 3.2(b)のようになる。

$$L(\hat{z}) = L(\hat{z}|z) = P(z|\hat{z}) \tag{3.1}$$

ここに、$\hat{z}$ は推定値を表す。尤度関数の値が大きい場合は観測値 z に対して真値 z_0が推定値にある可能性が高く，逆に尤度関数の値が小さい場合は推定値にある可能性は低くなる。さらに測定を繰返して複数の観測値が得られた場合には，それぞれの観測値に対する尤度関数は図 3.2(c)の点線のようになる。推定値 $\hat{z}$ の尤度関数は，これらの尤度関数の積により求められ，図 3.2(c)中の実線のようになる。

$$L(\hat{z}) = L(\hat{z}|z_1, z_2, \cdots, z_n) = \prod_{i=1}^{n} L(\hat{z}|z_i) \tag{3.2}$$

この尤度関数が最大となる値を真値 z_0 の最尤推定値とする。観測値の数が多くなるほど，尤度関数の最尤推定値 $\hat{z}$ が真値 z_0 に近づき，その幅はもとの確率分布関数よりも狭くなる。

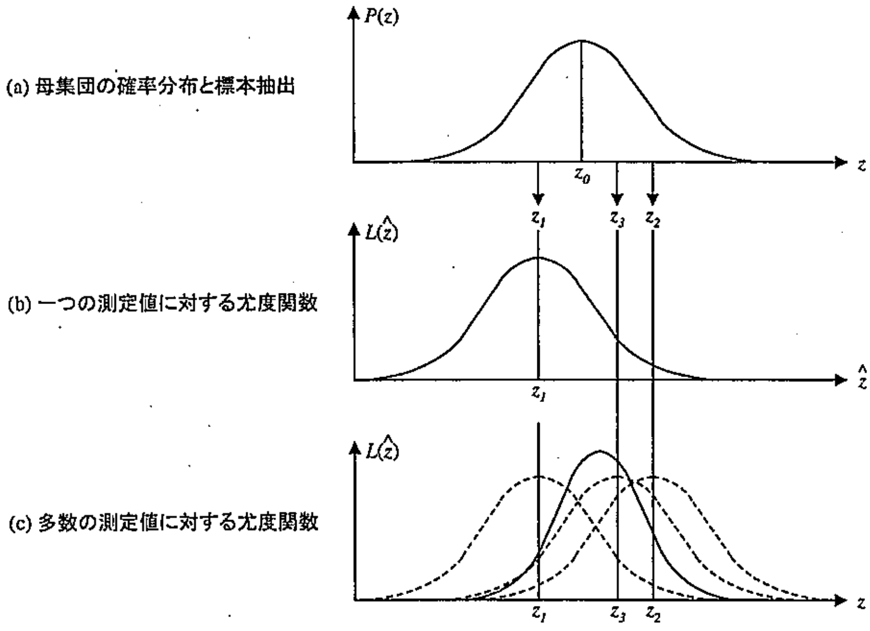


図 3.2　尤度関数模式図（中川・小柳，1982）

3.2.2 最尤推定法（Maximum Likelihood estimation：ML 法）

最尤推定法によるパラメータ値の推定方法について述べる。観測値 $z^*=(c^*, p^*)^T$ を観測した濃度やパラメータのベクトル，$\theta=(\sigma_c^2, \sigma_p^2)^T$ を事前誤差の未知統計パラメータを表すベクトルとし，$\beta=(p, \theta)^T$ を未知パラメータとすると，得られた観測値 z^* のもとで最も確からしいパラメータを求める場合（Maximum A Posteriori approach：MAP 法）は，以下のように表される。

$$f(\beta|z^*) \quad -> \max \tag{3.3}$$

$$S=-2\cdot\ln\left[f(\beta|z^*)\right] \quad -> \min \tag{3.4}$$

一方，最尤推定法では，計算値が最も観測値に近くなるようなパラメータ値を求める。尤度関数は最尤推定値のもとで z^* が観察される確率と表され，以下のように定義される。

$$L(\beta|z^*)=f(z^*|\beta) \quad -> \max \tag{3.5}$$

したがって，最尤推定法では，次式で表される尤度関数（Maximum likelihood criterion）を最大にするようなパラメータ β を求める問題，すなわち観測値が求まる確率が最大となるようなパラメータを求める問題に帰着される。

$$L(\beta|z^*)=f(z^*|\beta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\cdot|C_z|}}\exp\left[-\frac{1}{2}(z^*-z)^T C_z^{-1}(z^*-z)\right] \tag{3.6}$$

ここに，z は計算値，C_z は事前誤差の共分散行列（covariance matrix）で，

$$C_z=\begin{bmatrix} C_c & 0 \\ 0 & C_p \end{bmatrix} \tag{3.7}$$

と表わされる。ここで，観測値には測定に伴う誤差が，計算値には計算に伴う数値誤差や理論誤差が含まれており，観測値と計算値の残差にはこれらの様々な要因が重なり合ってふくまれているため，残差は平均値 0，分散 σ_c の正規分布とみなすことができる。

$$C_c=\sigma_c^2\cdot V_c \tag{3.8}$$

ここに，V_c は観測値間の誤差の相対的割合を示す正値の対角行列で，σ_c^2 は事前の誤差の分散値を表す正のスカラー量である。一般に，共分散行列の各成分値は未知の場合が多いため，V_c には単位行列，σ_c^2 には観測値の分散を用いる。パラメータの共分散行列に関しても同様に，以下のように表される。

$$C_p = \sigma_p^2 \cdot V_p \tag{3.9}$$

時間的にも空間的にも測定点の間隔を密にすると隣接する観測値の誤差間に相関が強くなるため，共分散行列の非対角要素は 0 ではなくなる。一方，測定点の間隔が十分疎であれば，観測値間は互いに独立で誤差相関がなくなるため非対角要素は 0 となり，上式のように書き表される。

観測値やパラメータが複数ある場合の尤度関数は，単独の場合の尤度関数の積により表され，観測値総数を N，パラメータ数を M として，以下のように表される。

$$L(\beta|z^*) = \prod_{i=1}^{N+M} L(\beta|z_i) = \prod_{i=1}^{N+M} f(z_i|\beta) \tag{3.10}$$

これは，同時確率密度関数により以下のように表される。

$$\begin{aligned} L(\beta|z^*) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N+M}{2}} |C_c|^{\frac{1}{2}} |C_p|^{\frac{1}{2}}} \\ &\cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left\{(c^* - c)^T C_c^{-1}(c^* - c_c) + (p^* - p)^T C_p^{-1}(p^* - p)\right\}\right] \end{aligned} \tag{3.11}$$

最尤推定法では，上式で表される尤度関数を最大にするパラメータ値を求めることとなり，尤度関数の対数をとって最小化問題に書き換える。

$$S = -2\ln\left[L(\beta|z^*)\right] \quad -> \min \tag{3.12}$$

式(3.11)を代入して最終的に次式を得る。

$$S = \frac{J_c}{\sigma_c^2} + \frac{J_p}{\sigma_p^2} + \ln|V_c| + \ln|V_p| + N_c \ln\sigma_c^2 + N_p \ln\sigma_p^2 + N\ln(2\pi) \ -> \min \tag{3.13}$$

ここに，N_c はトレーサ濃度観測値総数，N_p はパラメータ観測値総数，N（$=N_c+N_p$）は観測値総数を表し，

$$J_c = \{c^* - c\}^T V_c^{-1} \{c^* - c\}$$
$$J_p = \{p^* - p\}^T V_p^{-1} \{p^* - p\} \tag{3.14}$$

となる。分散が既知の場合と未知の場合で以下のように場合分けする。

(1)　分散が既知の場合

分散σ_c^2およびσ_θ^2が既知の場合，式(3.13)は定数項を除いて次式の一般的な最小二乗法の形式に書き換えられる。

$$S_1 = \frac{J_c}{\sigma_c^2} + \frac{J_p}{\sigma_p^2} \ -> \min \tag{3.15}$$

これは，式(3.11)中の対数部を最小にするパラメータを求めることと等価である。さらに，書き直して次式の目的関数を得る。

$$J = J_c + \lambda_p J_p \tag{3.16}$$

$$\lambda_p = \frac{\sigma_c^2}{\sigma_p^2} \tag{3.17}$$

ここに，λ_pは重みを表す既知の定数，J_cはトレーサ濃度に関する目的関数（concentration residual criterion）で，J_pはパラメータに関する目的関数でペナルティー基準（Penalty criterion または Plausibility criterion）と言う。

以上より，分散が既知の場合の最尤推定法は，観測値誤差の分散で重み付けされた残差二乗和を最小にするパラメータ最尤推定値を求める問題となる。

(2)　分散が未知の場合

相対値を表す対角行列Vが既知で分散σ_c^2およびσ_p^2が未知の場合，式(3.13)は定数項を除いて次式のように書き直される。

$$S_2 = \frac{J_c}{\sigma_c^2} + \frac{J_p}{\sigma_p^2} + N_c \ln \sigma_c^2 + N_p \ln \sigma_p^2 \quad -> \min \tag{3.18}$$

この最小化の過程で未知数である分散値を更新していく必要があり，λ_p に対して式(3.16)の最小化を行うとととなる。まず，$\lambda_p=1$ として式(3.16)の最小化を行い，新しく求められた標本分散から λ_p を求め，λ_p の変化が十分に小さくなるまで繰り返し最小化計算を実施する。

$$\lambda_p = \frac{s_c^2}{s_p^2} \tag{3.19}$$

ここに，s_c^2，s_c^2 は標本分散で次式により算定される。

$$s_c^2 = \frac{J_c}{N_c}, \quad s_p^2 = \frac{J_p}{N_p} \tag{3.20}$$

すなわち，分散が未知の場合の最尤推定法は，式(3.16)を目的関数として非線形最小二乗法により最適パラメータを求める問題となる。

以上より，分散が既知であるか未知であるかにかかわらず，式(3.16)の最小化問題となる。

3.3 非線形最小二乗法

最適化のための非線形最小二乗法のフローを図 3.3に示す。ここでは，定常問題および非定常問題における非線形最小二乗法と収束判定基準について述べる。

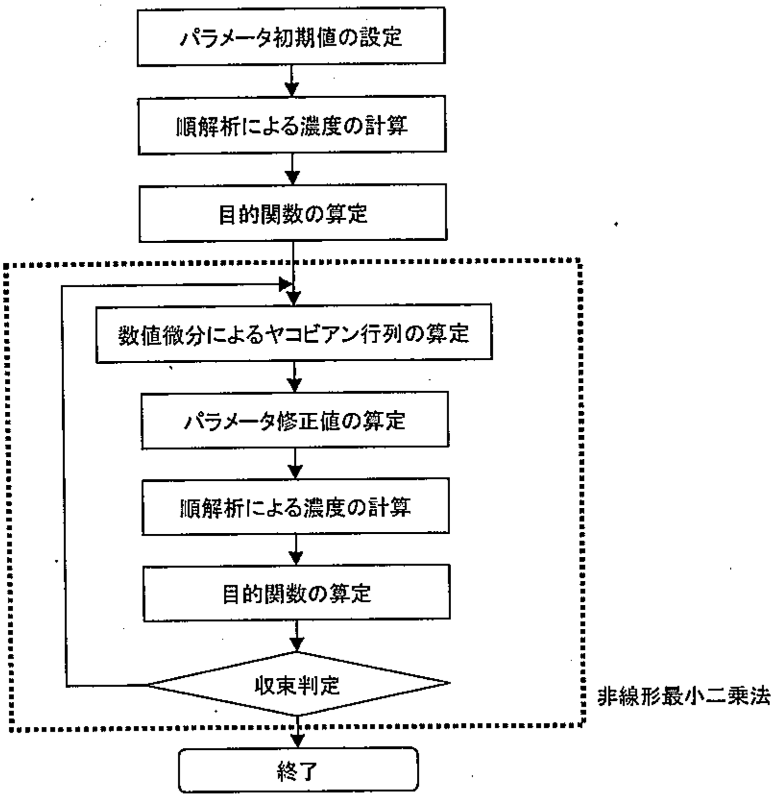


図 3.3 非線形最小二乗法フロー

3.3.1 定常問題

水理問題や物質移行問題は，パラメータに関して非線形であるため，パラメータ初期値を設定して残差二乗和を最小にするパラメータ最適値を反復計算により求める非線形最小二乗法を用いる必要がある。非線形最小二乗法には，可変計量法，共役勾配法，シンプレックス法など様々な手法があるものの，目的関数が二乗和の形式であることを積極的に活用した手法の方が収束も速く精度も良いことが知られている。そこで，最も単純な最小化アルゴリズムとして，各繰り返し計算において目的関数の減少が局所的に最大となる方向にそって探索する最急降下法について説明し，線形近似による反復解法であるガウス・ニュートン法と本プログラムで採用したマルカート法について以下に述べる。

(1) 最急降下法

初期推定値から方向 d にわずかに動いたとき，目的関数の変化はテイラー展開して 2 次の項ま

でとると以下のように表される。

$$S(p+\delta\cdot d)=S(p)+\delta\left(\sum_j d_j\frac{\partial S}{\partial p_j}\right)+O(\delta^2) \tag{3.21}$$

ここに，δ はスカラー量，d は方向ベクトルである。方向ベクトル d を最急降下方向 g にとれば距離あたり最も大きく目的関数が減少する。

$$d_j=g_j\equiv-\frac{\partial S}{\partial p_j} \tag{3.22}$$

パラメータの修正ベクトルは，

$$\Delta p_i=-\delta\cdot d_j=\delta'\cdot\frac{\partial S}{\partial p_i} \tag{3.23}$$

と表わされ，パラメータを次式に従い更新する。

$$p_{k+1}=p_k+\Delta p_k \tag{3.24}$$

すなわち，反復計算の各回において，初期値θ_kにおいて目的関数 S の偏微分を計算して最急降下方向 g を求め，p_kから方向 gの直線上に極小点を探して次の出発点 p_{k+1}とする。最急降下方向 g は，局所的には最良の方向であるが，大局的には必ずしも良い方向ではないため，実際には良い結果は得られないことが多い。

(2)　ニュートン法

目的関数が $\hat{p}$ で極小値を取ると次式を満たす。

$$f(p)=\left.\frac{\partial S}{\partial p_j}\right|_{p=\hat{p}}=0 \qquad (j=1,2,\cdots,M) \tag{3.25}$$

上式を満たす点を S の停留点と呼び，この点が極小点かどうかは 2 階以上の偏微分行列によって決まるが，連立非線形方程式(3.25)の解が求まれば，極小かどうかの判定は困難ではない。

そこで，この連立非線形方程式を解く方法としてニュートン・ラプソン法

$$p_{k+1} = p_k - \frac{f(p_k)}{f'(p_k)} \tag{3.26}$$

を適用すると，近似値 p_k に対して，

$$\sum_{k=1}^{M} \frac{\partial^2 S}{\partial p_j \partial p_k} \Delta p_k = -\frac{\partial S}{\partial p_j} \qquad (j = 1, 2, \cdots, M) \tag{3.27}$$

を修正ベクトル Δp について解けば，次の近似値が求められる。

$$p_{k+1} = p_k + \Delta p_k \tag{3.28}$$

核種移行問題に適用してパラメータに関する項を無視すると，目的関数は次式となる。

$$S = \frac{\{c^* - c\}^T V_c^{-1} \{c^* - c\}}{\sigma_c^2} = \{c^* - c\}^T C_c^{-1} \{c^* - c\} \tag{3.29}$$

したがって，

$$-\frac{\partial S}{\partial p_j} = 2\left[\sum_i \frac{\partial c_i}{\partial p_j} c_{c,i}^{-1} \{c_i^* - c_i\}\right] = 2J^T C_c^{-1} \{c_i^* - c_i\} \tag{3.30}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 S}{\partial p_j \partial p_k} &= 2\sum_i \left[\frac{\partial c_i}{\partial p_j} c_{c,i}^{-1} \frac{\partial c_i}{\partial p_k} - \frac{\partial^2 c_i}{\partial p_j \partial p_k} c_{c,i}^{-1} \{c_i^* - c_i\}\right] \\ &= 2\left[J^T C_c^{-1} J - H C_c^{-1} \{c_i^* - c_i\}\right] \end{aligned} \tag{3.31}$$

ここに，J はヤコビアン行列，H は $m \times m$ のヘシアン行列である。式(3.30)と式(3.31)を式(3.27)に代入して，

$$\left[J^T C_c^{-1} J - H C_c^{-1} \{c_i^* - c_i\}\right] \cdot \Delta p = J^T C_c^{-1} \{c_i^* - c_i\} \tag{3.32}$$

したがって，ニュートン法においては，次式により修正ベクトルを求める。

$$\Delta p = \left[J^T C_c^{-1} J - H C_c^{-1}\left\{c_i^* - c_i\right\}\right]^{-1} \cdot J^T C_c^{-1}\left\{c_i^* - c_i\right\} \tag{3.33}$$

勾配ベクトルに２階偏微分の逆行列が重みとしてかかっているが，通常，ヘシアン行列の逆行列を求めるのは容易ではないため，簡単に単位行列を用いることもある。

ニュートン法は，ヘシアン行列(3.31)式が極小点付近で正定値である場合，解 $\hat{p}$ の近傍から出発すれば二次収束し，良い近似値を初期値に選べば収束は非常に速い。その反面，極小点まわりの収束領域が非常に狭いことが多く，また反復の各ステップで $c(p)$ の２階偏微分を計算する必要があり，このままでは実用的でない。そこで，次に，この２階偏微分の計算をしない方法としてガウス・ニュートン法系の最小二乗法について述べる。

(3)　ガウス・ニュートン法（Gauss-Newton method）

ニュートン法における式(3.32)の右辺第２項を無視した場合には，ガウス・ニュートン法となる。

$$\Delta p = \left[J^T C_c^{-1} J\right]^{-1} \cdot J^T C_c^{-1}\left\{c_i^* - c_i\right\} \tag{3.34}$$

実際，式(3.32)の右辺第 2 項は，目的関数(3.29)がパラメータに関して線形である場合や右辺第１項に比較して小さい場合（例えば，計算値と観測値の差が小さい）には無視できる。また，モデルが妥当であれば，右辺第２項は正規分布をなす各観測点の誤差に他ならないため，全体的にはキャンセルされる。

したがって，ガウス・ニュートン法では $c(p)$ の２階偏微分を計算する必要がなく，２階微分が小さく線形に近い場合や，残差 $|c^* - c(p)|$ が小さい場合には有効である。また，解に近い値を与えた場合には速やかに収束するものの，残差二乗和が反復の各ステップで減少することは保証されていないため，初期値が真の解から大きく離れていたり，$c(p)$ の非線形性が大きい場合には安定性が悪く，種々の安定化が必要となる。一方，ニュートン法では，勾配ベクトルに重みが付加されているためガウス・ニュートン法より収束が改良されて外れた初期値を与えても収束するが，解の収束に多くの反復回数を要する。

(4)　マルカート法（Levenberg-Marquardt method）

式(3.23)に式(3.30)を代入して書き直すと，

$$\Delta p = \delta' \cdot \frac{\partial S}{\partial p} = \lambda \cdot \left[J^T C_c^{-1}\left\{c_i^* - c_i\right\}\right] \tag{3.35}$$

となる。ここに，λ は 0 または正のスカラー量である。

マルカート法は，ガウス・ニュートン法と最急降下法の長所を活かした折衷手法で，式(3.34)

と(3.35)より正規方程式の係数行列の対角要素に付加項を加えた次式により修正ベクトルを計算する。

$$\Delta p = \left[J^T C_c^{-1} J + \lambda I\right]^{-1} \cdot J^T C_c^{-1} \left\{c_i^* - c_i\right\} \tag{3.36}$$

ここに，I は単位行列である。したがって，$\lambda=0$ ならばガウス・ニュートン法そのものであり，λ を無限大にすると最急降下法となる。すなわち，計算の初期の段階において解が遠く離れ非線形性の影響が大きい場合には λ を大きく選び，反復計算の過程で解に近づくにつれて λ を小さくすることによって解を安定にかつ早く求めることができる。

本プログラムでは、$\lambda=0.001$ とし以下手順で計算を実施する。

① 残差二乗和 $S(p_k)$ ［式(3.29)］を計算する。
② パラメータの修正ベクトル $\Delta\theta$ ［式(3.36)］を計算する。
③ 残差二乗和 $S(p_k+\Delta p_k)$ ［式(3.29)］を計算する。
④ $S(p_k+\Delta p_k) \geqq S(p_k)$ の場合 → ②に戻る。
$S(p_k+\Delta p_k) < S(p_k)$ の場合 → ⑤に進む。
⑤ パラメータを更新［式(3.24)］して，収束条件を満たさなければ②に戻る。

ヤコビアン行列の計算には，数値微分（influence coefficient method），感度方程式を用いる手法（sensitivity equation method），アドジョイント方程式を用いる手法（variational method）があり，前２者は（パラメータ数+1）回の計算，後者は（観測点数+1）回の計算が必要になり，パラメータ数が観測点数より少ない場合には，前２者が有利で，多い場合には後者が有利となる。なお，ヤコビアン行列の算定は，数値微分により算定し，中央差分法を用いることとする。

3.3.2　非定常問題

目的関数は，前節と同様にパラメータに関する項を無視すると，

$$S=\{c_i^*-c_i\}^T C_c^{-1}\{c_i^*-c_i\} \tag{3.29 再掲}$$

は，以下のように表わされる。

$$S=\{c_0^*-c_0\}^T C_{c0}^{-1}\{c_0^*-c_0\}+\sum_{t=1}^{ntime}\{c_t^*-c_t\}^T C_{ct}^{-1}\{c_t^*-c_t\} \tag{3.37}$$

ここに，添え字0およびtはそれぞれ定常時と非定常時の水頭を表わし，*ntime*は時間ステップ数を表わす。これを前節の非線形最小二乗法にしたがってパラメータの修正ベクトルを求めると，非定常問題における修正ベクトルは以下のようになる。

$$\begin{aligned}\Delta p_k=&\left[J_0^T C_{c0}^{-1}J_0+\sum_t^{ntime}J_t^T C_{ct}^{-1}J_t+\lambda I\right]^{-1}\\&\cdot\left[J_0^T C_{c0}^{-1}\{\bar{c}_0-c_0(p)\}+\sum_t^{ntime}J_t^T C_{ct}^{-1}\{\bar{c}_t-c_t(p)\}\right]\end{aligned} \tag{3.38}$$

3.3.3 収束判定基準

収束の判定には，以下に示す５つの収束判定基準値を設定し，この基準値を満たした場合には繰返し計算を終了する。すなわち，①繰返し計算回数が多い場合，②目的関数が小さくなった場合，③目的関数の変化が小さくなった場合，④⑤極小点近傍に収束しているためヤコビアン行列のノルムが小さくなった場合には，繰返し計算を終了する。

(1) 繰返し計算回数

$$niter \le 100 \tag{3.39}$$

(2) 目的関数

$$J \le 10^{-5} \tag{3.40}$$

(3) 目的関数の変化（繰返し計算回数 10 以下）

$$\frac{|\Delta J|}{J} \le 10^{-5} \tag{3.41}$$

(4) 目的関数の勾配（現時点では設定しない）

$$\|\nabla J\| \le 10^{-5} \tag{3.42}$$

ここに，‖ ‖はノルムを表わす。

(5) 目的関数の勾配の変化（現時点では設定しない）

$$\frac{\|\nabla J\|}{\|\nabla J\|_0} \le 10^{-6} \tag{3.43}$$

また，分散が未知の場合には，式(3.19)で表わされる重み λ の収束条件として，重み λ の変化が小さくなった場合には，重み λ の更新を終了する。

(6) 重み λ の変化

$$\frac{|\Delta \lambda|}{\lambda} \le 10^{-3} \tag{3.44}$$

一連の最小化アルゴリズムのフローを図 3.4に示す。

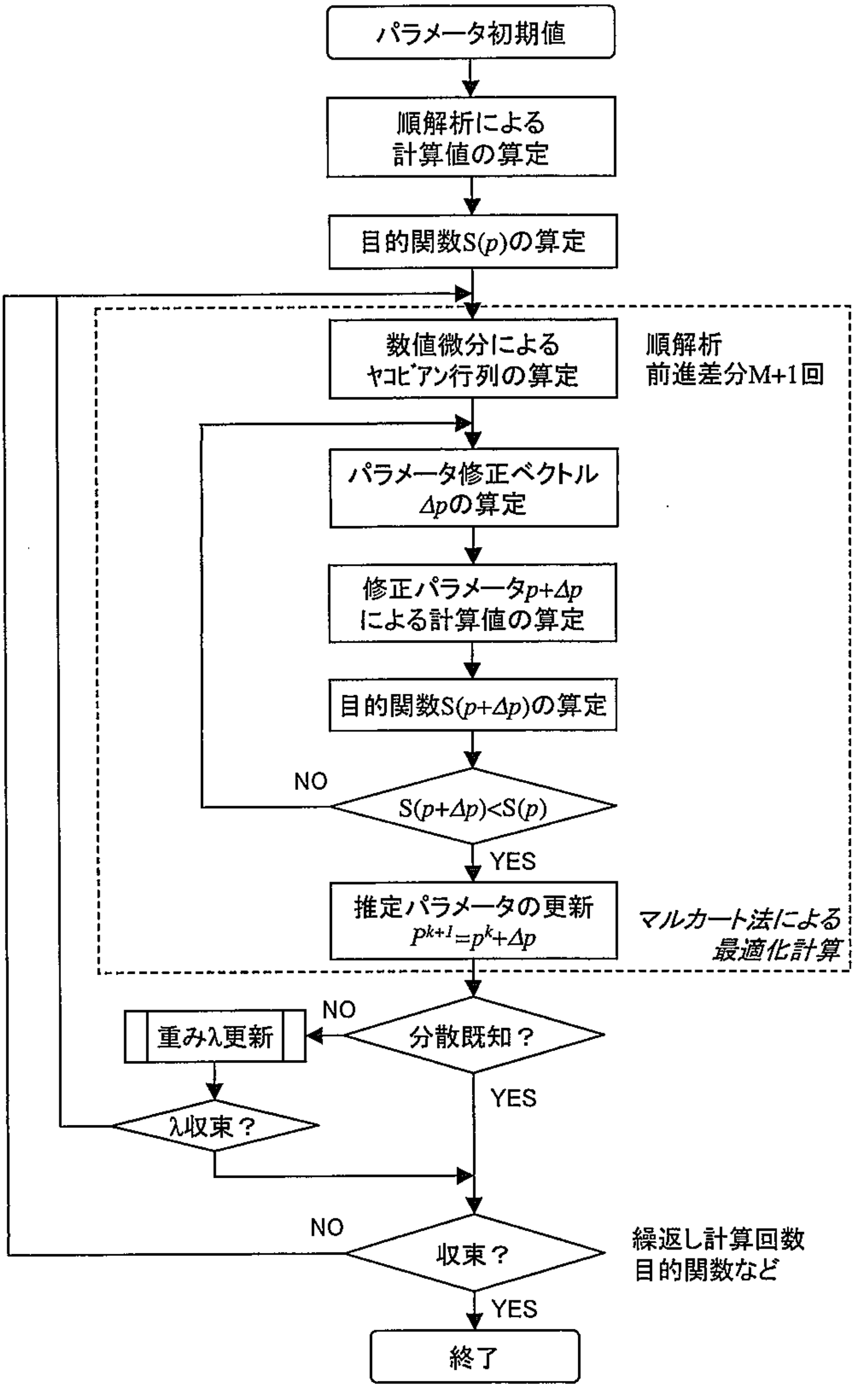


図 3.4　最小化アルゴリズムの詳細フロー

3.4 線形推定誤差解析

逆解析により得られたパラメータ推定値の線形誤差解析（Linear Estimation Error Analysis）について述べる。まず，パラメータ推定値の共分散行列を求め，この分布特性からパラメータ推定値の誤差評価手法とその問題点について以下に述べる。

3.4.1 パラメータ推定値の共分散行列

パラメータの最尤推定値 $\hat{p}$ のごく近傍に対しては，非線形モデルの場合でも線形推定誤差解析を用いることができる。すなわち，最尤推定法の正規性より，あるレベルの信頼性区間においては，水頭はパラメータの線形関数と見なすことができ，パラメータ推定値の確率分布は，パラメータの平均値（推定値）と共分散によって表わすことができる。

最尤推定量は，標本数 n が大きくなるに従い，漸近的に多変量正規分布に従い，その共分散行列は式(3.12)より次のように推定される。

$$H=-\frac{\partial^2}{\partial p^2}\ln L(p)=\frac{1}{2}\cdot\frac{\partial^2 S}{\partial p^2}=\frac{1}{2}\cdot\begin{bmatrix}\dfrac{\partial^2 S}{\partial p_1^2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 S}{\partial p_1 p_m}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ \dfrac{\partial^2 S}{\partial p_m p_1} & \cdots & \dfrac{\partial^2 S}{\partial p_m^2}\end{bmatrix} \tag{3.45}$$

この共分散行列Hの期待値を各要素とする m 次の正方行列をフィッシャー情報行列（Fisher information matrix）といい，2次の項を無視すると以下のように表わされる。

$$I_{ij}=E[H_{ij}]=\frac{1}{2}\cdot E\left[\frac{\partial^2 S}{\partial p_i p_j}\right]=E\left[\sum_r\sum_s\frac{\partial c_r}{\partial p_i}\frac{V_{crs}^{-1}}{\sigma_c^2}\frac{\partial c_s}{\partial p_j}+C_{pij}^{-1}\right] \tag{3.46}$$

このフィッシャー情報行列は，パラメータ推定値における対数尤度の曲率すなわち頂点での曲率を表わす量に他ならず，この値が大きければ頂点は急峻でパラメータ推定値から少しずれただけで対数尤度の値は急激に減少し，逆にこの値が小さければ頂点は扁平でパラメータ推定値周辺では対数尤度の値はあまり変化しない。このことは，パラメータ推定値の推定量としての良さに対応し，実際，最尤推定量の共分散行列 Σ_θ は，このフィッシャー情報行列の逆行列で表わされ，m 次の正方行列となる（Bury, 1975）。フィッシャー情報行列の逆行列は，クラメール・ラオの下限を与え，最小分散不偏推定量（Minimum Variance Bound）となる。

(1) 分散が既知の場合

観測値の誤差の分散が既知の場合には，

$$\Sigma_p = Var(p) = I^{-1} = \left[\frac{1}{\sigma_c^2} J^T V_c^{-1} J + C_p^{-1} \right]^{-1} \tag{3.47}$$

と表わされ，特にパラメータに関する事前情報がない場合には，

$$\Sigma_p = \sigma_c^2 \left[J^T V_c^{-1} J \right]^{-1} \tag{3.48}$$

となる。したがって，得られた各パラメータ推定値は，その値を平均に共分散行列の値を分散に持つ正規分布となる。この共分散行列は，水頭観測値の誤差行列からパラメータ推定値の誤差行列への変換を表わし，一般に誤差伝播則と呼ばれる。このパラメータ推定値の誤差の分散から，観測点のとり方やパラメータの選び方（ヤコビアン行列），測定精度（水頭観測値の誤差行列）に規定され，観測値そのものには規定されないことがわかる。

(2)　分散が未知の場合

分散が未知（測定値誤差の分散は、n 個の測定値間での相対比である行列 V は既知であるが、絶対値を決める比例定数σ_c^2が未知）の場合には，最小二乗条件を満たすパラメータ $\hat{p}$ を決定した後、そのあてはめ残差の大きさを用いて未知の比例定数 $\hat{s}_c^2$ を推定する。すなわち、未知量σ_c^2を用いて最小二乗法の解の計算を行い、次式により分散 $\hat{s}_c^2$ を求める。

$$\hat{s}_c^2 \equiv \frac{\sigma_c^2}{n_c - m} \cdot S(\hat{p}) = \frac{\{\overline{c} - c(\hat{p})\}^T V_c^{-1} \{\overline{c} - c(\hat{p})\}}{n_c - m} \tag{3.49}$$

上式で求めた不偏推定量を用いて，

$$\Sigma_p = \left[\frac{1}{\hat{s}_c^2} J^T V_c^{-1} J + C_p^{-1} \right]^{-1} \tag{3.50}$$

$$\Sigma_p = \hat{s}_c^2 \left[J^T V_c^{-1} J \right]^{-1} \tag{3.51}$$

となる（Bard, 1974; Yeh and Yoon, 1976; Shah et al., 1978; Yeh, 1986）。

3.4.2 信頼区間推定

式(3.47), (3.48), (3.50), (3.51)に示したパラメータ推定値の誤差行列を用いたパラメータの区間推定方法について述べる。

パラメータ推定値のまわりで水頭値がパラメータに関して線形と仮定すると，パラメータは最尤推定値のまわりで M 次元正規分布しており，残差二乗和は次式のように表わされる。

$$S(p)=S(\hat{p})+(p-\hat{p})^T\Sigma_{\hat{p}}^{-1}(p-\hat{p})=S(\hat{p})+\Delta p^T\Sigma_{\hat{p}}^{-1}\Delta p \tag{3.52}$$

ここに，$p=\hat{p}+\Delta p$ である。

一方，残差二乗和の信頼度(1-α)における区間推定は，F分布により次式のように表される。

$$S(p)\le S(\hat{p})+\hat{s}_c^2\cdot M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha} \tag{3.53}$$

ここに，式(3.49), 最尤推定値 $\hat{p}$ のまわりで上式を満たすパラメータ p の領域を考える。式(3.52)と(3.53)より，

$$(p-\hat{p})^T\Sigma_{\hat{p}}^{-1}(p-\hat{p})\le\hat{s}_c^2\cdot M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha} \tag{3.54}$$

となり，一般に M 次元空間での超楕円体で表わされる。この楕円体は，パラメータ推定値の共分散行列 Σ_p の固有値解析により求められ，Σ_p の固有ベクトルの方向に軸を持ちその軸の長さは固有値の平方根に比例する。したがって，i 番目のパラメータ推定値の 100(1-α)%信頼区間の軸方向の長さは，

$$\begin{aligned} p'_{i\pm} &= \hat{p}\pm\sqrt{(1\pm\rho)\cdot\hat{s}_c^2\cdot M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha}}\cdot u_i \qquad (i=1,2) \\ &= \hat{p}\pm\sqrt{M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha}}\cdot a_i\cdot u_i \end{aligned} \tag{3.55}$$

と表わされる。ここに，a_i は Σ_p の固有値の平方根，u_i は固有ベクトルである。

非線形性を考慮した場合には，楕円体の軸長を示す固有値 a_i^2 は以下のように修正される。

$$a_i'^2=a_i^2\cdot\hat{s}^2\cdot\left(\frac{A_+ + A_-}{2}\right) \tag{3.56}$$

ここに，

$$A_{\pm i}=\frac{M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha}}{S(p'_{i\pm})-S(\hat{p})} \tag{3.57}$$

であり，$\hat{s}_c^2$ は，分散が既知の場合はその値を，未知の場合は式(3.49)の値である。この計算には，S($p'_{i\pm}$)の計算のために 2M 回の順計算が必要となる。

最終的に，新たな共分散行列は，固有ベクトルと修正された固有値から逆算され $S(\theta'_{i+})$ と $S(\theta'_{i-})$ の相違から真の信頼性区間の非対称性を類推できる。

一般にパラメータ推定値の誤差行列は，たとえ観測値の誤差行列が対角行列（互いに独立）であっても，非対角要素（共分散）もゼロではない。そこで，この非対角要素に関して相関係数が定義される。

$$\rho_{ij}\equiv\frac{\left(\Sigma_{\hat{\theta}}\right)_{ij}}{\sqrt{\left(\Sigma_{\hat{\theta}}\right)_{ii}\left(\Sigma_{\hat{\theta}}\right)_{jj}}}=\frac{\left(\Sigma_{\hat{\theta}}\right)_{ij}}{\sigma_{\hat{\theta}i}\cdot\sigma_{\hat{\theta}j}}\qquad\left(-1\le\rho_{ij}\le 1, i\ne j, i=1,\cdots,m, j=1,\cdots,m\right) \tag{3.58}$$

この相関係数 ρ_{ij} を要素とする $m\times m$ の対称行列を相関行列と呼ぶ。各要素の絶対値が大きい場合には，対応するパラメータ間の相互依存性が高いことを示す。また，要素が負の値の場合は，反比例することを示す。

パラメータ数が 2 の場合は，

$$\begin{aligned}\Delta p^T\Sigma_{\hat{p}}^{-1}\Delta p&=\left(\Delta p_1,\Delta p_2\right)\Sigma_{\hat{p}}^{-1}\begin{pmatrix}\Delta p_1\\ \Delta p_2\end{pmatrix}\\&=\frac{1}{1-\rho^2}\left[\left(\frac{\Delta p_1}{\sigma_1}\right)^2-2\rho\left(\frac{\Delta p_1}{\sigma_1}\right)\left(\frac{\Delta p_2}{\sigma_2}\right)+\left(\frac{\Delta p_2}{\sigma_2}\right)^2\right]\\&=\frac{1}{2(1+\rho)}\left(\frac{\Delta p_1}{\sigma_1}+\frac{\Delta p_2}{\sigma_2}\right)^2+\frac{1}{2(1-\rho)}\left(\frac{\Delta p_1}{\sigma_1}-\frac{\Delta p_2}{\sigma_2}\right)^2\\&\le\hat{s}_c^2\cdot M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha}\end{aligned} \tag{3.59}$$

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2(1+\rho)\cdot\hat{s}_c^2\cdot M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha}}\left(\frac{\Delta p_1}{\sigma_1}+\frac{\Delta p_2}{\sigma_2}\right)^2\\&+\frac{1}{2(1-\rho)\cdot\hat{s}_c^2\cdot M\cdot F_{M,N-M,1-\alpha}}\left(\frac{\Delta p_1}{\sigma_1}-\frac{\Delta p_2}{\sigma_2}\right)^2\le 1\end{aligned} \tag{3.60}$$

となり，楕円になる。

3.4.3 パラメータの推定誤差評価

パラメータ推定値の推定誤差は，パラメータ最尤推定値の共分散行列Σ_pにより評価でき，値が小さいほど推定値の精度も良いことを示す。共分散行列の i 番目の対角項は，推定値が互いに相関関係にない場合には i 番目のパラメータ推定値の分散を表わすが，推定値が互いに相関関係にある場合には i 番目のパラメータ推定値の信頼区間 w_i は i 番目の対角項の平方根に比例するものの図 3.5に示すように w_i/v_i だけ過大評価することとなる。すなわち，1 つのパラメータの信頼性（uncertainly）が他のパラメータの信頼性に影響を及ぼす。ここに，v_i はパラメータ間に相関関係がないか，他のパラメータを固定した場合の信頼区間である。

そこで，パラメータの信頼性を評価するために共分散行列の固有値解析を行う。すなわち，信頼区間の形状と大きさはΣ_pの固有値解析によって求められ，楕円軸の半径 a_1, a_2 は固有値の平方根に比例する。したがって，Σ_pの固有値が小さいほど得られたパラメータの推定精度が良く，大きいほどパラメータの推定精度が良くないことを表わす。また，楕円軸の方向β_{12}は固有ベクトルの成分によって表わされ，$\beta_{12}=0$ の場合には相関関係はなく互いに独立となり，β_{12} が大きい場合には相関関係も大きくなる。異なるパラメータ間の推定誤差の拡がりは，状態数（condition number：最大固有値と最小固有値の比）によって表わされる。

分散σ_c^2とσ_p^2が未知の場合，Σ_pは濃度観測値とパラメータの事前推定値間の関係を表わす。すなわち，パラメータ事前推定値近傍での計算値が観測値に近い場合には J, J_c, J_p はともに小さくなり，式(3.20)より s_c^2 と s_p^2 も小さくなり，式(3.49)よりΣ_pも小さくなる。したがって，観測値とパラメータ事前推定値がともに妥当であれば，Σ_pは小さくなる。

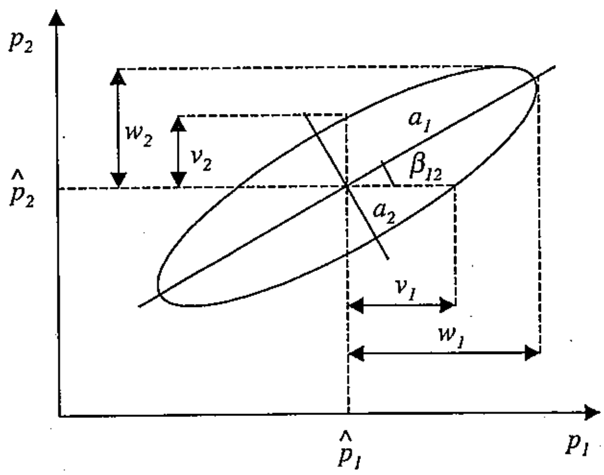


図 3.5　2 次元信頼性空間

3.4.4 線形推定誤差解析の問題点

非線形問題に対して線形推定誤差解析を用いた場合には，一般に線形推定誤差解析で得られた共分散行列Σ_pは推定値の真の共分散行列よりも大きくなるという問題が生じる（その差の行列も半正値である）。例えば，水頭と各パラメータ間の関係に言及すると，降水，境界水頭，境界流量は水頭と線形関係にあり，透水係数，貯留係数，流出量は水頭と非線形関係にある。このうち透水係数に関しては，標準偏差σが小さい場合（0.2または0.5）には，log-Tと水頭は線形関係にあるが，σが大きい場合には，非線形関係となり，共分散行列Σ_pの修正が必要となる。

非線型性が強い場合でも，観測量（計測位置や計測時間に関するデータ量：h*の次元）を大きくしたり，パラメータを変換する（例えば，透水係数の対数をとる）ことによって，真の推定値の共分散行列をΣ_pで近似できるようになる。すなわち，観測量が大きくなるにしたがって，真の推定値の共分散行列はΣ_pに収束し，線形と仮定しても大きな相違はなくなる（観測量が大きくなり分散が減少するにしたがって正規分布に近付くことからも類推できる)。また，パラメータの変換によって最尤値のコンター形状をバナナ形状から楕円形に変えることができる。

ただし，非線形問題を線形推定誤差解析によって近似可能な必要観測量の大きさは，真の推定値の分布形状に依存する（分布形状によって収束する速さが異なる）ため，必要観測量を定量的に求めることはできない。また，推定値が正規分布している場合にのみΣ_pを用いることができ，さもなくば高次のモーメントも考慮する必要が生じる。

通常，観測量とパラメータの関係式はあらかじめ決っておりパラメータを変換できないが多いため，非線型性が強い場合や観測量が少ない場合には，線形推定誤差解析で得られた共分散行列Σ_pを修正する必要がある。その非線形性の影響を考慮する手法として，3.4.2節で示したCarreraの手法がある。

3.5 最適モデルの選定

逆解析においては，解析モデルを変更して同定するパラメータの数を増やすことによって計算値をより観測値に近付けることができる反面，個々の推定されるパラメータの精度は低くなる。そこで，最適な解析モデルを評価するための基準として以下に示す4つの判定基準を採用する。

(1) 赤池の情報量基準

$$AIC(\hat{\beta}) = S(\hat{\beta}) + 2M \tag{3.61}$$

(2) 赤池の情報量基準

$$BIC(\hat{\beta}) = S(\hat{\beta}) + M \cdot \ln N \tag{3.62}$$

(3) ARMA 基準 (autoregressive moving average models)

$$\phi(\hat{\beta}) = S(\hat{\beta}) + c \cdot M \cdot \ln(\ln N) \tag{3.63}$$

(4) 修正 Kashyap 基準

$$d_M = S(\hat{\beta}) + M \cdot \ln\left(\frac{N}{2\pi}\right) + \ln|F_M| \tag{3.64}$$

ここに，$S(\hat{\beta})$は式(3.13)で，Mはパラメータ数，cは2より大きい定数（デフォルト：c=2），F_Mはフィッシャー情報行列で，分散が既知の場合にはσ_c^2を，未知の場合には式(3.49)の$\hat{s}_c^2$を用いて式(3.46)より次式のように表わされる。

$$F_M = \frac{1}{\sigma_c^2} J^T V_c^{-1} J + C_p^{-1} \tag{3.65}$$

以上の4つの基準とも値が最も小さいモデルが最適なモデルと評価され，他の条件が同じであればパラメータ数の最も少ないものが最適モデルとなる。また，観測値数が増加するにしたがって最尤値$S(\hat{\beta})$も急激に増加するため，基準を小さくするためにはパラメータ数を増加する必要があり，観測値数が増加するにしたがってより複雑なモデルが要求されることとなる。Carrera and Neuman (1986) は，領域分割の異なる解析モデルの評価には，これら4つの基準のうち最も領域分割に敏感なd_Mを用いることが望ましく，計測データのノイズよりも解析モデルの構造が及ぼす影響の方が大きいと述べている。

4. 核種移行解析コード LTG マニュアル

4.1 ファイル構成

核種移行解析コード LTG の入力ファイルの構成と一覧を図 4.1および表 4.1に示す。

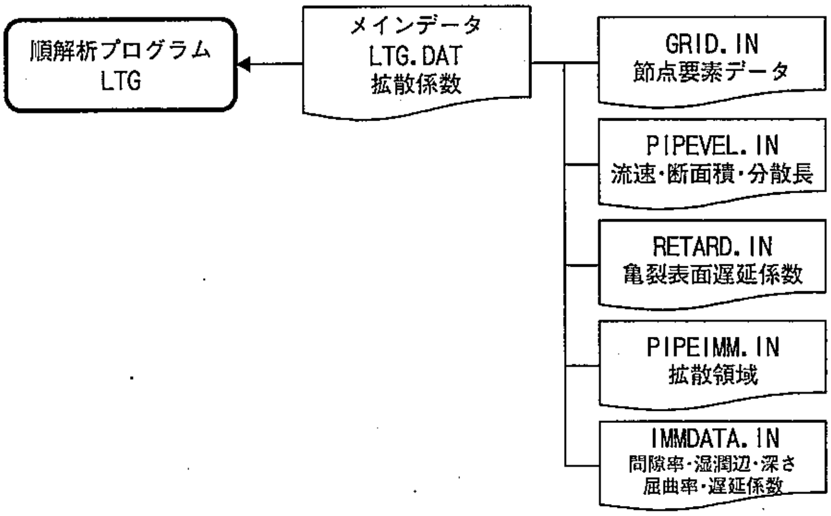


図 4.1 核種移行解析コード LTG 入力ファイル構成

表 4.1 核種移行解析コード LTG 入力ファイル一覧

ファイル名	データ内容	パラメータ
ltg.dat	メインファイル	拡散係数
grid.in	メッシュデータ	節点，要素
pipevel.in	パイプ特性データ	流速，断面積，分散長
retard.in	亀裂表面収着データ	遅延係数［核種毎］
pipeimm.in	拡散領域データ	拡散領域数，拡散領域番号
immdata.in	拡散領域特性データ	間隙率，湿潤辺長，マトリクス拡散深さ，屈曲率，遅延係数［核種毎］

4.2 入力パラメータ

解析に必要なパラメータを図 4.2と表 4.2に示す。

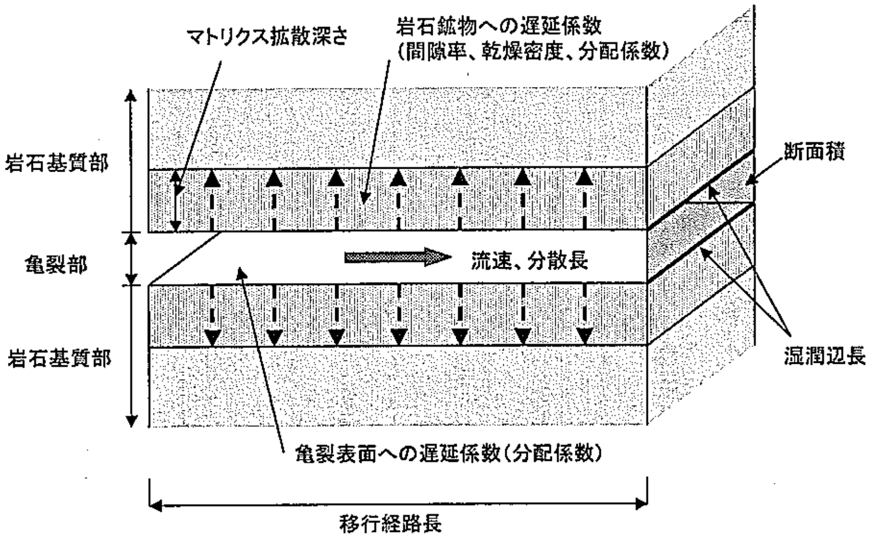


図 4.2 入力パラメータ模式図

表 4.2 入力パラメータ一覧

パラメータ	備考
移行経路長 [m]	チャンネルの長さ
流速 [m/y]	亀裂内実流速
断面積 [m²] (=亀裂幅×開口幅)	フラックス (mol/y；Cauchy 境界) から濃度への換算流量 (=流速×断面積) に用いられる
縦方向分散長 [m]	亀裂内分散長
拡散係数 [m²/y]	自由水中の拡散係数
屈曲率 [-]	1.0 に固定
有効間隙率 [-]	マトリクス拡散に寄与する間隙率
湿潤辺長 [m]	亀裂幅×2 倍 $$L(\ell)=2f\cdot\frac{A(\ell)}{2b(\ell)}$$ fはマトリクス拡散寄与面積率[-]，$2b(l)$は亀裂開口幅[m]
ﾏﾄﾘｸｽ拡散深さ [m]	マトリクス拡散に寄与する岩石基質の割れ目表面からの垂直距離
遅延係数 [-] (亀裂表面)	$$R_n(\ell)=1+\frac{Ka_n}{b(\ell)}$$ Ka_nは亀裂表面への分配係数[m]，通常は保守的に無視して 1.0
遅延係数 [-] (岩石基質)	$$R_n^m=1+\frac{\rho^m Kd_n}{\theta^m}$$ ρ^mは岩石基質の乾燥密度[kg/m³]，Kd_nは岩石鉱物への分配係数[m³/kg]

4.3 入力ファイル

(1) メインファイル ltg.dat

メインファイル ltg.dat を表 4.3に，変数一覧を表 4.4に示す。

表 4.3 ltg.dat ファイル

```
grid10Cs !6 character file root
!
!mxnn maxne maxspecies maxpipes maxzonespp
!maxbcs maxipnodes maxbctimes maxopnodes maxoptimes mxwindows phist
399 380 1 380 1 1 19 2 399 61 0 0

PAWORKS-LTG Simulation for Cs

.TRUE.     !logprt
.FALSE.    !multifile
.TRUE.     !Cauchy=.true. Dirichlet=.false.
.FALSE.    !time output to single file (multiflux)
2          !peclet_LTG (PAW:5000)

1          !nspecies
0, 4.730000e-03, 3.010000e-07        !npa, diffusion, lamda (1)
380
.TRUE.     !immob_zone_from_file
.TRUE.     !pipe_vel_from_file
.TRUE.     !retard_from_file
380
.TRUE.     !immob_zone_from_file
.TRUE.     !grid_from_file
1          !number of bec nodes (for species 1)
19          !nBCs (for species 1)
21, 42, 63, 84, 105, 126, 147, 168, 189, 210,
231, 252, 273, 294, 315, 336, 357, 378, 399,
2           !n_BC_times (for species 1)
1.000000e+00, 1.000000e+00   !BC_time, Bval
1.000000e+07, 1.000000e+00   !BC_time, Bval
399       !n_output_nodes
       1        2        3        4        5        6        7        8        9       10
      11       12       13       14       15       16       17       18       19       20
      21       22       23       24       25       26       27       28       29       30
                                          .
                                          .
     391      392      393      394      395      396      397      398      399
61         !n_output_times
1.000000e+01
1.258900e+01
      .
      .
1.000000e+07
0                  !nwindows
1.000000e-12       !deltol
500                !nitmax
5                  !nterm
1.000000e-10       !relerr
5.000000e+00       !tmax_fac
```

表 4.4 ltg.dat ファイルの変数一覧

	変数名	説　明
1	ltgtst	LTG アウトプットのファイル名に使う 6 文字
2	comments	“!”以下はコメント文となる
3	mxnn	節点数
	maxne	要素数
	maxspecies	核種数
	maxpipes	パイプ種類数
	maxzonespp	パイプあたりの拡散領域（immobile zones）数
	maxbcs	境界条件数
	maxipnodes	境界条件節点数
	maxbctimes	境界条件時間数
	maxopnodes	出力節点数
	maxoptimes	出力時間数
	mxwindows	最大出力 windows 数
	phist	p-space ファイルの取扱い
	=0	全シミュレーションを実施して，逆変換ファイルは消去
	=1	逆変換を実施し，p-space ファイルを保存
4	Test Case for LTG	出力ファイルのタイトル
5	logprt	出力形式　：【.true.】詳細出力，【.false.】概要出力
6	multifile	エコー出力先：【.true.】別ファイル【.false.】ltgtst.out ファイル
7	Cauchy	ソース境界条件：【.true.】フラックス，【.false.】濃度
8	Multiflux	節点濃度出力：【.true.】時間毎別ﾌｧｲﾙ（*.tim），【.false.】全時間 1 ﾌｧｲﾙ
9	peclet_LTG	数値収束改善のためのペクレ数（=流速×パイプ長／分散係数）（この値よりも大きい場合はメッシュを分割）
10	nspecies	核種数
	For each species *i*	
11	npa	核種 *i* の親核種の数
	diffusion	核種 *i* の自由水中の拡散係数
	lamda	核種 *i* の崩壊定数
	end species loop	
12	nptypes	パイプ種類の数（LTG.DAT と pipeimm.in の値と同じ）
13	pipe_imm_from_file	拡散領域データ：【.true.】pipeimm.in，【.false.】LTG.DAT
14	pipe_vel_from_file	流速，断面積，分散長データ：【.true.】pipevel.in，【.false.】LTG.DAT
15	retard_from_file	亀裂表面の遅延：【.true.】retard.in，【.false.】LTG.DAT
16	niztypes	拡散領域の種類数（LTG.DAT と immdata.in の値と同じ）

	if niztypes>0	
	immob_zone_from_file	拡散領域データ：【.true.】immdata.in, 【.false.】LTG.DAT
	end niztypes if loop	
17	grid_from_file	拡散領域データ：【.true.】grid.in, 【.false.】LTG.DAT
	loop *i* : 1 to # of species	
18	number bc	核種 *i* の境界条件数
	loop *k* : 1 to number bc	
19	nBCnodes	核種 *i*, 境界条件 *k* の節点数
20	bc nodes	境界条件節点番号（10 節点／行）
21	n_BC_times	核種 *i*, 境界条件 *k* のソース形状を決めるための点数
	loop *m* : 1 to n_BC_times	
22	time value	時間，ﾌﾗｯｸｽ（mol/y；Cauchy）または濃度（Direchlet）
	end *m* loop	
	end *k* loop	
	end *i* loop	
23	n_output_nodes	外部へのﾌﾗｯｸｽを計算する節点数
24	output_nodes	節点番号（10 節点／行）
25	n_output_times	出力時間数
26	output_times	出力時間
27	nwindows	ﾌﾗｯｸｽを計算する window の数
	loop *i* : 1 to nwindows	
28	"window"	window の 4 隅の座標
	next "window"	
29	deltol	ソルバーの許容誤差（10^{-12}）
30	nitmax	ソルバーの最大繰返し回数（500）
31	nterm	de Hoog 逆変換（2×nterm+1）の p-space 値の数（推奨値 5 以上）
32	relerr	逆変換の相対誤差で FE 解の期待精度に等しく設定，値が小さすぎると解の精度が悪くなる（10^{-10} < relerr < 10^{-7}）
33	tmax_fac	時間領域の逆変換の時間の乗数（5）

(2) メッシュデータファイルgrid.in

メッシュデータファイル grid.in を表 4.5に，変数一覧を表 4.6に示す。

表 4.5 grid.inファイル

```
399, 380 !nn, ne
-9.000000e+01, -1.000000e+01, 0.000000e+00     !x, y, z, node 1, pipe 380 h168
-9.000000e+01, -3.934030e-06, 0.000000e+00     !x, y, z, node 2, pipe 380 t189
-9.000000e+01,  1.000000e+01, 0.000000e+00     !x, y, z, node 3, pipe 381 t210
                        .
                        .
9.000000e+01,  1.000000e+02, 0.000000e+00      !x, y, z, node 398, pipe 758 t435
9.000000e+01, -1.000000e+02, 0.000000e+00      !x, y, z, node 399, pipe 759 h436
1, 2, 1  !
2, 3, 2  !
4, 1, 3  !
    .
    .
396, 398, 379     !
399, 397, 380     !
```

表 4.6 grid.inファイルの変数一覧

	変数名	説　明
1	nn	節点数
	ne	要素数
	loop : 1 to nn	
2	Xcoord, Ycoord, Zcoord	節点のx, y, z座標
	end loop	
	loop : 1 to ne	
3	node1,node2	要素の節点番号
	pipe type	種類
	end loop	

(3) メインファイルpipevel.in

チャンネル特性ファイル pipevel.in を表 4.7に，変数一覧を表 4.8に示す。

表 4.7 pipevel.in ファイル

```
380        !ne_check
4.083103e-01, 5.176000e-06, 2.000000e+00       !pipe 1
4.083099e-01, 5.176000e-06, 2.000000e+00       !pipe 2
4.083101e-01, 5.176000e-06, 2.000000e+00       !pipe 3
                    .
                    .
1.070680e+00, 1.357000e-05, 2.000000e+00       !pipe 380
```

表 4.8 pipevel.in ファイルの変数一覧

	変数名	説 明
1	ne_check	パイプの種類数
	loop : 1 to ne_check	
2	pipe velocity	流速
	area	断面積
	dispersion length	分散長
	end loop	

(4) 亀裂表面収着データファイル retard.in

亀裂表面収着データファイル retard.in を表 4.9に，変数一覧を表 4.10に示す。

表 4.9 retard.in ファイル

```
380        !ne_check
1.000000e+00,      pt=1
1.000000e+00,      pt=2
1.000000e+00,      pt=3
    .
1.000000e+00,      pt=380
```

表 4.10 retard.in ファイルの変数一覧

	変数名	説 明
1	ne_check	パイプの種類数
	loop *j* : 1 to ne_check	
	loop *k* : 1 to nspecies	
2	retardation of pipe j	遅延係数
	species k	核種
	end loop	

(5)　拡散領域データファイル pipeimm.in

拡散領域データファイル pipeimm.in を表 4.11に，変数一覧を表 4.12に示す。

表 4.11　pipeimm.in ファイル

```
380        !nPipeTypes
1, 1
 .
1, 380
```

表 4.12　pipeimm.in ファイルの変数一覧

	変数名	説明
1	nptypes_check	パイプの種類数
	loop *j* : 1 to nptypes_check	
	loop *k* : 1 to maxzonespp	
2	immobile zones attached to pipe type	拡散領域数
	immobile zone number	拡散領域番号
	end loop	

(6)　拡散領域特性データファイル immdata.in

拡散領域特性データファイル immdata.in を表 4.13に，変数一覧を表 4.14に示す。

表 4.13　immdata.in ファイル

```
380        !ne_check
2.000000e-02, 2.000000e-01, 1.000000e-01, 1.000000e+00  !pipe 1, imzone 1:1
6.601000e+03
 .
2.000000e-02, 2.000000e-01, 1.000000e-01, 1.000000e+00  !pipe 380, imzone 1:1
6.601000e+03
```

表 4.14　immdata.in ファイルの変数一覧

	変数名	説明
1	niztypes_check	拡散領域の種類数
	loop *j* : 1 to niztypes_check	
2	porosity	間隙率
	perimeter,	湿潤辺
	max.diff.dist.	マトリクス拡散深さ
	tortuosity	屈曲率
	loop *k* : 1 to nspecies	
3	retardation factor	遅延係数
	end loop	

4.4 出力ファイル

(1) メインファイルltg.out

メインファイルltg.outを表 4.15に示す。

表 4.15 ltg.out ファイル

```
****************************************************************
*                                                              *
*                 Laplace Transform Galerkin                   *
*                            LTG                               *
*                       Version  2.00                          *
*                                                              *
****************************************************************


PAWORKS-LTG Simulation for Cs

Maximum number of nodes               =         399
Maximum number of elements            =         380
Maximum number of species             =           1
Maximum number of pipe-types          =         380
Maximum number of imm. zones per pipe =           1
Maximum number of BCs                 =           1
Maximum number of source nodes        =          19
Maximum number of BC times            =           2
Maximum number of output nodes        =         399
Maximum number of output times        =          61
Maximum number of discharge-windows   =           0

Detailed printout switch (logprt)     :           T
Cauchy flux-type boundary conditions
Maximum Peclet number                 :         2.0
```

(2) 時系列ファイル###.sum

フラックスおよび積算フラックスの時系列ファイル###.sumを表 4.16に示す。

表 4.16 sum ファイル

```
Species     Time       Outflux rate  Cum. Release
   1     1.00000E+01   1.41335E-12   7.29365E-12
   1     1.25890E+01   8.46392E-11   6.35699E-11
   1     1.58490E+01   3.19480E-09   3.15056E-09

   1     1.00000E+07   9.90905E-01   9.88805E+06
```

5. 逆解析プログラム LTGINV マニュアル

5.1 ファイル構成

逆解析のフローとファイル構成を図 5.1に，目的関数コンターとパラメータの収束履歴描画のフローとファイル構成を図 5.2に，逆解析のファイル一覧を表 5.1に示す。図には，LTG.DAT ファイルに規定されているパラメータを同定する場合のフローを示す。

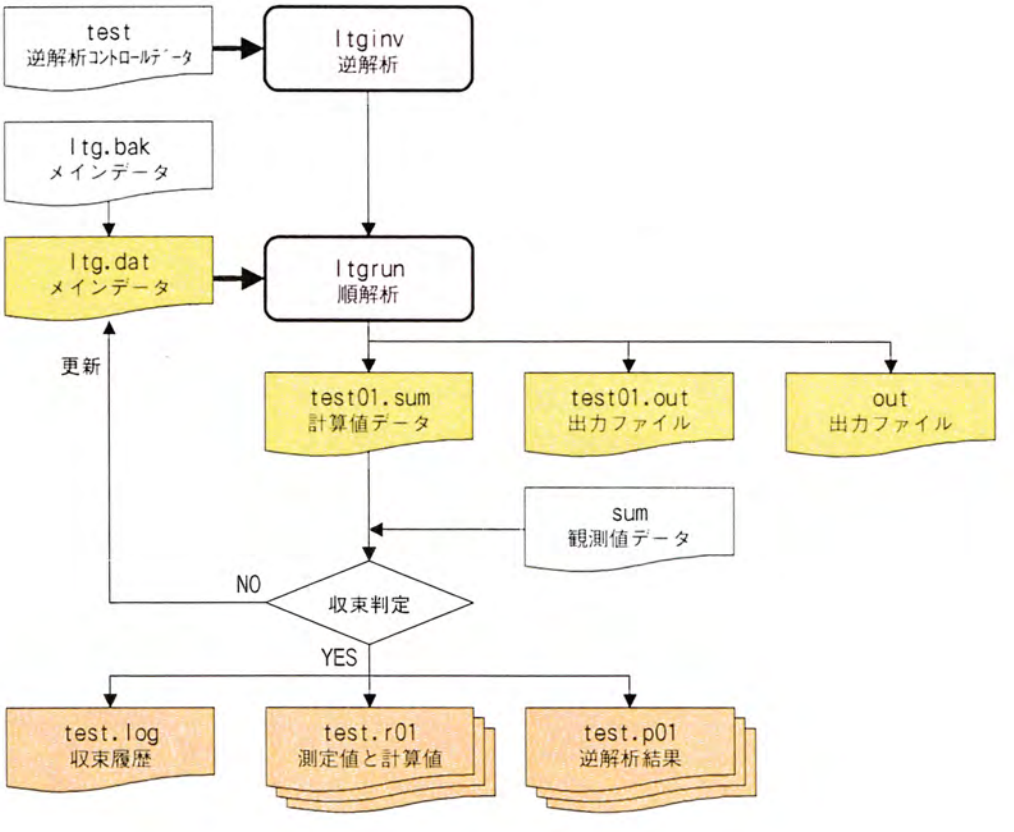


図 5.1　逆解析フローとファイル構成（LTG.DAT ファイルを更新する場合）
（赤：プログラム、青：必須入力ファイル、橙：解析結果ファイル、黄：その他出力ファイル）

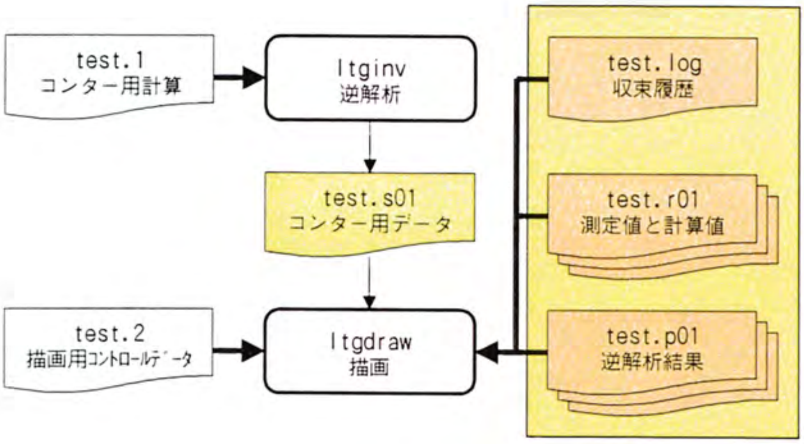


図 5.2　描画用ファイル構成

表 5.1　逆解析ファイル一覧

種　別	ファイル名	内　容
プログラム	ltgrun.exe	順解析プログラム LTG
	ltginv.exe	逆解析プログラム LTGINV
	ltgdraw.exe	描画用プログラム LTGDRAW
入力ファイル	test	逆解析コントロールデータファイル
（逆解析用）	ltg.bak	入力データファイル（逆解析で更新されない）
	ltg.dat	入力データファイル（逆解析で更新される）
	sum	観測値データファイル
（描画用）	test.1	目的関数コンター計算用コントロールデータファイル
	test.2	描画用コントロールデータファイル
出力ファイル	test01.sum	計算値データファイル
（ltg）	test01.out	LTG 出力ファイル
	out	LTG 出力ファイル
（ltginv）	test.log	収束履歴
	test.p##	結果（AIC 等，パラメータ推定値，感度マトリックス）
	test.r##	測定値および計算値データ
（ltginv；描画）	test.s01	目的関数コンター用データファイル

5.2 プログラムの実行

(1) 逆解析プログラムの実行

逆解析プログラムを実行するには，DOS 画面上で，

```
ltginv↵
test↵
```

とする。最後に 1 を付けた場合（**test 1**↵）は画面出力が“test.mes”ファイルへ出力される。

注意：最終的に作られる“ltg.dat”や“test01.sum”はヤコビアン行列を計算する際に作成されたものであり，最適推定値で計算されたファイルではない。

(2) 描画プログラムの実行

コンター図作成のための順解析を実行する。

```
ltginv↵
test.1↵
```

“test.s01”ファイルが作成され，以下の操作でコンター図が描画される。

```
ltgdraw↵
test.2↵
```

5.3 入力ファイル

(1) 逆解析コントロールデータファイル test

逆解析コントロールデータファイル test を表 5.2に，変数一覧を表 5.3に示す。

表 5.2 test ファイル

```
*datain  2         61                                            npara,ndata
'sum'              1       2       1                             nskip,jskip,nmod
'test01.sum'       1       2       1                             nskip,jskip,nmod
'LTGRUN > out'
'ltg.dat'          23      1       10      '(e10.3)'             velocity
'ltg.dat'          23      25      30      '(f5.2)'              dispersion length

         vary      nloop   eps1    eps2    eps3    nreset
*inverse 1.0e-5    20      1.0e-5  1.0e-3  1.0e-3  10
1.0      1         0.001   1000.   0.1     0.01                  para,id,pmin,pmax,varx,edv
1.0      0         0.01    1.0     0.1     0.01                  para,id,pmin,pmax,varx,edv

*end
```

表 5.3 test ファイルの変数一覧

行	変数名	説 明
1	*datain	
	npara	逆解析で同定するパラメータの数
	ndata	測定値データの数
2	'sum'	測定値データのファイル名
	nskip	最初にスキップする行数（図 4.2 参照）
	jskip	スキップするデータ数（図 4.2 参照）
	nmod	スキップする行数
3	'test01.sum'	計算値データのファイル名
4	'LTGRUN > out'	順解析 LTGRUN の実行と out への出力
	loop *i* : 1 to npara	
5	'ltg.dat'	入力ファイル名
	nline	逆解析で更新するパラメータの行数
	ncals	逆解析で更新するパラメータのカラム番号（始め）
	ncale	〃 （終わり）
	'(f10.3)'	書式
	end loop	
6	*inverse	最小二乗法コントロールデータ
	vary	観測値分散σ_c^2

	nloop	最大繰返し計算回数（式(3.39)参照）
	eps1	目的関数収束基準（=0 で nloop 回計算実施；式(3.40)参照）
	eps2	目的関数の変化収束基準（式(3.41)参照）
	eps3	重み λ の変化収束基準（分散未知の場合；式(3.44)参照）
	nreset	重み λ の更新計算回数
	loop *j* : 1 to npara	
7	para(j)	パラメータ初期値
	id	=0：通常，=1：対数
	pmin	下限値
	pmax	上限値
	varx(j)	パラメータ分散
	edv	数値微分における振れ幅（初期値＋振れ幅）
	end loop	
8	*end	

jskip (=3)

Species	Time	Outflux rate	Cum. Release	
1	1.58490E+00	-6.04646E-50	-6.04646E-50	
2	1.58490E+00	-6.04646E-50	-6.04646E-50	nskip (=4)
3	1.58490E+00	-6.04646E-50	-6.04646E-50	
4	1.58490E+00	-6.04646E-50	$\boxed{-6.04646E-50}$	
5	1.58490E+00	-6.04646E-50	-6.04646E-50	
6	1.58490E+00	-6.04646E-50	-6.04646E-50	
7	1.58490E+00	-6.04646E-50	-6.04646E-50	
8	1.58490E+00	-6.04646E-50	-6.04646E-50	
1	2.51190E+00	-2.63768E-49	-2.63768E-49	nmod (=8)
2	2.51190E+00	-2.63768E-49	-2.63768E-49	
3	2.51190E+00	-2.63768E-49	-2.63768E-49	
4	2.51190E+00	-2.63768E-49	$\boxed{-2.63768E-49}$	
5	2.51190E+00	-2.63768E-49	-2.63768E-49	
6	2.51190E+00	-2.63768E-49	-2.63768E-49	
7	2.51190E+00	-2.63768E-49	-2.63768E-49	
8	2.51190E+00	-2.63768E-49	-2.63768E-49	nmod (=8)
1	3.98110E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	
2	3.98110E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	
3	3.98110E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	
4	3.98110E+00	0.00000E+00	$\boxed{0.00000E+00}$	
5	3.98110E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	
6	3.98110E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	
7	3.98110E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	
8	3.98110E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	

図 5.3　測定値および計算値ファイルからのデータ読込み

5.4 出力ファイル

(1) 残差情報ファイル test. log

繰返し計算回数，残差，最大残差の値を出力する。

分散が既知の場合は，重み I が収束するまで繰返し計算が実施されるため，作成された test.p##ファイルや test.r##ファイルの最大数字ではなく，test.log ファイルに示された最大繰返し回数に相当する test.p##ファイルや test.r##ファイルが最終結果に相当する。

表 5.4　test. log ファイル

```
ncal  =   1 , sumj =  6.85643E+06 , delj =  6.85643E+06
ncal  =   2 , sumj =  2.83926E+06 , delj =  4.01717E+06
ncal  =   3 , sumj =  2.31347E+05 , delj =  2.60791E+06
ncal  =   4 , sumj =  1.09336E+05 , delj =  1.22012E+05
ncal  =   5 , sumj =  6.97838E+03 , delj =  1.02357E+05
ncal  =   6 , sumj =  2.11334E+00 , delj =  6.97627E+03
ncal  =   7 , sumj =  2.11379E+00 , delj =  4.54456E-04
```

表 5.5　test. log ファイルの変数一覧

行	変数名	説　明
	loop *i* : 1 to ncal	
1	ncal	繰返し計算回数
	sumj	残差二乗和 $\dfrac{\sqrt{\{\bar{c}-c(\theta)\}^2}}{n_c}$
	delj	最大残差 $\lvert\bar{c}-c(\theta)\rvert$
	end loop	

(2) 結果出力ファイル test.p##

残差情報，情報量基準値，同定値，分散値など結果情報を出力する。

表 5.6 test.p##ファイル

```
          2   npara
         61   ndata
1.00000E-06   vary
2.00000E+00   sump
1.13792E-01   sumy
2.11379E+00   sumj
-8.40847E+02  sums
-8.36847E+02  aic
-8.32625E+02  bic
-8.35192E+02  arma
-8.05364E+02  dmfm

9.99906E+00   1  1.00000E-03  1.00000E+03  9.99918E-01  9.99959E-01
1.01517E-01   0  1.00000E-02  1.00000E+00  8.07271E-01 -8.98483E-01

 1.41655E-07 -1.30454E-07
-1.30454E-07  3.79187E-07

 1.03334E+07  3.55507E+06
 3.55507E+06  3.86030E+06
```

表 5.7 test.p##ファイルの変数一覧

行	変数名	説　明
1	npara	同定パラメータ数
2	ndata	データ数
3	vary	観測値の分散
4	sump	パラメータの残差 J_p（式 3.14 参照）
5	sumy	観測値の残差 J_c（式 3.14 参照）
6	sumj	パラメータの残差 $J=J_c+J_p$（式 3.16 参照）
7	sums	パラメータの残差 S_2（式 3.18 参照）
8	aic	赤池の情報量基準
9	bic	〃
10	arma	ARMA（自己回帰移動平均）基準
11	dmfm	修正 Kashyap 基準
	loop *i* : 1 to npara	
10	pest	パラメータ最適推定値
	id	=0：実数，=1：対数
	pmin	パラメータ下限値
	pmax	パラメータ上限値
	varx	パラメータ分散値

	diff	事前推定値との差（実数は実数，対数は対数で表示）
	end loop	
	loop *i* : 1 to ndata	
11	covar (j=1 to npara)	パラメータ推定値の共分散行列式(3.47),(3.48),(3.50),(3.51)
	end loop	
	loop *i* : 1 to ndata	
12	invcovar(j=1 to npara)	パラメータ推定値の共分散行列式(3.47),(3.48),(3.50),(3.51)の逆行列
	end loop	

(3) 計算値出力ファイル test.r##

時間ごとの観測値，計算値および（観測値－計算値）を出力する。

表 5.8 test.r##ファイル

```
61
 1 -5.42882E-05 -5.41794E-05 -1.08800E-07
 2 -5.91216E-05 -5.90103E-05 -1.11300E-07
 3 -6.39476E-05 -6.38361E-05 -1.11500E-07

60  9.24201E-01  9.24200E-01  1.00000E-06
61  9.24224E-01  9.24224E-01  0.00000E+00
```

表 5.9 test.r##ファイルの変数一覧

行	変数名	説　明
1	ndata	データ数
	loop *i* : 1 to ncal	
2	ncal	繰返し計算回数
	rms	残差二乗和 $\dfrac{\sqrt{\{\bar{c}-c(\theta)\}^2}}{n_c}$
	rmax	最大残差 $\left\|\bar{c}-c(\theta)\right\|$
	end loop	

5.5 描画プログラム用入力ファイル

(1) 目的関数コンター用データ作成ファイル test.1

目的関数コンター用のデータファイル作成のための計算を実施する。

表 5.10 test.1 ファイル

```
*datain  2       61                                        npara,ndata
'sum'            1      3      1                           nskip,jskip,nmod
'test01.sum'     1      3      1                           nskip,jskip,nmod
'LTGRUN > out'
'ltg.dat' 23     1      10     '(e10.3)'                   velocity
'ltg.dat' 23     25     30     '(f5.2)'                    dispersion length

*scalc   1       20     1      1                           nsta,nend,ids,mode
1        0       10                                        locx,idx,ndivx
2        0       10                                        locy,idy,ndivy
*end
```

表 5.11 test.1 ファイルの変数一覧

行	変数名	説　明
1-5		test ファイルと同じ
	loop *j* : 1 to npara	コンター表示したいパラメータの組合せの数だけ繰返し
6	*scalc	
	nsta	コンター上にプロットしたい繰返し計算の開始回数
	nend	〃　収束回数
	ids	コンターの残差=1：対数
	mode	=0：, =1：最大値・最小値の範囲を計算
7	locx	x 軸のパラメータ番号
	idx	(現在，使用していない)
	ndivx	(2×ndivx) 分割
8	locy	y 軸のパラメータ番号
	idy	(現在，使用していない)
	ndivy	(2×ndivy) 分割
	end loop	
9	*end	

(2)　収束履歴の描画用コントロールデータファイル test.2

目的関数コンター図中に逆解析における収束履歴を描画する。

表 5.12　test.2 ファイル

*sdraw	1	-999	999	-999	999	0.05	3.0e3
*sdraw	1	-999	999	-999	999	0.01	3.0e3
*sdraw	1	-999	999	-999	999	0.005	3.0e3

表 5.13　test.2 ファイルの変数一覧

行	変数名	説　明
	loop *j* : 1 to npara	
1-5	*sdraw	
	ncalc	ファイル番号（scalc の順番）
	nstax	コンター描画範囲指定；x 軸開始分割点数
	nendx	〃　；x 軸終了　〃
	nstay	〃　；y 軸開始　〃
	nendy	〃　；y 軸終了　〃
	alpa	F 分布の α
	fact	楕円を fact 倍拡大して描画
	end loop	

6. 逆解析プログラムの検証解析

6.1 問題の設定

6.1.1 解析モデル

開発した逆解析プログラムのパフォーマンスを確認するための検証解析を実施する。検証解析では，図 6.1に示すような孔間トレーサ試験を想定し，表 6.1および図 6.2に示すように 3 種類のモデルを用いた順解析により観測値を作成し，作成した観測値をもとに逆解析によりパラメータ値を同定する。

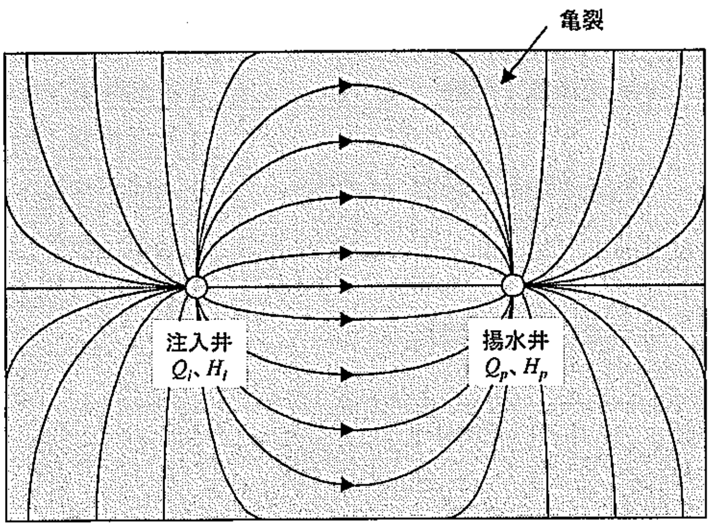


図 6.1 孔間トレーサ試験模式図

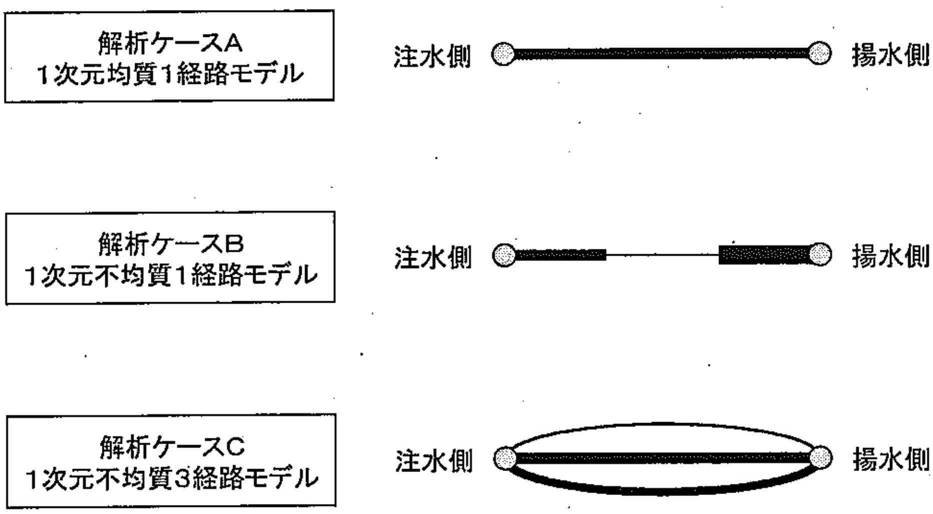


図 6.2 解析ケースとモデルの模式図

表 6.1 解析ケースとモデルの一覧

解析ケース	観測値（順解析モデル）	計算値（逆解析モデル）
A	1 次元均質 1 経路	1 次元均質 1 経路
B	1 次元不均質 1 経路（3 要素）	1 次元均質 1 経路
		1 次元不均質 1 経路（2 要素）
		〃　（3 要素）
C	1 次元不均質 3 経路	1 次元不均質 1 経路
		〃　2 経路
		〃　3 経路

6.1.2 同定パラメータ

核種移行解析に必要な入力パラメータ（表 6.2参照）のうち，逆解析により同定するパラメータは，以下のように設定する。

- 亀裂の幾何学的形状を表すチャンネル本数および長さは，既知のモデル化パラメータとして情報量基準による最適モデルの選定の対象とし，逆解析の同定パラメータとしない。
- 亀裂の幾何学的形状を表す断面積† [亀裂幅×開口幅] は，流速とともに割れ目の核種移行遅延性能を規定するとともに，複数経路の場合には各経路への入力ソースの配分量を規定するため，同定パラメータとして取り扱うこととする。
- 亀裂内の（実）流速は，移流に係わる重要なパラメータであるため，優先的に同定するパラメータとする。
- 亀裂表面への遅延係数は保守的に無視して常に 1.0 とし，岩石基質内での岩石鉱物への遅延係数は未知パラメータとして同定の対象とする。

表 6.2 同定パラメーター覧

パラメータ	同定対象	備　考
移行経路長	×	情報量基準によるモデル選定の対象とする
流速	○	移流パラメータとして優先的に同定する。
断面積 （＝亀裂幅×開口幅）	○	
分散長	○	移行経路の 1/10 倍を初期値とし，移行経路長に応じて 1/100～1/1 倍に制限する
拡散係数	○	
有効間隙率	○	上限値は 0.01～0.5 の範囲に設定
湿潤辺長	○	
マトリクス拡散深さ	○	
屈曲率	×	1.0 に固定
遅延係数（亀裂表面）	○	通常は保守的に無視して 1.0
遅延係数（岩石鉱物）	○	

† 断面積は，本来，水頭と流量から水理逆解析により同定されるパラメータであるが，水理学的開口幅（水理上の流速）と物質移行開口幅（実流速）が一致しないこと，亀裂内の流れが放射状流でしかも不均質であることなどから，水理と核種移行の逆解析から求められた断面積は整合性をとることができない。

6.1.3 入力データ

孔間トレーサ試験の注水孔と揚水孔の孔間距離は 1.0m とし，第 2 次取りまとめのレファレンスケースで用いた値からパラメータ値を設定する。すなわち，分散長は移行距離の 1/10倍である 0.1m とし，マトリクス拡散深さは 0.1m とし，亀裂表面での収着は保守的に無視して亀裂表面での遅延係数は 1.0 とする。対象岩種は花崗岩として，自由水中の拡散係数と岩石基質における遅延係数は，実効拡散係数を $3\times10^{-12}m^2/s$，間隙率を 0.02，乾燥密度を $2,640kg/m^3$，Cs-135 の花崗岩に対する分配係数を 0.05 としてそれぞれ以下のように求められる。また，亀裂内の流速および亀裂の断面積は，解析ケースごとに設定する。検証解析に用いるパラメータ値の一覧を表 6.3に，分散値や収束基準値を表 6.4に示す。

$$D_0 = \frac{\tau^2 D_e}{\vartheta} = \frac{1^2 \times 3\times10^{-12}(m^2/s)\times 31536000}{0.02} = 4.73\times10^{-3}(m^2/y) \quad (6.1)$$

$$R_d = 1+\frac{\rho\cdot K_d}{\theta} = 1+\frac{2640\times0.05}{0.02} = 6601 \quad (6.2)$$

表 6.3 パラメータ値一覧

パラメータ	記号／単位	初期値	変動範囲
移行経路長	L [m]	1.0	固定
断面積	A [m²]	—	固定
流速	q [m/y]	—	10^{-3}～10^{3}
分散長	α [m]	0.1	0.01～1.0
拡散係数	D_0 [m²/y]	4.73×10^{-3}	10^{-5}～10^{-1}
間隙率	ρ [-]	0.02	0.001～0.5
湿潤辺長	[m]	0.2	
ﾏﾄﾘｸｽ拡散深さ	d [m]	0.1	0.01～10
遅延係数（亀裂表面）	Ka [-]	1.0	固定
遅延係数（岩石基質）	Kd [-]	6.601×10^{3}	10^{1}～10^{5}
屈曲率	τ [-]	1.0	固定

表 6.4 分散値および収束基準値データ

パラメータ	設定値
観測値分散（既知の場合）	10^{-5}
パラメータ分散（既知の場合）	0.1
目的関数収束基準	10^{-5}
目的関数の変化収束基準	10^{-3}
重み λ の変化収束基準	10^{-3}

6.2　解析ケースA（1次元均質1経路モデル）

1次元の均質な移行経路1本（図 6.3参照）の順解析により得られた濃度破過曲線を観測値として逆解析によりパラメータを同定する。

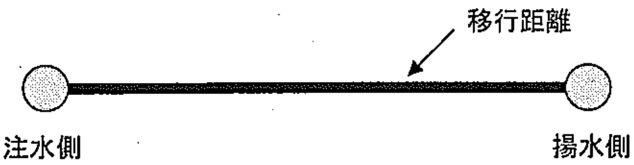


図 6.3　1次元均質1経路モデル

6.2.1　観測値の計算

亀裂内の流速は 10m/y と設定した。これは，次式に示すように，亀裂の透水量係数を 10^{-8}m²/s，動水勾配を 0.001 とした場合（亀裂内流速約 16m/y）にほぼ相当する。

$$q = K \cdot i = \frac{T}{2b} \cdot i = \frac{\sqrt{T}}{2} \cdot i = \frac{\sqrt{10^{-8}}}{2} \cdot 10^{-2} = 5 \times 10^{-7} (m/s) = 16 (m/y) \qquad (6.3)$$

表 6.5に示すパラメータ値を用いて得られた濃度破過曲線観測値を図 6.4に示す。

表 6.5　解析ケースAパラメーター覧

パラメータ	記号／単位	初期値
移行経路長	L [m]	1.0
断面積	A [m^2]	10^{-6}
流速	q [m/y]	10.0
分散長	α [m]	0.1
拡散係数	D_0 [m^2/y]	4.73×10^{-3}
間隙率	ρ [-]	0.02
湿潤辺長	[m]	0.2
ﾏﾄﾘｸｽ拡散深さ	d [m]	0.1
遅延係数（亀裂表面）	Ka [-]	1.0
遅延係数（岩石基質）	Kd [-]	6.601×10^{3}
屈曲率	τ [-]	1.0

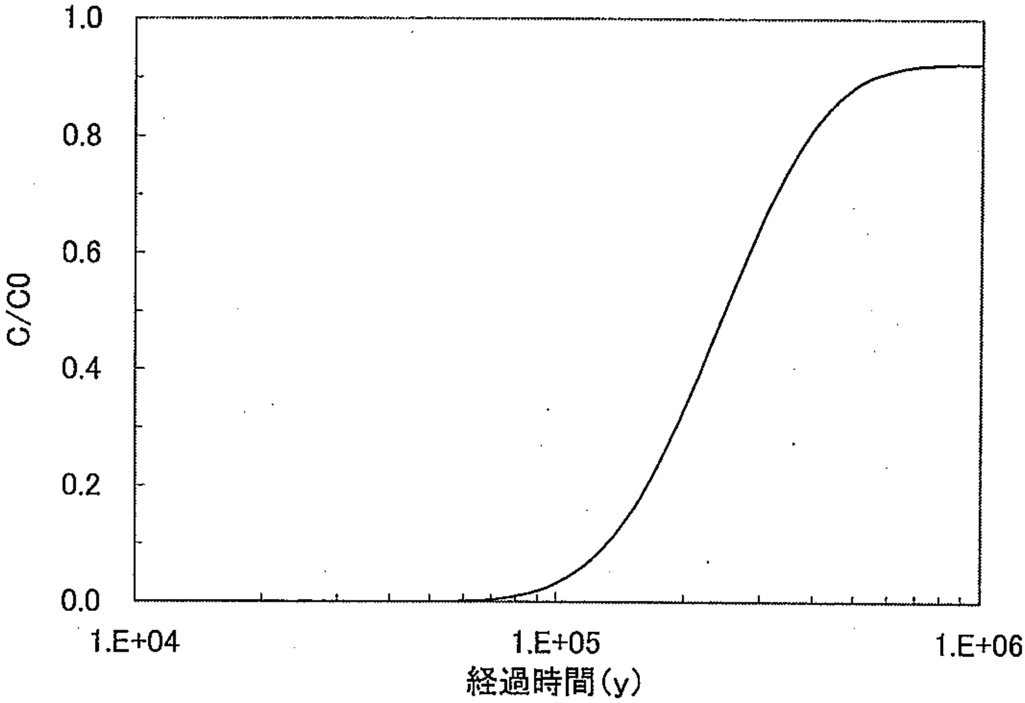


図 6.4　解析ケースAの濃度破過曲線観測値

6.2.2 逆解析

解析ケースの一覧を表 6.6に示し，各解析ケースで設定した初期値および上下限値，逆解析により得られた同定値を表 6.7に示す。このうちケース A1～A4 は初期値依存性を調べるために図 6.5のように初期値を設定した。

各解析ケースで同定されたパラメータ値を用いた濃度破過曲線計算値を観測値と併せて図 6.6に示し，残差二乗和と情報量基準を図 6.7に，各解析ケースのパラメータの収束履歴を目的関数のコンター上にプロットした図を図 6.8に示す。これらの結果より，以下のような知見が得られる。

- ケース A2，A5，A12 の同定精度は若干悪いものの，どのケースも比較的精度よく同定されている。
- ケース A1～A4 のうち A2 の同定精度が若干低いことから，同定精度は初期値に依存することがわかる。
- ケース A4 と A5 より，分散が既知の場合（分散値 0.1）と分散が未知の場合の結果にはほとんど差異は認められない。
- ケース A6 より流速と断面積の組合せは無数にあるため，解が不定となり唯一の解を求めることはできない。
- ケース A4 と A12 より，パラメータ数が増加するほど同定制度が若干低下する傾向が見られる。

表 6.6 解析ケース一覧

パラメータ	正解	解析ケース											
		A1	A2	A3	A4	A5	A6	A7	A8	A9	A10	A11	A12
移行経路長	1.0												
断面積	10^{-6}						○						
流速	10.0	○	○	○	○	○	○	○	○				○
分散長	0.1	○	○	○	○	○					○		○
拡散係数	4.73×10^{-3}									○	○	○	○
間隙率	0.02							○					
湿潤辺長	0.2											○	
ﾏﾄﾘｸｽ拡散深さ	0.1								○				
遅延係数/亀裂	1.0												
遅延係数/岩石	6.601×10^{3}									○			
分散既知		○	○	○	○	×	○	○	○	○	○	○	○

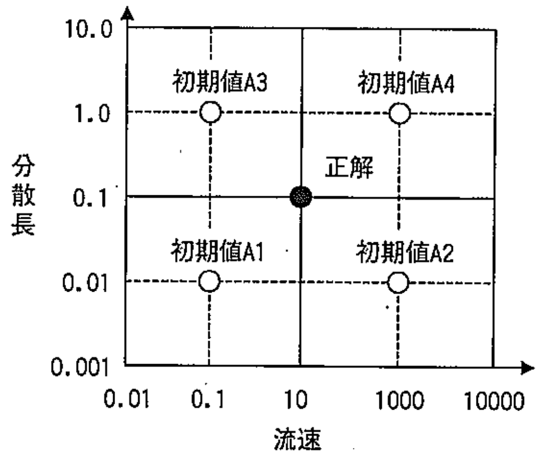
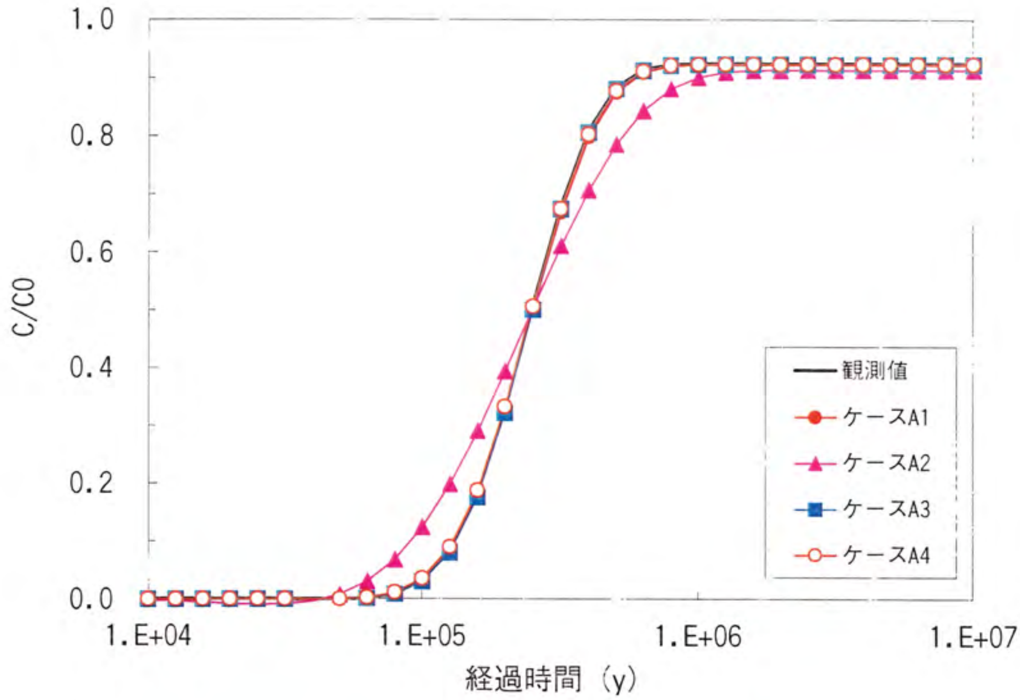


図 6.5 初期値依存性解析における初期値設定値

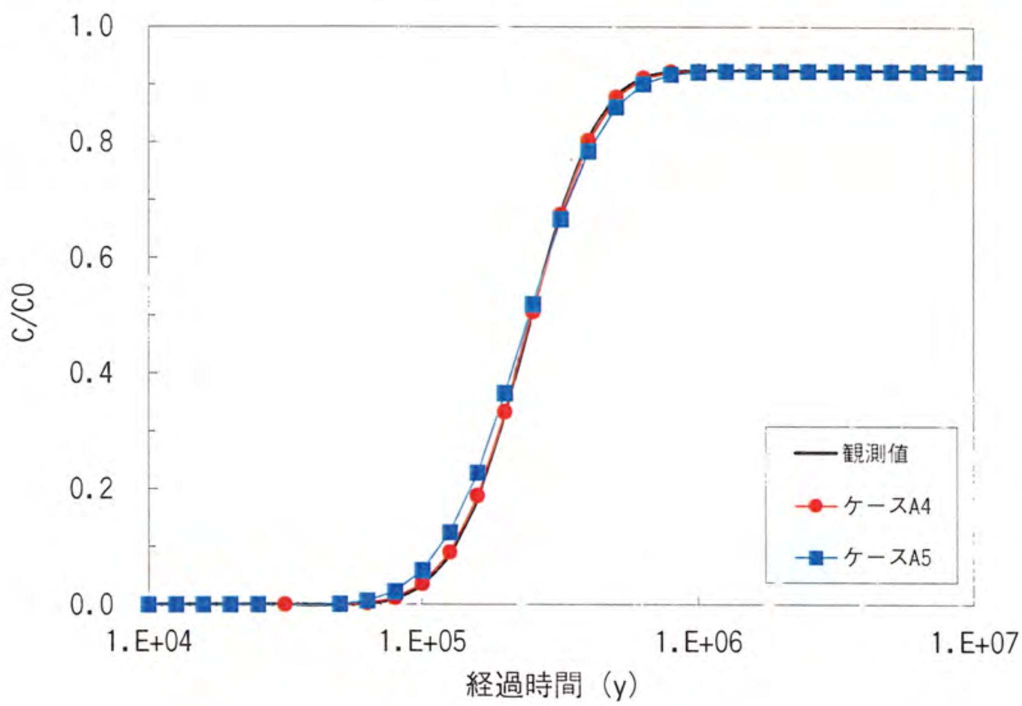
表 6.7 初期値，上下限値，同定値

ケース		初期値	下限値	上限値	正解値	同定値	誤差比*
A1	流速	1.0	0.1	10^3	10.0	9.85	0.01
	分散長	10^{-2}	10^{-3}	10	0.1	0.11	0.08
A2	流速	10^2	0.1	10^3	10.0	8.64	0.14
	分散長	10^{-2}	10^{-3}	10	0.1	0.49	3.91
A3	流速	1.0	0.1	10^3	10.0	9.91	0.01
	分散長	1.0	10^{-3}	10	0.1	0.10	0.02
A4	流速	10^2	0.1	10^3	10.0	9.92	0.01
	分散長	1.0	10^{-3}	10	0.1	0.11	0.05
A5	流速	10^2	0.1	10^3	10.0	9.83	0.02
	分散長	1.0	10^{-3}	10	0.1	0.16	0.59
A6	流速	10^2	0.1	10^3	10.0	7.93	0.21
	断面積	10^{-5}	10^{-8}	10^{-4}	10^{-6}	1.26×10^{-6}	0.26
A7	流速	10^2	0.1	10^3	10.0	49.9	3.99
	間隙率	0.1	0.01	0.5	0.02	0.10	4.00
A8	流速	10^2	0.1	10^3	10.0	10.7	0.07
	ﾏﾄﾘｸｽ深さ	1.0	0.01	10.0	0.1	0.11	0.05
A9	拡散係数	10^{-2}	10^{-4}	0.1	4.73×10^{-3}	4.85×10^{-3}	0.02
	遅延係数	10^{-2}	10^{-4}	0.1	6.601×10^3	0.20	1.00
A10	分散長	10^{-2}	10^{-3}	1.0	0.1	0.10	0.00
	拡散係数	10^{-2}	10^{-4}	0.1	4.73×10^{-3}	4.66×10^{-3}	0.01
A11	拡散係数	10^{-2}	10^{-4}	0.1	4.73×10^{-3}	4.85×10^{-3}	0.02
	湿潤辺長	0.05	0.01	1.0	0.2	0.20	0.01
A12	流速	10^2	0.1	10^3	10.0	9.80	0.02
	分散長	1.0	10^{-3}	10	0.1	0.18	0.76
	拡散係数	10^{-2}	10^{-4}	0.1	4.73×10^{-3}	7.81×10^{-3}	0.65

* 誤差比＝｜正解値－同定値｜／正解値

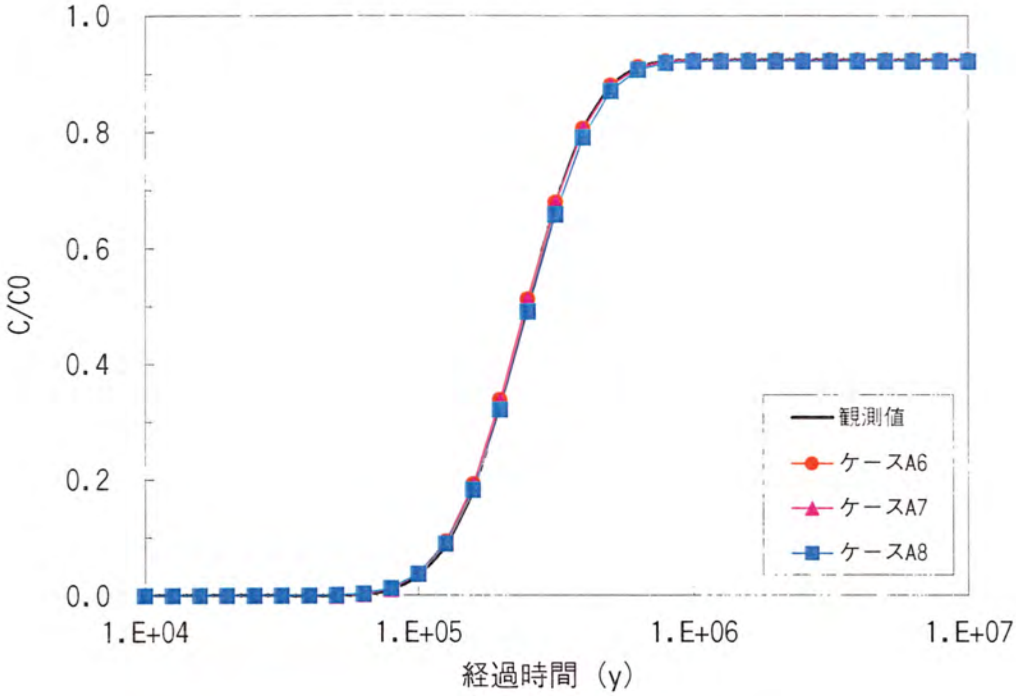


(a)　ケース A1～A4

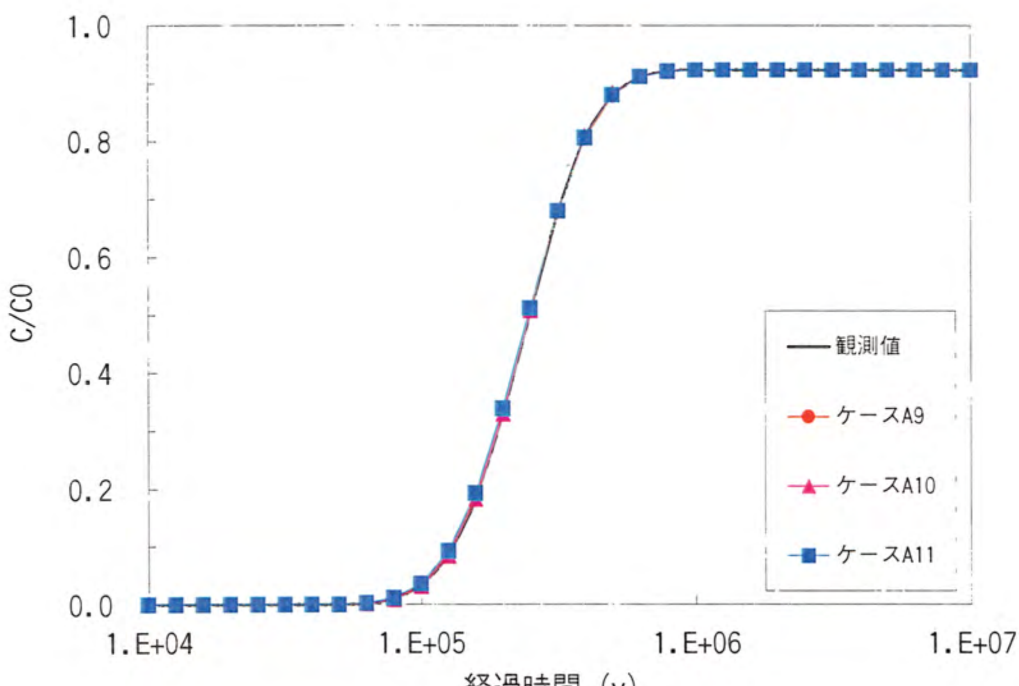


(b)　ケース A4～A5

図 6.6　濃度破過曲線（その１）

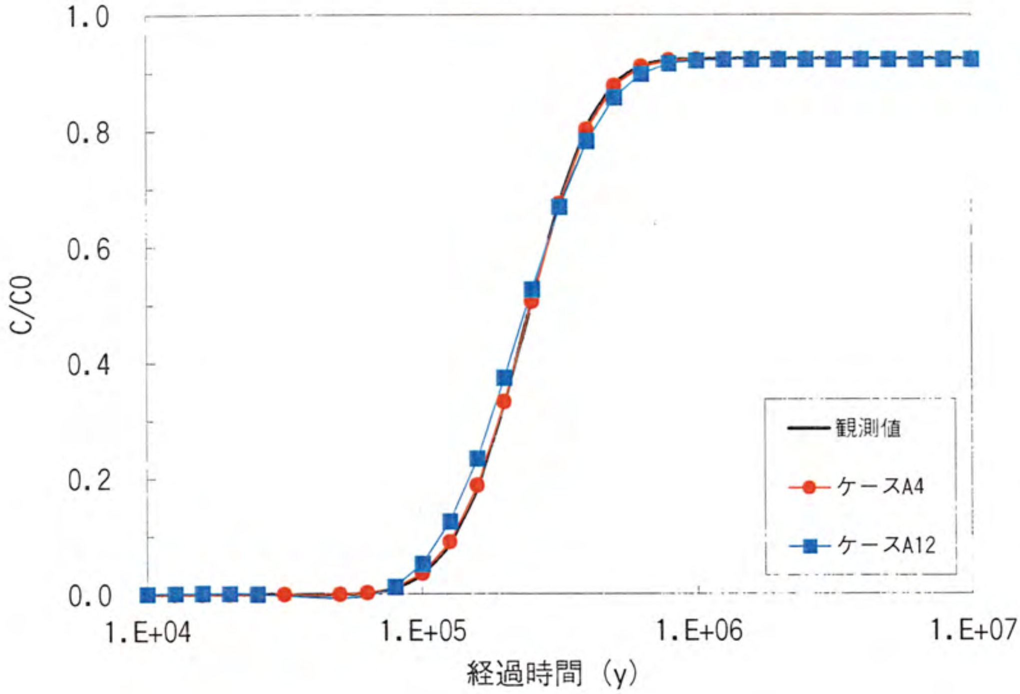


(c)　ケース A6～A8



(d)　ケース A9～A11

図 6.6　濃度破過曲線（その２）



(e)　ケース A4，A12

図 6.6　濃度破過曲線（解析ケース A）

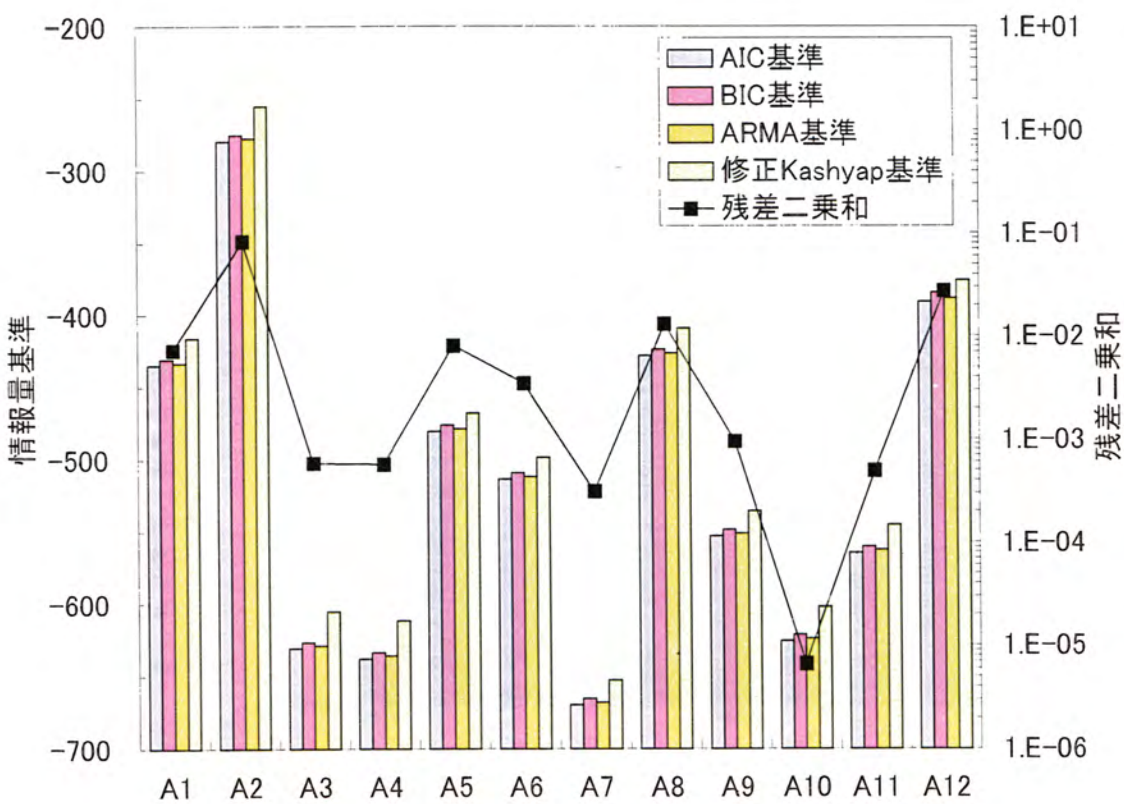
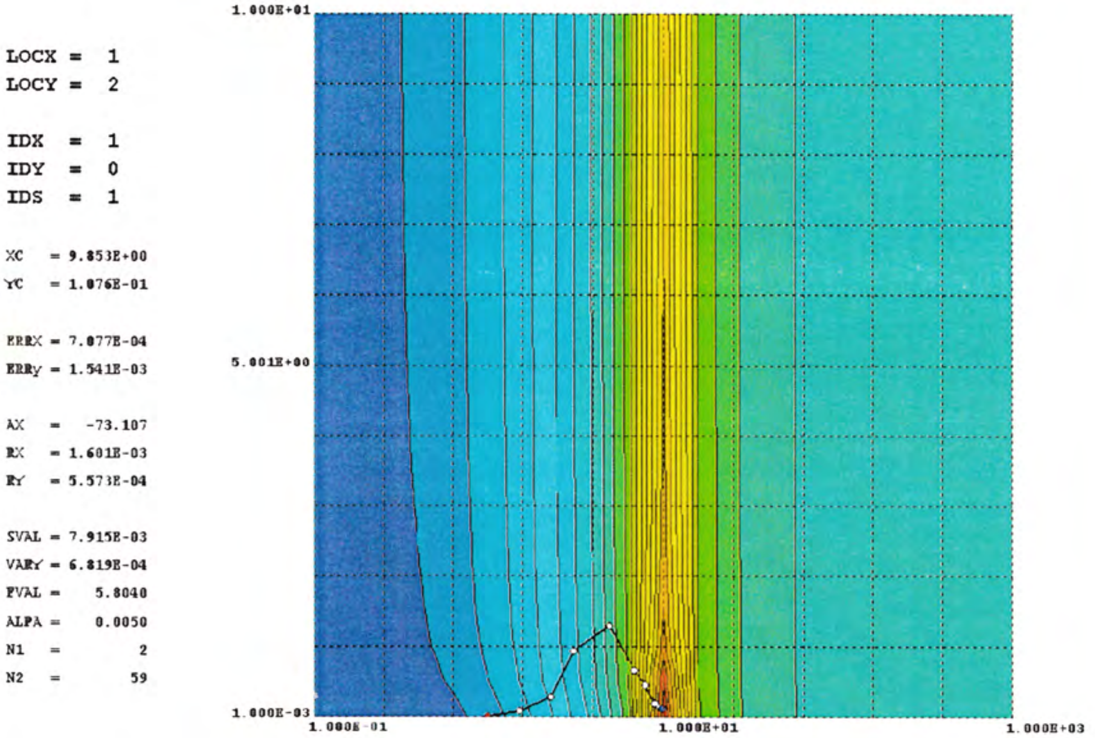
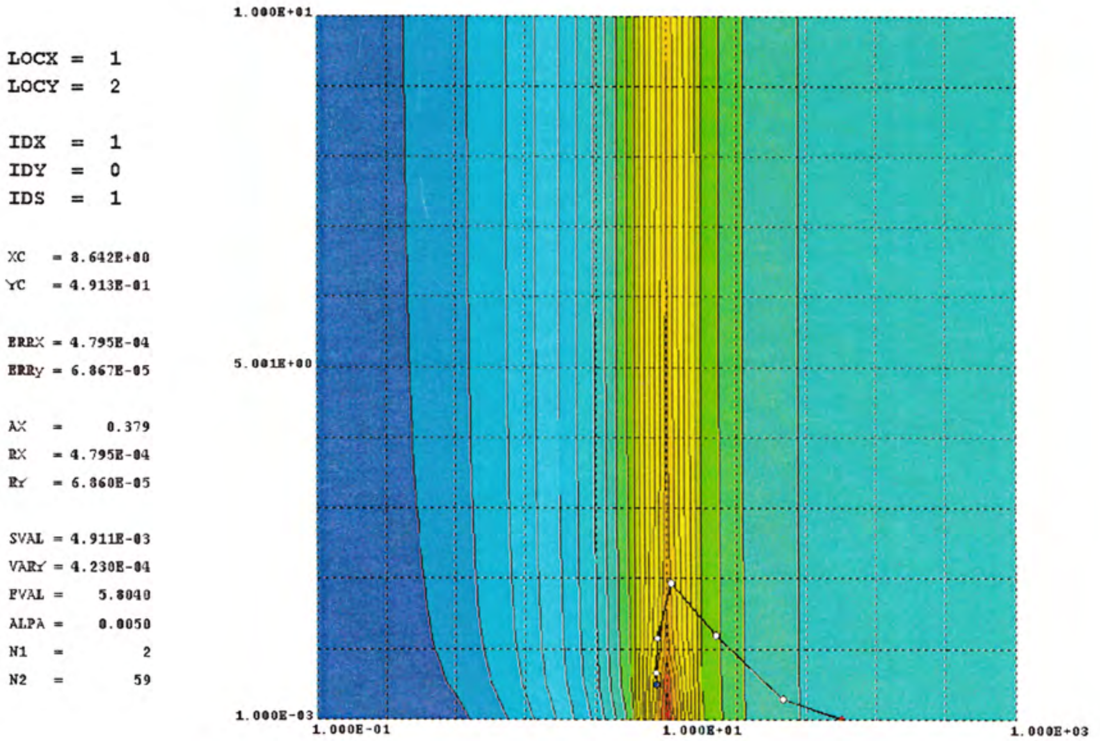


図 6.7　残差二乗和と情報量基準（解析ケース A）

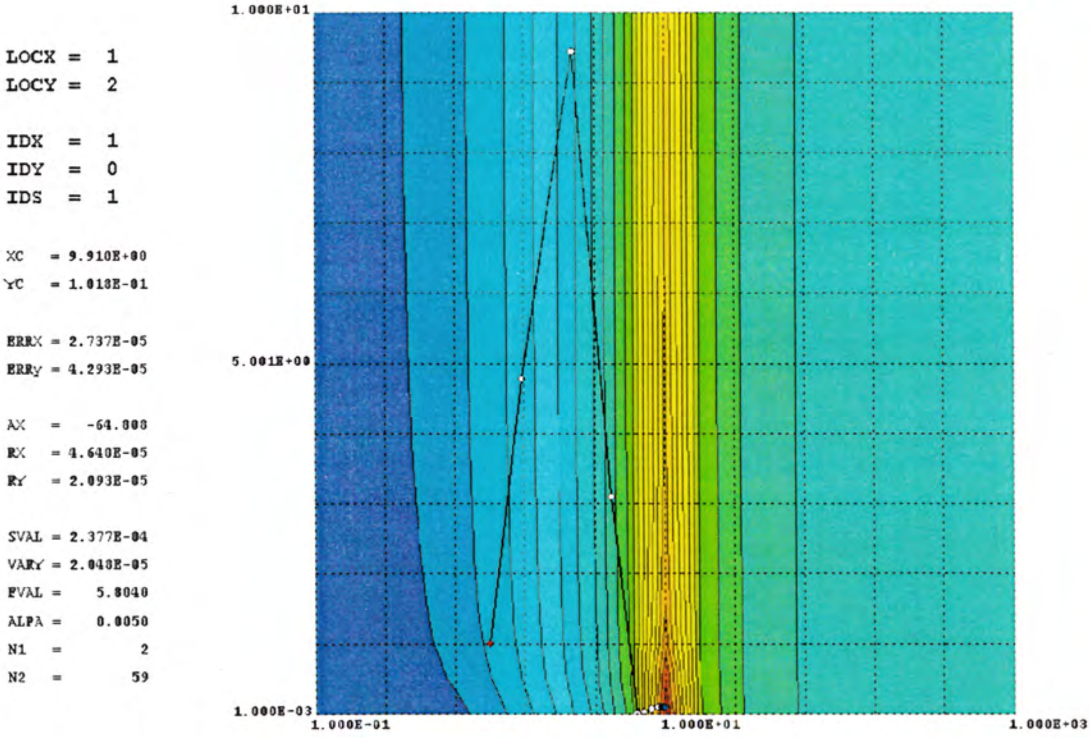


(a) ケース A1（x 軸：流速，y 軸：分散長，正解は(10, 0.1)）

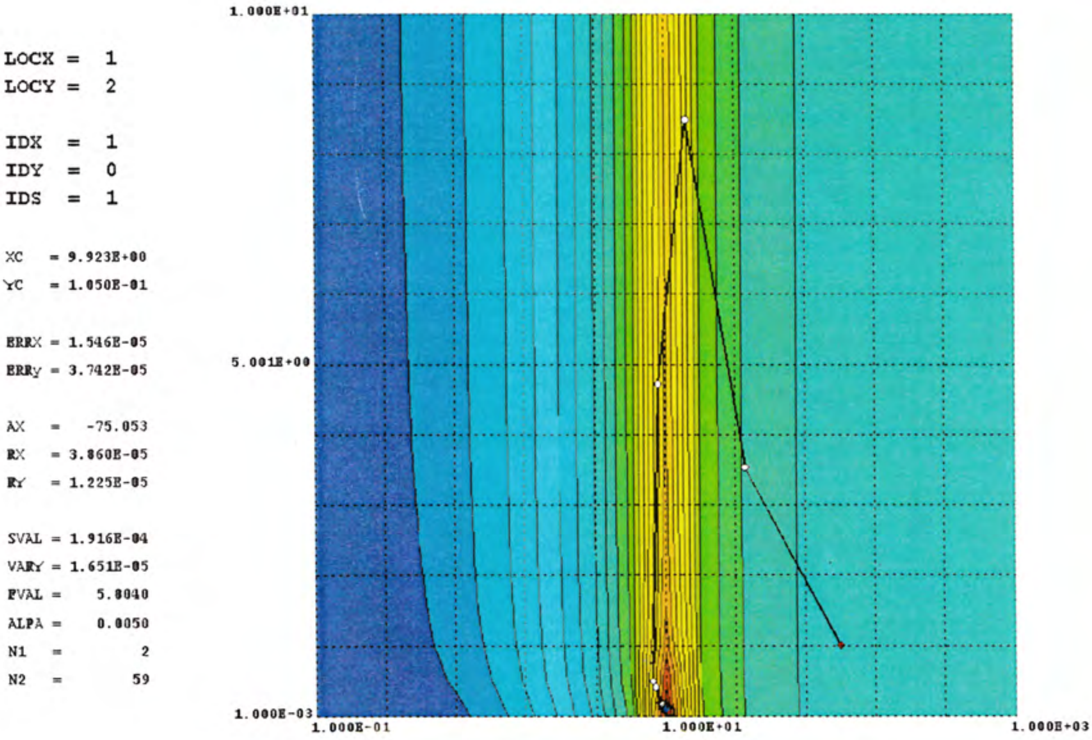


(b) ケース A2（x 軸：流速，y 軸：分散長，正解は(10, 0.1)）

図 6.8 目的関数コンターおよび収束履歴

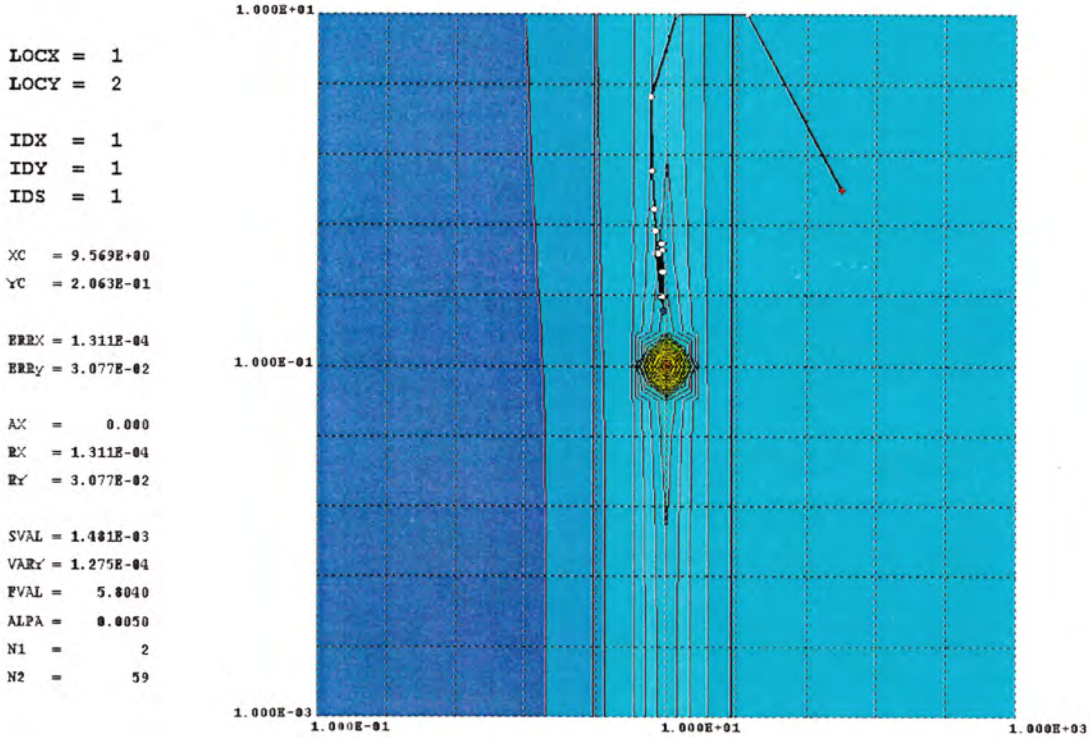


(c)　ケース A3（x 軸：流速，y 軸：分散長，正解は(10, 0.1)）

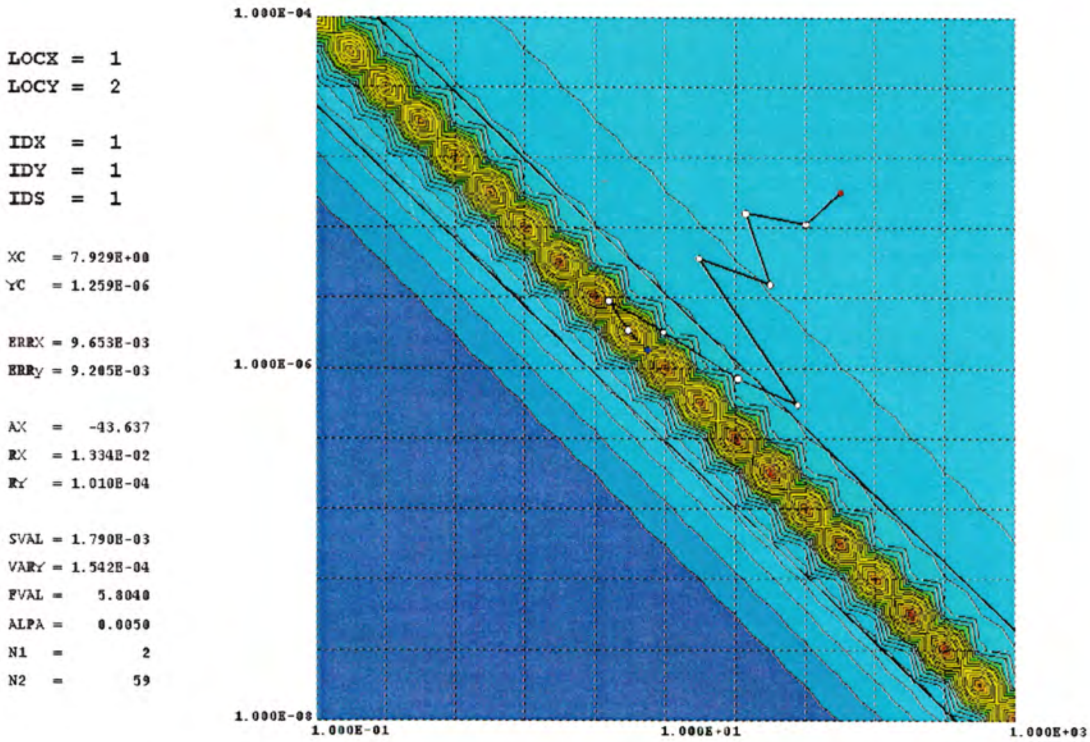


(d)　ケース A4（x 軸：流速，y 軸：分散長，正解は(10, 0.1)）

図 6.8　目的関数コンターおよび収束履歴

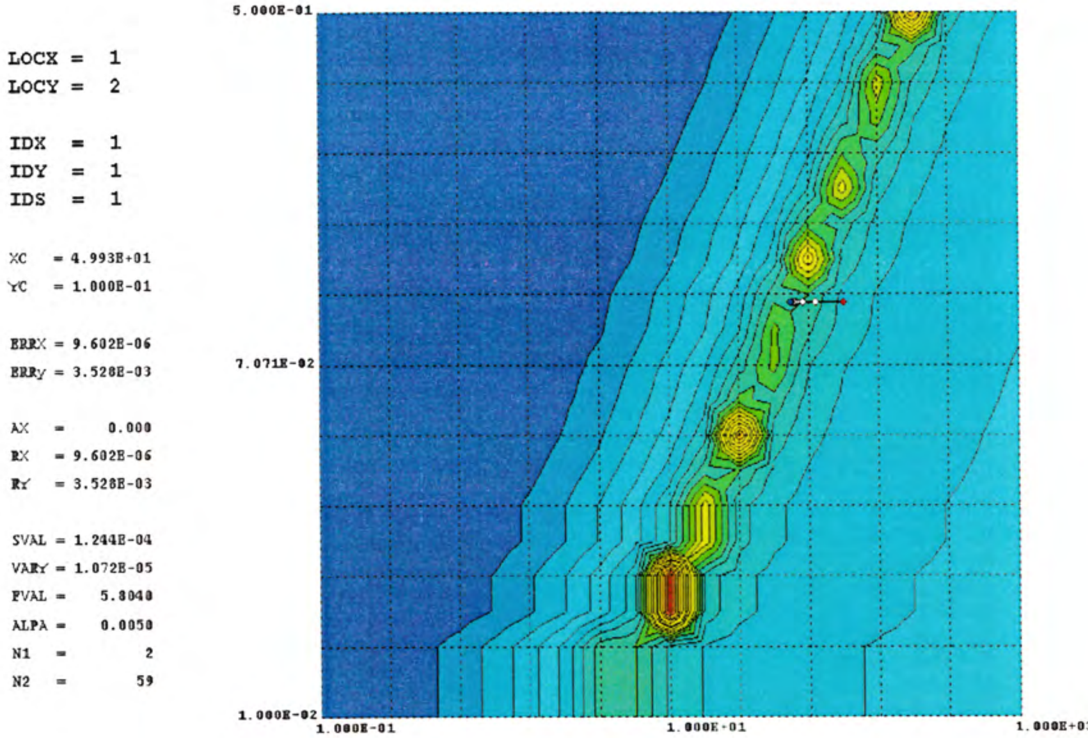


(e)　ケース A5（x 軸：流速，y 軸：分散長【分散未知の場合】，正解は(10, 0.1)）

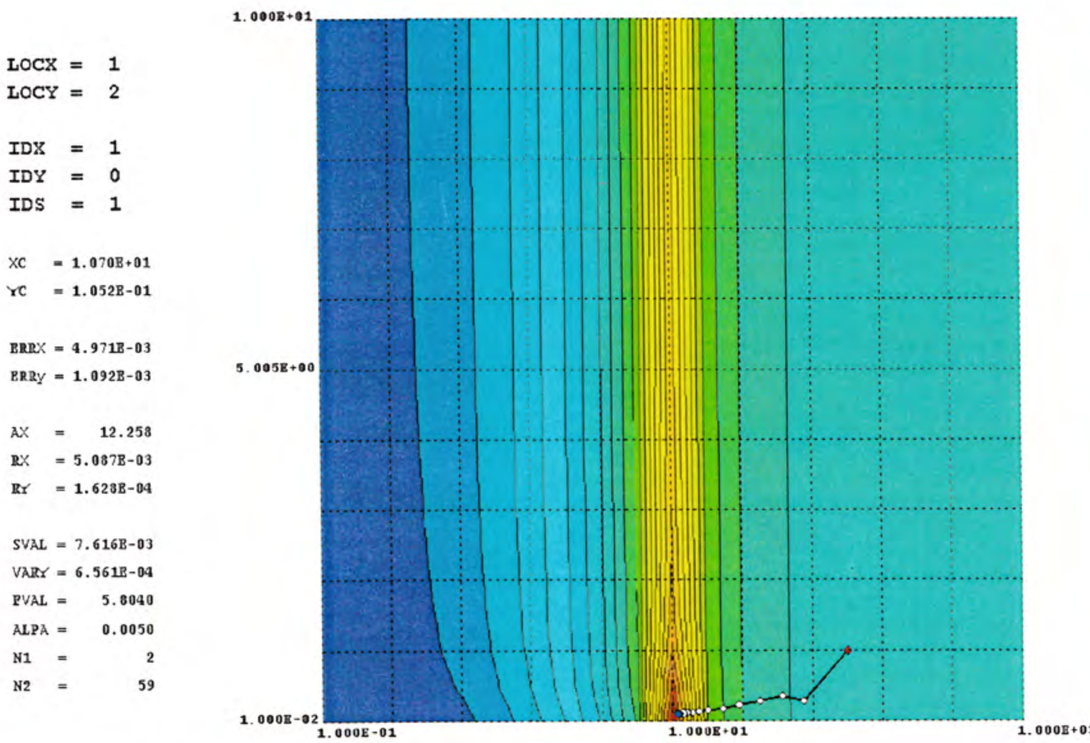


(f)　ケース A6（x 軸：流速，y 軸：断面積，正解は(10, 10^{-6})）

図 6.8　目的関数コンターおよび収束履歴

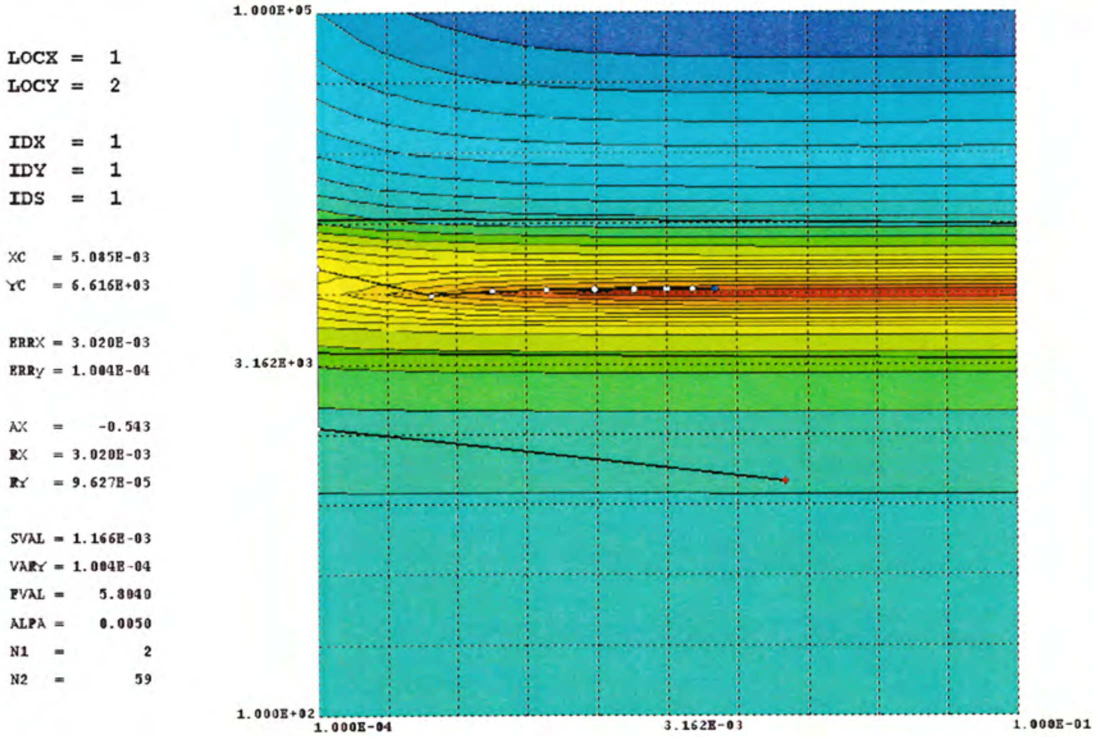


(g)　ケース A7（x 軸：流速，y 軸：間隙率，正解は(10, 0.02)）

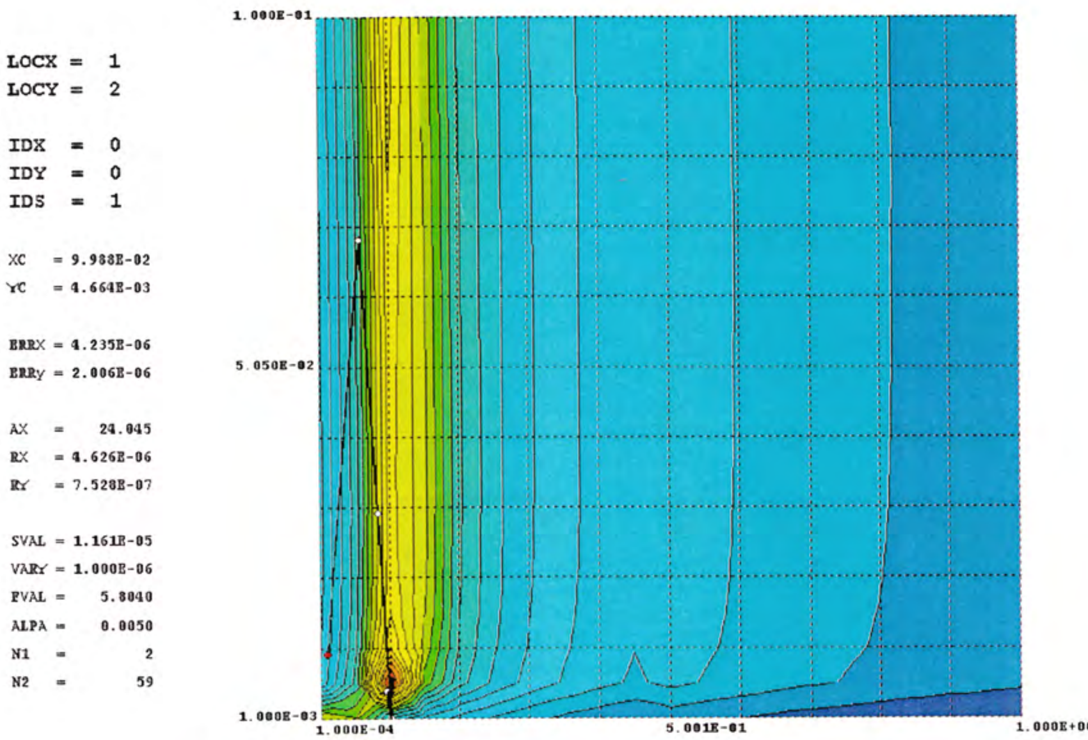


(h)　ケース A8（x 軸：流速，y 軸：マトリクス拡散深さ，正解は(10, 0.1)）

図 6.8　目的関数コンターおよび収束履歴

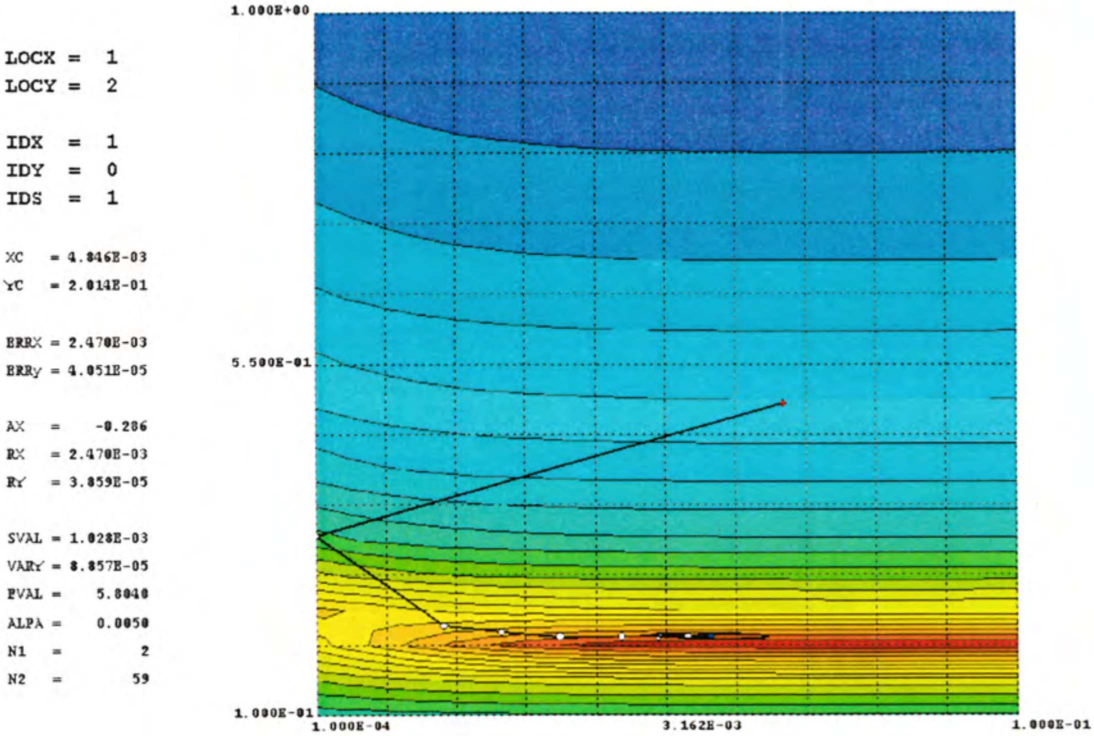


(i) ケース A9（x 軸：拡散係数，y 軸：遅延係数，正解は(4.73×10^{-3}, 6601)）

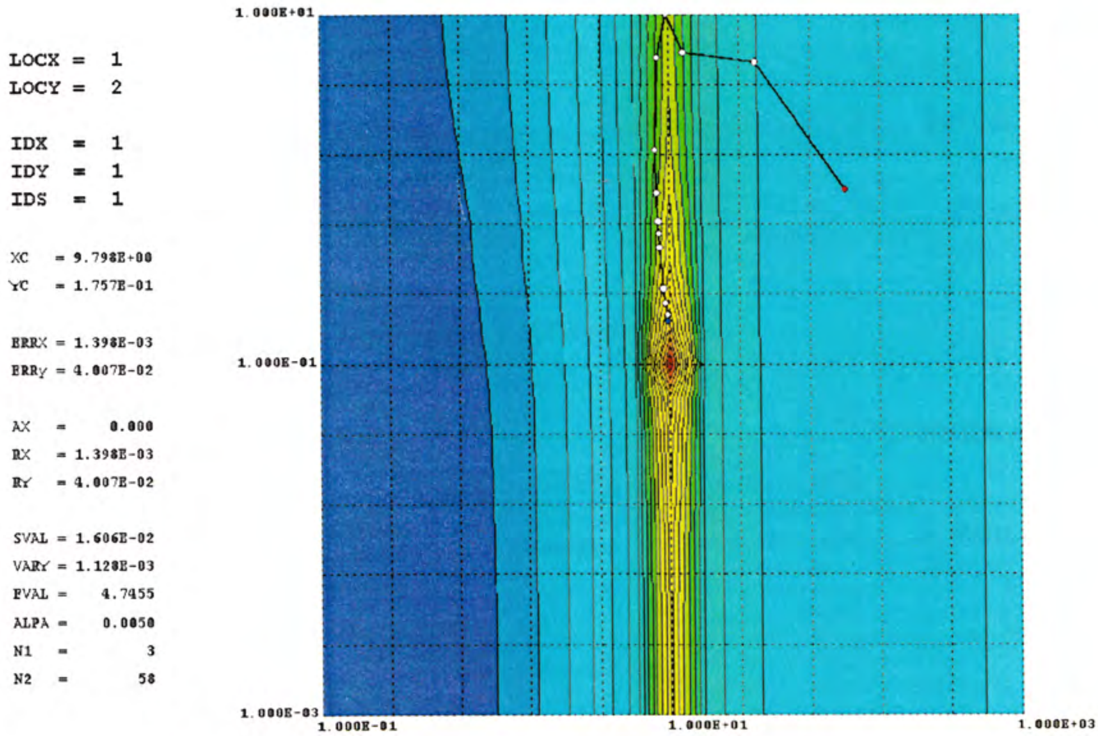


(j) ケース A10（x 軸：分散長，y 軸：拡散係数，正解は(0.1, 4.73×10^{-3})）

図 6.8 目的関数コンターおよび収束履歴



(k) ケース A11（x 軸：拡散係数，y 軸：湿潤辺長，正解は(6601, 0.2)）



(l) ケース A12（x 軸：流速，y 軸：分散長，正解は図中央）

図 6.8 目的関数コンターおよび収束履歴

6.3 解析ケースB（1次元不均質1経路モデル）

1次元不均質1経路モデルを図6.9に示す。一般に，割れ目モデルにおける核種移行遅延性能は，流速と開口幅の積に比例することが知られている（石原ほか，1999）。したがって，図6.10(a)に示すように割れ目幅を一定とした場合には，各割れ目を通過する流量（＝流速と断面積の積）は一定であることから流速と開口幅の積は一定となり，核種移行遅延性能は割れ目にかかわらず等しくなる。そこで，図6.10(b)に示すように開口幅が一定で流速と割れ目幅（湿潤辺長）の異なる3要素からなる不均質経路を作成した。すなわち，移行経路長，流速および湿潤辺長の異なる3つの要素が連結した1次元の不均質経路の順解析により得られた濃度破過曲線を観測値として逆解析によりパラメータを同定する。

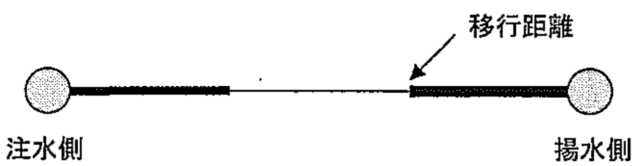
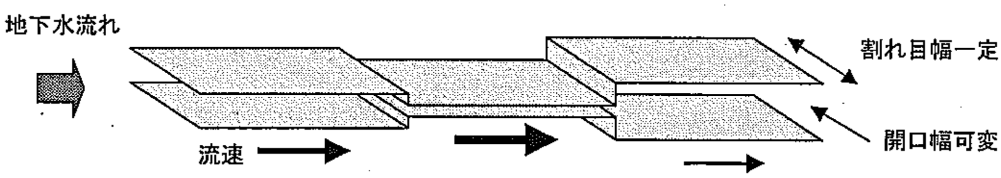
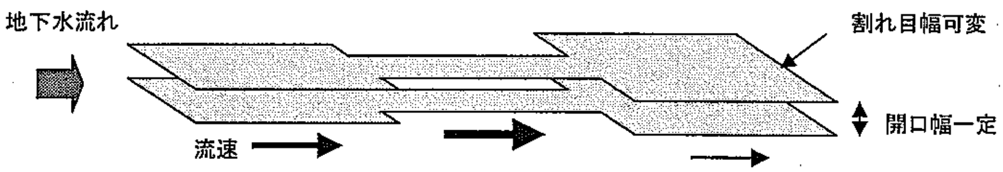


図 6.9　1次元不均質1経路モデル



(a)　割れ目幅一定



(b)　開口幅一定

図 6.10　不均質1経路モデル概念図

6.3.1 観測値の計算

表 6.8に示すパラメータ値から得られた濃度破過曲線観測値を図 6.11に示す。図には各要素と同じパラメータ値を有する均質 1 経路モデルの結果も併せて示す。不均質 1 経路より得られた濃度破過曲線は，流速の遅い要素 1 と 2 の流速と湿潤辺長を用いた均質モデルの中間にある。

表 6.8 解析ケース B パラメータ値一覧

パラメータ	記号／単位	要素 1	要素 2	要素 3
移行経路長	L [m]	**0.3**	**0.4**	**0.3**
断面積	A [m^2]	1×10^{-6}	1×10^{-6}	1×10^{-6}
流速	q [m/y]	$\mathbf{5\times10^{6}}$	$\mathbf{1\times10^{6}}$	$\mathbf{1\times10^{7}}$
分散長	α [m]	0.1	0.1	0.1
拡散係数	D_0 [m^2/y]	4.73×10^{-3}	4.73×10^{-3}	4.73×10^{-3}
間隙率	ρ [-]	0.02	0.02	0.02
湿潤辺長	[m]	**0.4**	**2.0**	**0.2**
ﾏﾄﾘｸｽ拡散深さ	d [m]	0.1	0.1	0.1
遅延係数（亀裂表面）	Ka [-]	1.0	1.0	1.0
遅延係数（岩石基質）	Kd [-]	6.601×10^{-3}	6.601×10^{-3}	6.601×10^{-3}
屈曲率	τ [-]	1.0	1.0	1.0

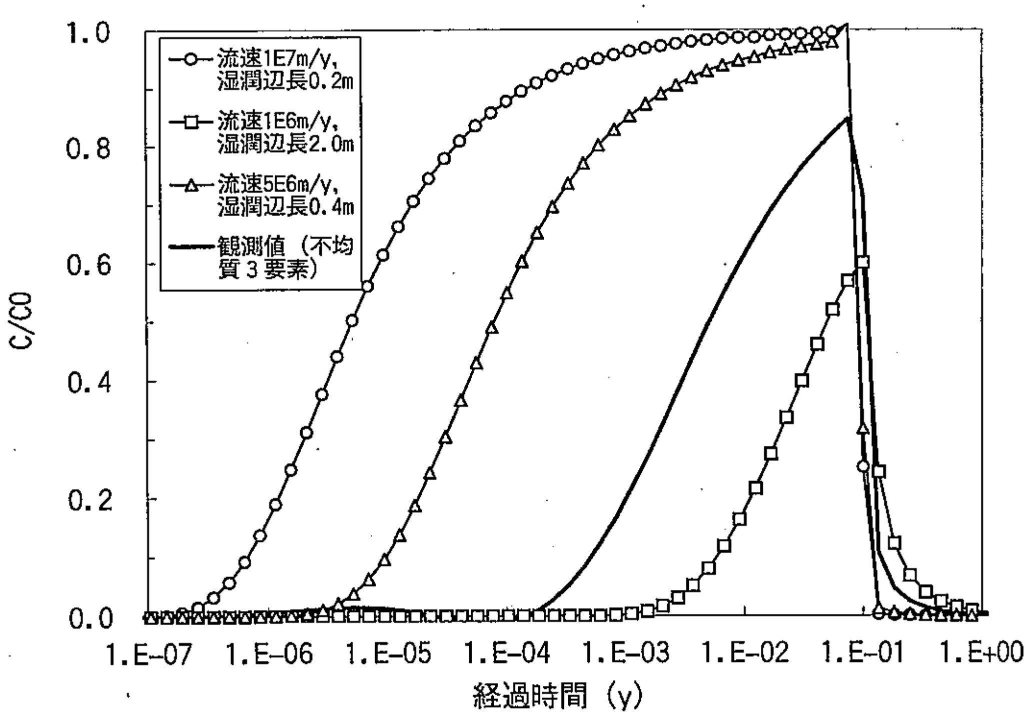


図 6.11 解析ケース B における濃度破過曲線観測値
（図中印付線は均質 1 経路モデルにより得られた結果を表す）

6.3.2　逆解析

逆解析は，図 6.12に示すように均質 1 要素モデル，不均質 2 要素モデル，不均質 3 要素モデルで実施した。各モデルで設定した初期値，上下限値および同定されたパラメータ値を表 6.9に示し，これらの値を用いて計算した濃度破過曲線を図 6.13に示す。各モデルとも精度よく同定されていることがわかる。図 6.14に示すように観測値と計算値の残差二乗和および各種情報量基準はともに，不均質 3 要素モデル，不均質 2 要素モデル，均質 1 要素モデルの順に小さく，この順にモデルの適用性が高いことがわかる。

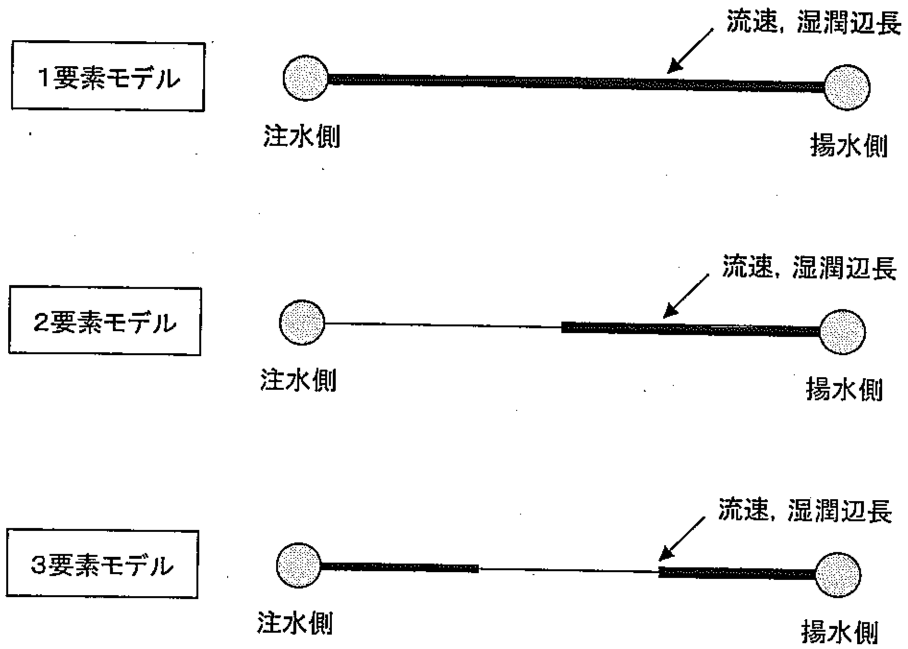


図 6.12　逆解析モデル

表 6.9　初期値，上下限値，同定値一覧（解析ケース B）

	初期値		上下限値		同定値	
	流速	湿潤辺長	流速	湿潤辺長	流速	湿潤辺長
1 要素	10^6	1.0	10^4～10^9	0.1～10	1.6×10^6	1.0
2 要素	10^6	0.1	10^4～10^9	0.1～10	1.0×10^6	0.1
	10^5	1.0			8.1×10^5	1.0
3 要素	10^6	0.5	10^4～10^9	0.1～10	6.2×10^6	0.5
	10^5	1.5			7.7×10^5	1.5
	10^7	0.2			1.0×10^7	0.2

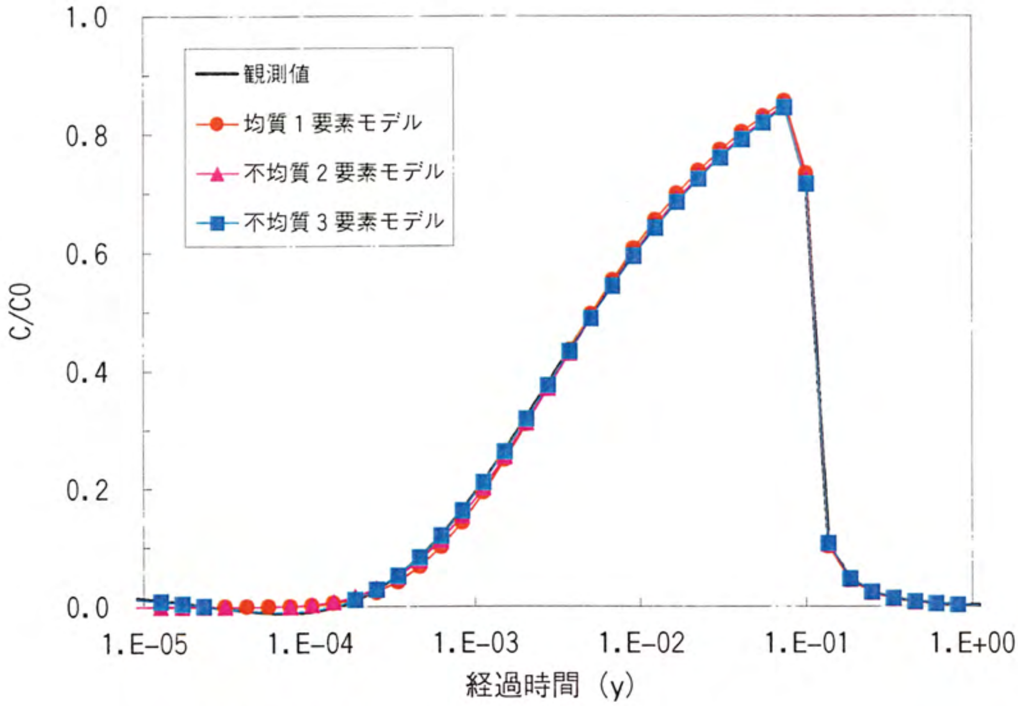


図 6.13　濃度破過曲線（解析ケース B，分散既知）

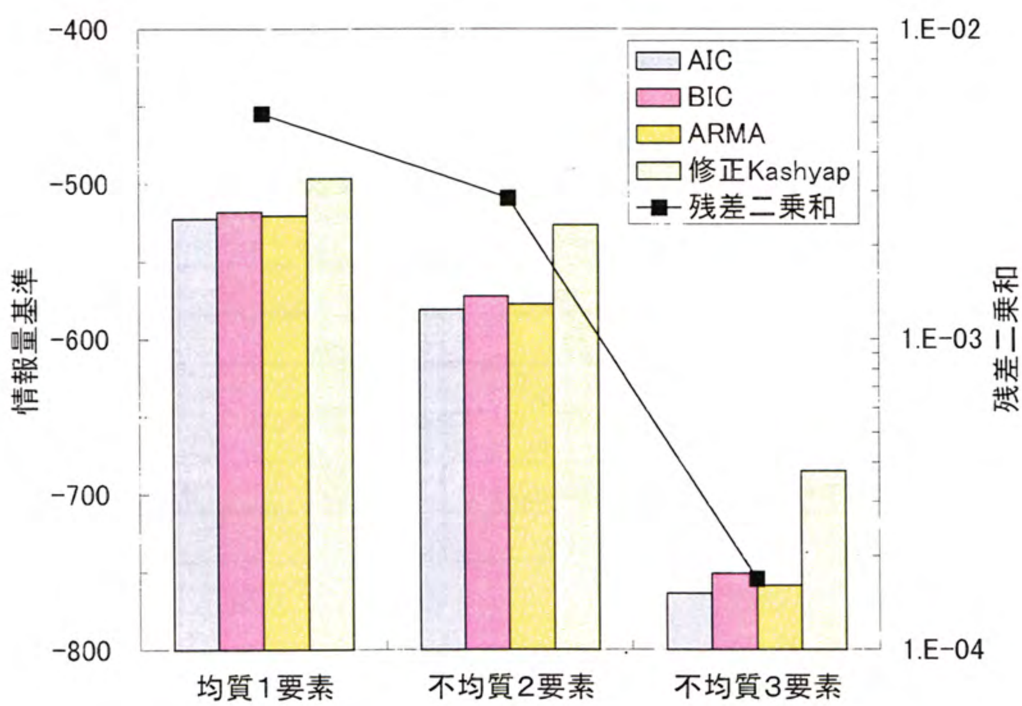


図 6.14　残差二乗和および各種情報量基準の比較

6.4　解析ケースC（1次元不均質3経路モデル）

流速の異なる1次元の均質な3本の移行経路（図 6.15参照）の順解析により得られた濃度破過曲線を観測値として逆解析によりパラメータを同定する。

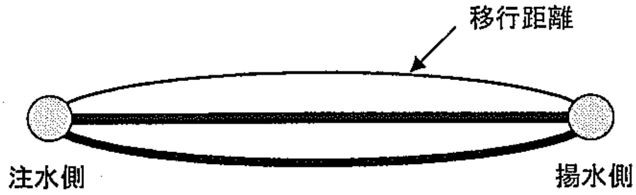


図 6.15　1次元不均質3経路モデル

6.4.1　観測値の計算

表 6.10に示すパラメータ値から得られた濃度破過曲線観測値を図 6.16に示す。

表 6.10　解析ケースCパラメータ値一覧

パラメータ	記号／単位	経路1	経路2	経路3
移行経路長	L [m]	1.0	1.0	1.0
断面積	A [m^2]	**2×10^{-7}**	**1×10^{-6}**	**1×10^{-3}**
流速	q [m/y]	**1×10^{8}**	**1×10^{6}**	**1×10^{4}**
分散長	α [m]	0.1	0.1	0.1
拡散係数	D_0 [m^2/y]	4.73×10^{-3}	4.73×10^{-3}	4.73×10^{-3}
間隙率	ρ [-]	0.02	0.02	0.02
湿潤辺長	[m]	0.2	0.2	0.2
ﾏﾄﾘｸｽ拡散深さ	d [m]	0.1	0.1	0.1
遅延係数（亀裂表面）	Ka [-]	1.0	1.0	1.0
遅延係数（岩石基質）	Kd [-]	6.601×10^{-3}	6.601×10^{-3}	6.601×10^{-3}
屈曲率	τ [-]	1.0	1.0	1.0

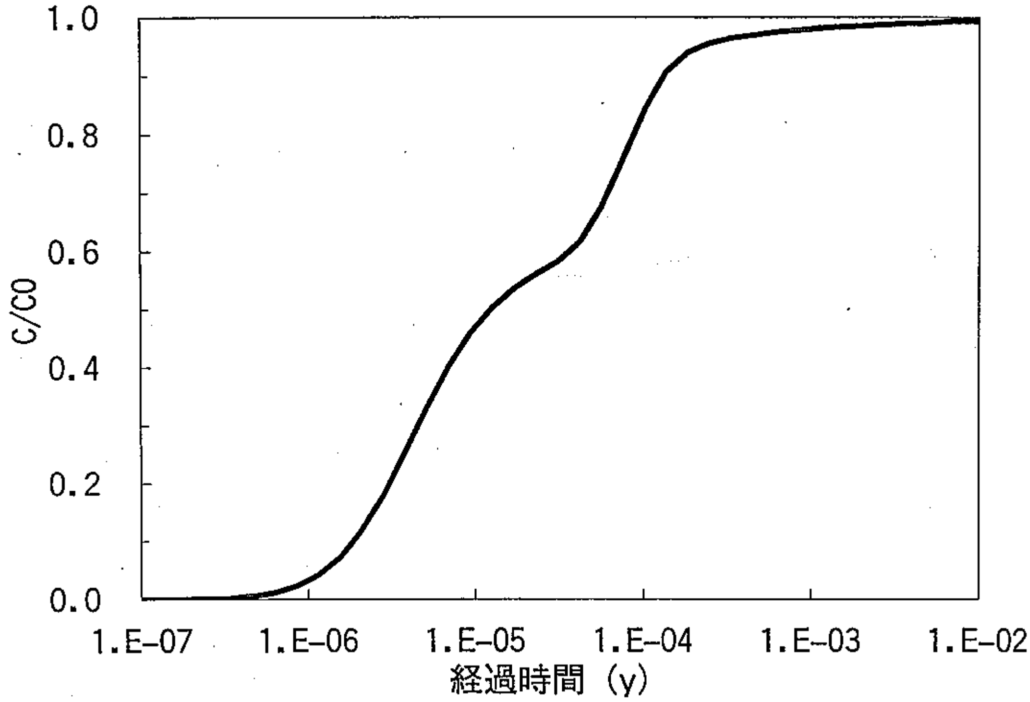


図 6.16 解析ケースＣにおける濃度破過曲線観測値

6.4.2　逆解析

逆解析は，図 6.17に示すように均質 1 経路モデル，不均質 2 経路モデル，不均質 3 経路モデルで実施した。均質 1 経路モデルでは流速と分散長を，不均質 2 経路および 3 経路モデルでは流速と断面積を逆解析で同定するパラメータとした。

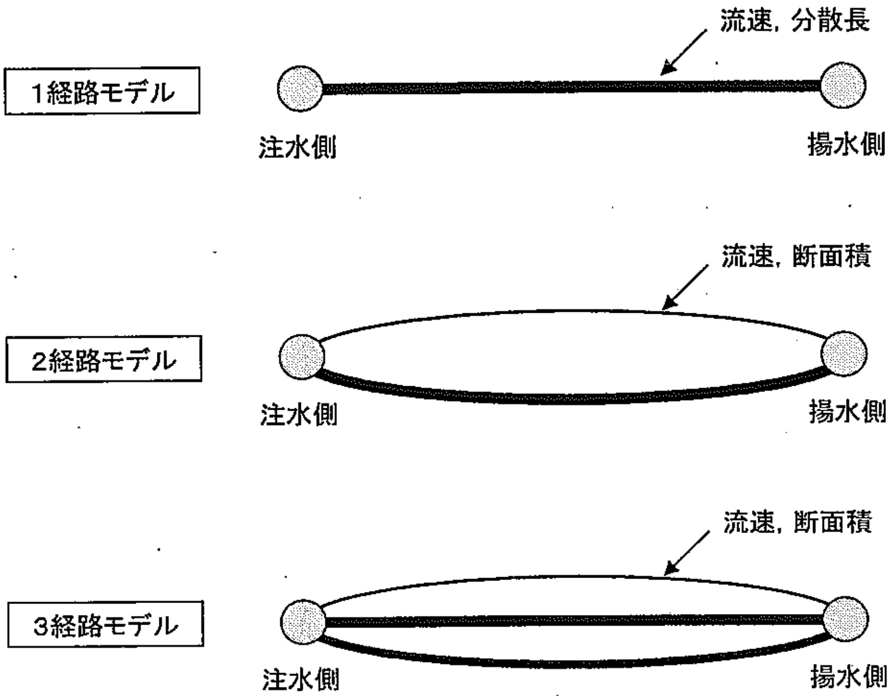


図 6.17　孔間トレーサ試験における解析モデル例

6.4.2.1 均質 1 経路モデルによる逆解析

1 次元均質 1 経路モデルを図 6.18に示し，設定した流速と分散長の初期値，上下限値および同定値を表 6.11に示す。また，逆解析により同定された値を用いて計算した濃度破過曲線を図 6.19に示す。これらの結果より，以下のような知見が得られる。

- 均質モデルで不均質性の影響が大きい観測値を十分にシミュレーションすることはできない。
- 分散未知の場合の方が分散既知の場合よりも同定精度が高い。
- 分散既知の場合は、分散値が大きいほど同定精度が高い。

図 6.18 均質 1 経路モデル

表 6.11 初期値，上下限値，同定値

		初期値	下限値	上限値	同定値
分散既知	流速	10^3	10^2	10^8	4.14×10^4
（分散=0.01）	分散長	0.1	0.01	10^3	0.40
分散既知	流速	10^3	10^2	10^8	4.18×10^4
（分散=0. 1）	分散長	0.1	0.01	10^3	1.23
分散既知	流速	10^3	10^2	10^8	3.79×10^4
（分散=1.0）	分散長	0.1	0.01	10^3	3.04
分散未知	流速	10^3	10^2	10^8	3.59×10^4
	分散長	0.1	0.01	10^3	36.6

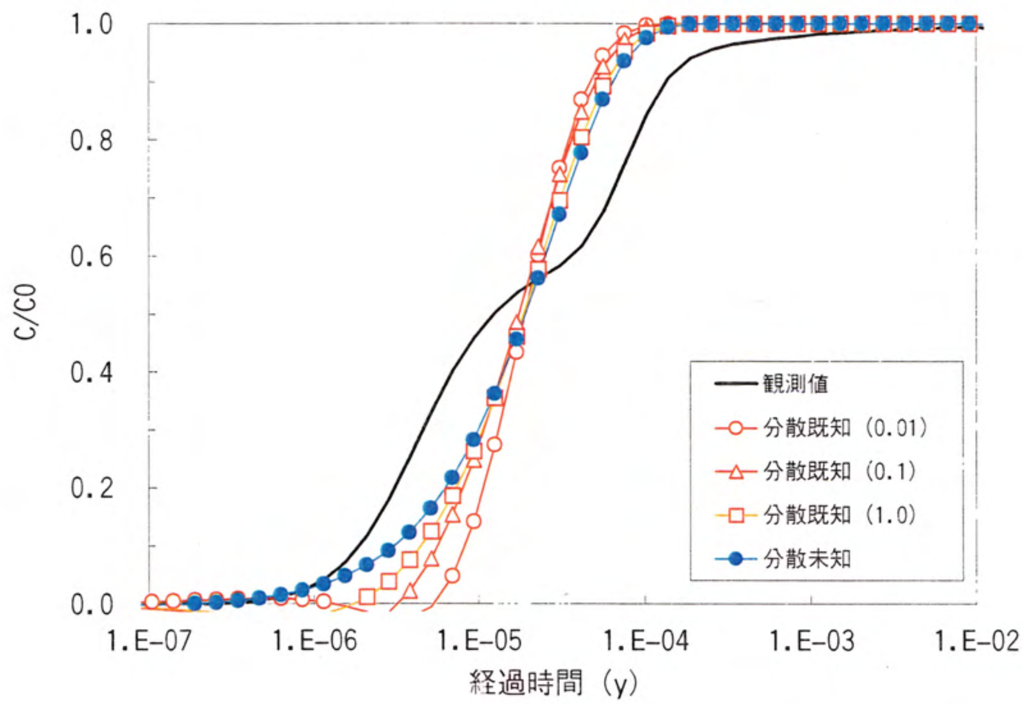


図 6.19 濃度破過曲線観測値および同定値

6.4.2.2　不均質 2 経路モデルによる同定

1 次元不均質 2 経路モデルを図 6.20に示し，解析ケースと設定した流速と分散長の初期値一覧を表 6.12に，流速と分散長の上下限値を表 6.13に示す。

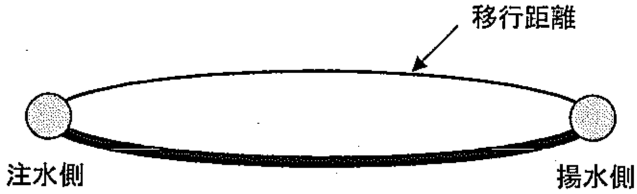


図 6.20　不均質 2 経路モデル

表 6.12　各解析ケースにおける初期値一覧

		パイプ2						
	流速[m/y] 断面積[m²]	10^8 10^{-6}	10^7 10^{-5}	10^6 10^{-4}	10^5 10^{-3}	10^4 10^{-2}	10^3 10^{-1}	10^2 1
	10^8 10^{-6}	ケース C11	ケース C12	収束 せず	ケース C14	ケース C15	ケース C16	ケース C17
パ	10^7 10^{-5}		ケース C22	ケース C23	ケース C24	ケース C25	ケース C26	ケース C27
イ	10^6 10^{-4}			ケース C33	ケース C34	ケース C35	ケース C36	ケース C37
プ	10^5 10^{-3}				ケース C44	ケース C45	ケース C46	ケース C47
1	10^4 10^{-2}					ケース C55	ケース C56	ケース C57
	10^3 10^{-1}						ケース C66	ケース C67
	10^2 1							ケース C77

表 6.13　解析に用いた上下限値

パラメータ	下限値	上限値
流速	10^2	10^8
断面積	10^{-6}	1.0

(1)　分散が既知の場合

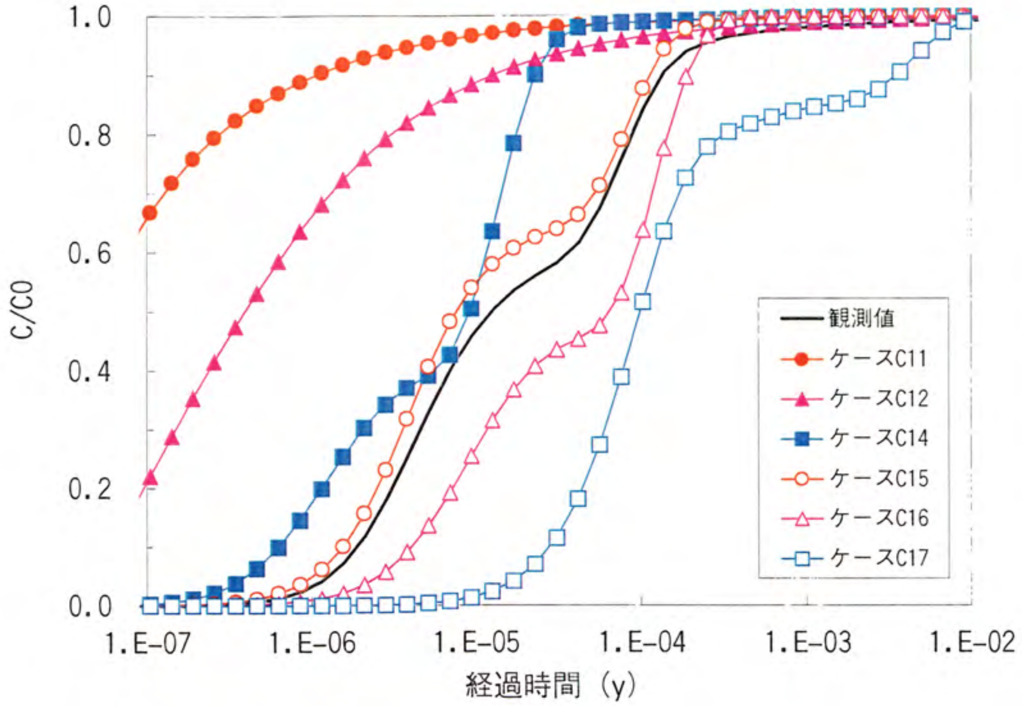
逆解析により同定されたパラメータ値を用いて計算した濃度破過曲線を図 6.21に示し，各解析ケースにおける同定精度の一覧を表 6.14に示す。

比較的同定精度の悪い解析ケースのうちC16とC17は上下限値を変更して再解析を実施した結果，図 6.22に示すように同定精度は非常に改善された。図 6.23に示す解析ケース C16（流速の上限値を 10^{-9}m/y に変更して再解析を実施）の流速と断面積の収束状況から，上限値が 10^{-8}m/y から 10^{-9}m/y に変更されることで経路 1 の流速がより最適値に近づいたことがわかる。

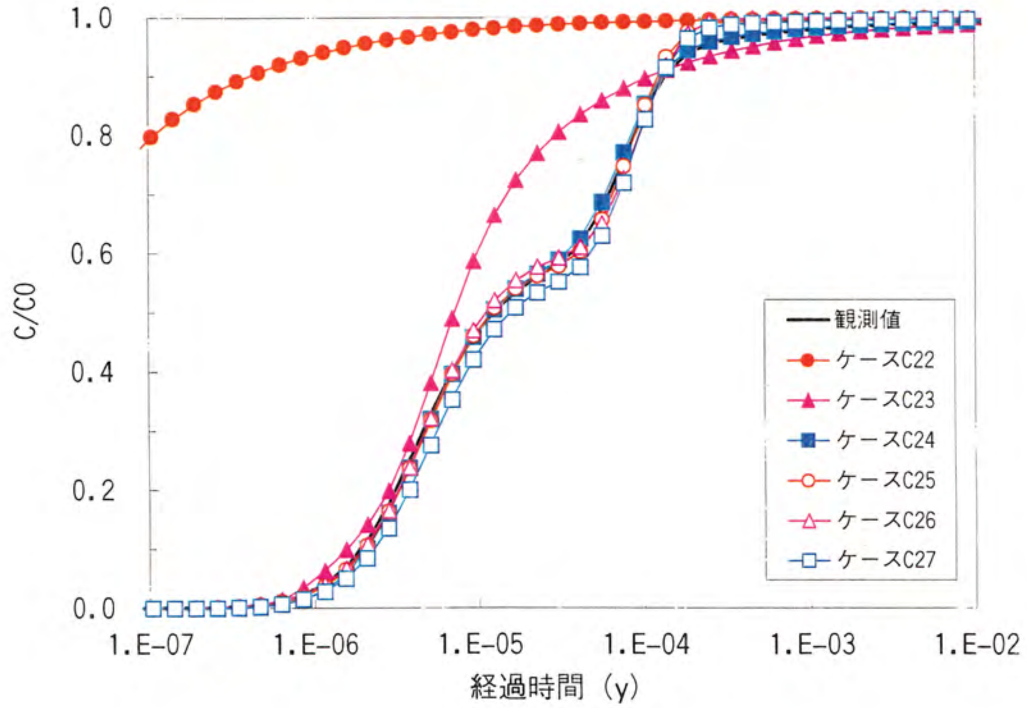
比較的同定結果のよいケース C34 と C46 の流速と断面積の収束状況を図 6.24に示す。流速は両ケースとも同じような値に収束しているのに対し，断面積は異なる値に収束している。これは，核種移行遅延性能は，流速と断面積の積に比例するためである。そこで，比較的同定精度の良いケースの流速と断面積の同定値と経路 1 と 2 の流速と断面積の積の比（＝(流速×断面積)$_{経路1}$／(流速×断面積)$_{経路2}$）を図 6.25に示す。図より，同定された流速と断面積は，各ケースで異なるものの流速と断面積の積の比はほぼ等しいことがわかる。

以上より，以下のような知見が得られた。

- 2 経路のパラメータ値を同定する場合には，両経路に同じ初期値を用いると，同じ方向に最適値を探しにいくため，よい結果が得られない。
- 逆解析に用いる初期値が上下限値と同じ場合には，最適値の探索方向が 1 方向に限られてしまうため，同定精度が低下する場合があるため，上下限値は余裕を持って設定するのが好ましい。
- 核種移行遅延性能は，流速と断面積の積に比例するため，流速と断面積の積は求められるものの，流速と断面積それぞれの唯一の解は求められない。

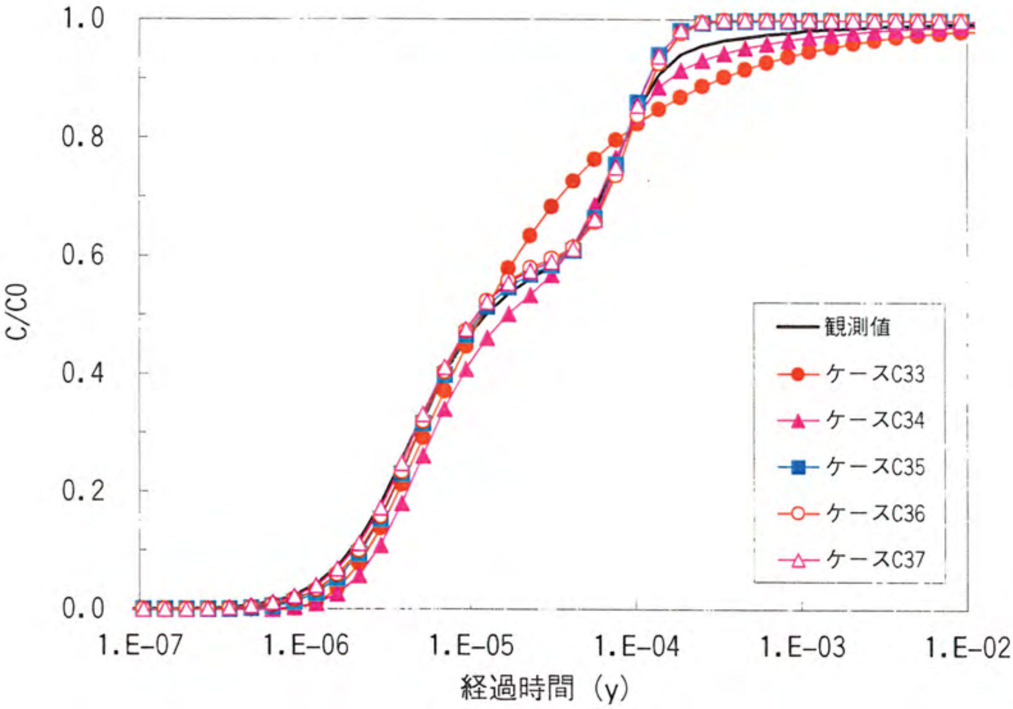


(a) ケース C11～C17

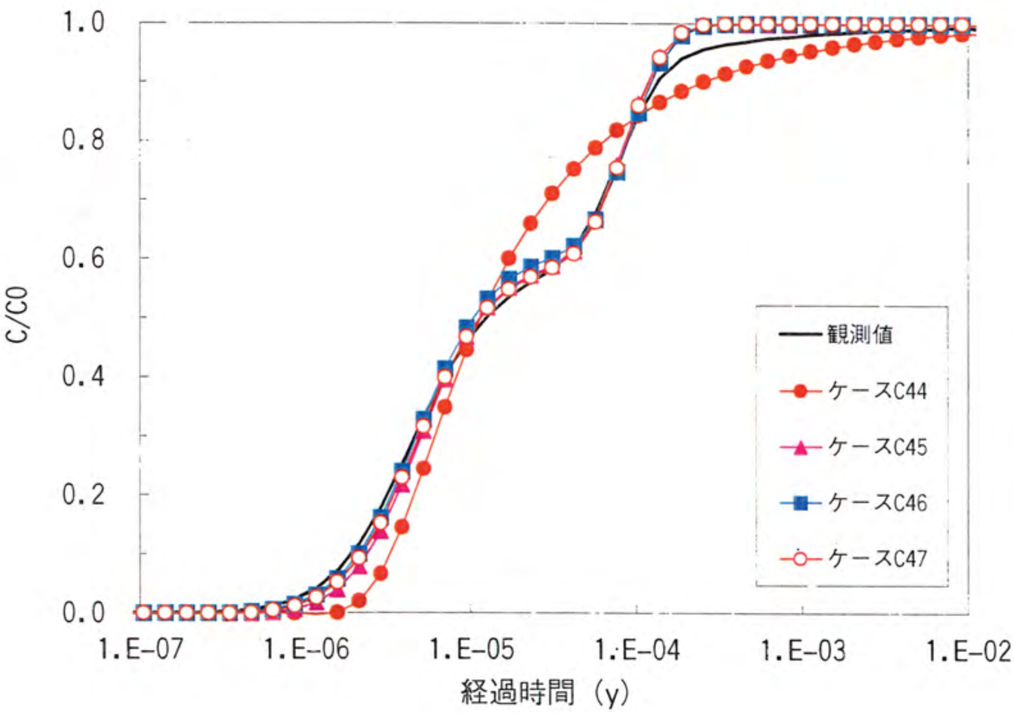


(b) ケース C22～C27

図 6.21 濃度破過曲線（解析ケース C，2 経路モデル，分散既知）（その 1）

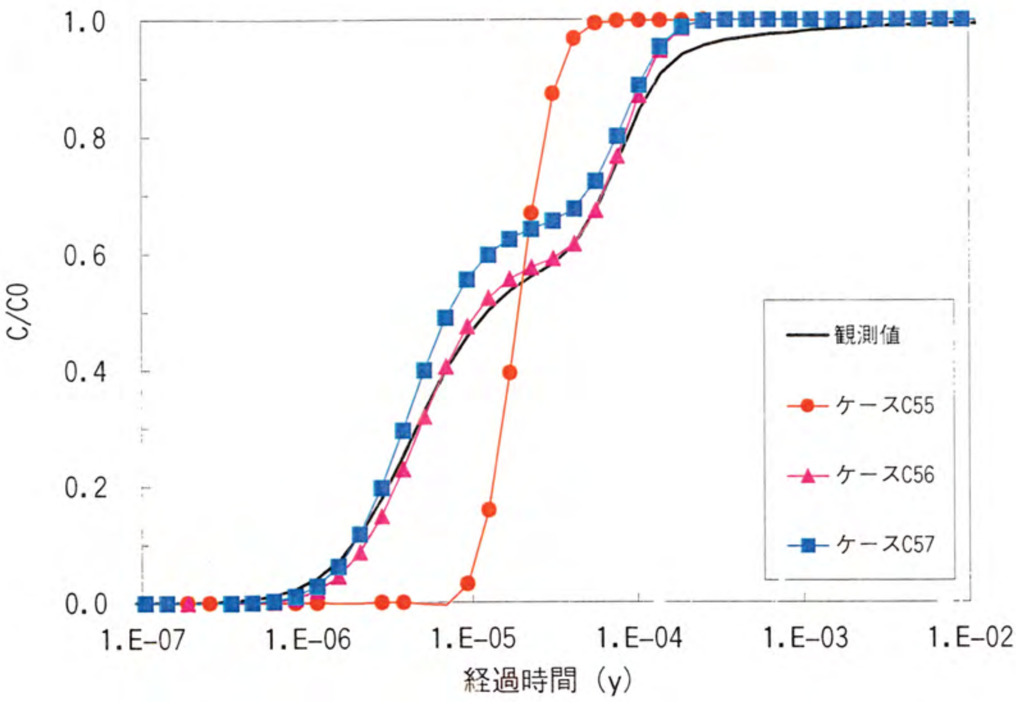


(c)　ケース C33～C37

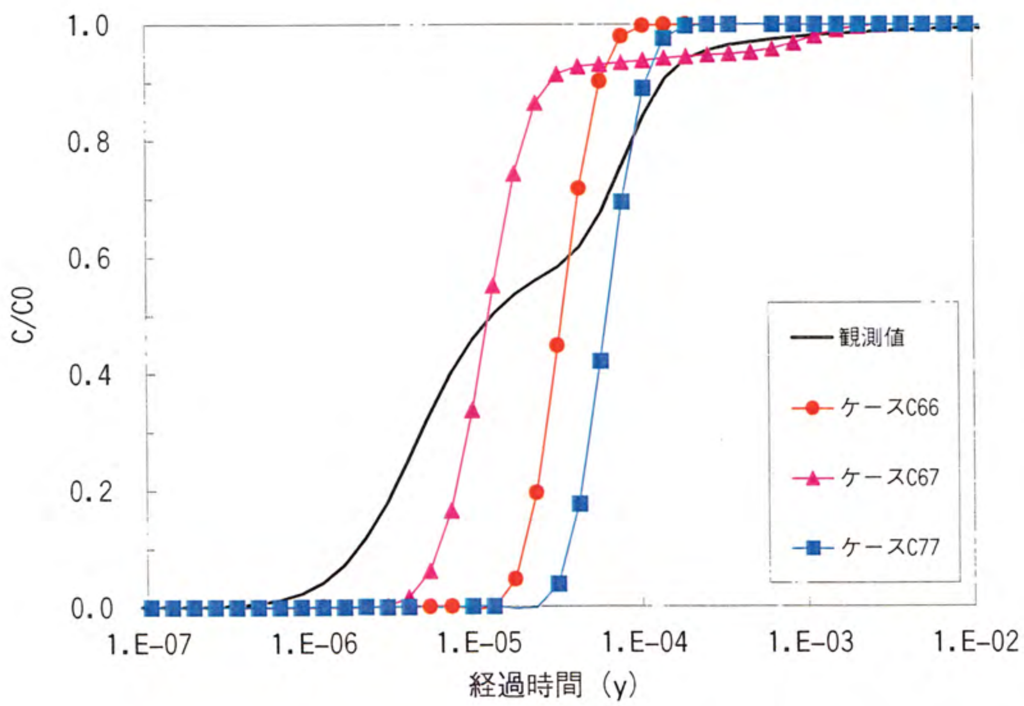


(d)　ケース C44～C47

図 6.21　濃度破過曲線（解析ケースC，2経路モデル，分散既知）（その2）



(e)　ケース C55～C57



(f)　ケース C66～C77

図 6.21　濃度破過曲線（解析ケース C，2 経路モデル，分散既知）

表 6.14　逆解析同定結果（分散既知）
（同定精度：○＝良，△＝中，×＝悪）

		パイプ2						
	流速[m/y] 断面積[m^2]	10^8 10^{-6}	10^7 10^{-5}	10^6 10^{-4}	10^5 10^{-3}	10^4 10^{-2}	10^3 10^{-1}	10^2 1
パイプ1	10^8 10^{-6}	C11 ×	C12 ×	×	C14 ×	C15 △	C16 ×(再)	C17 ×(再)
	10^7 10^{-5}		C22 ×	C23 ×	C24 ○	C25 ○	C26 ○	C27 ○
	10^6 10^{-4}			C33 ×	C34 ○	C35 ○	C36 ○	C37 ○
	10^5 10^{-3}				C44 ×	C45 ○	C46 ○	C47 ○
	10^4 10^{-2}					C55 ×	C56 ○	C57 △
	10^3 10^{-1}						C66 ×	C67 ×
	10^2 1							C77 ×

(再)：上下限値を変更して再解析を実施

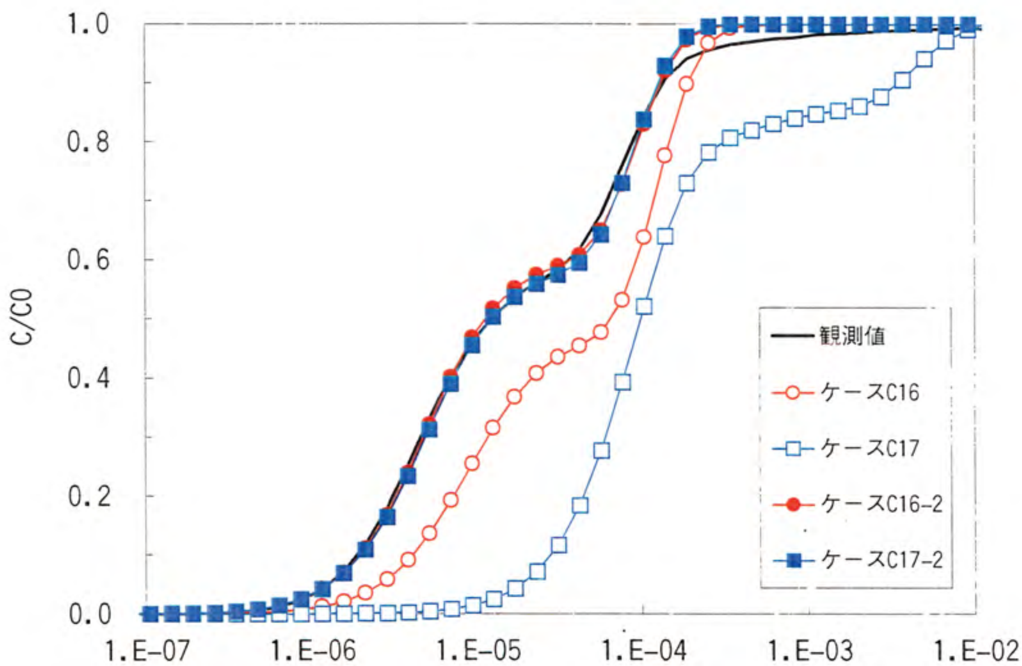
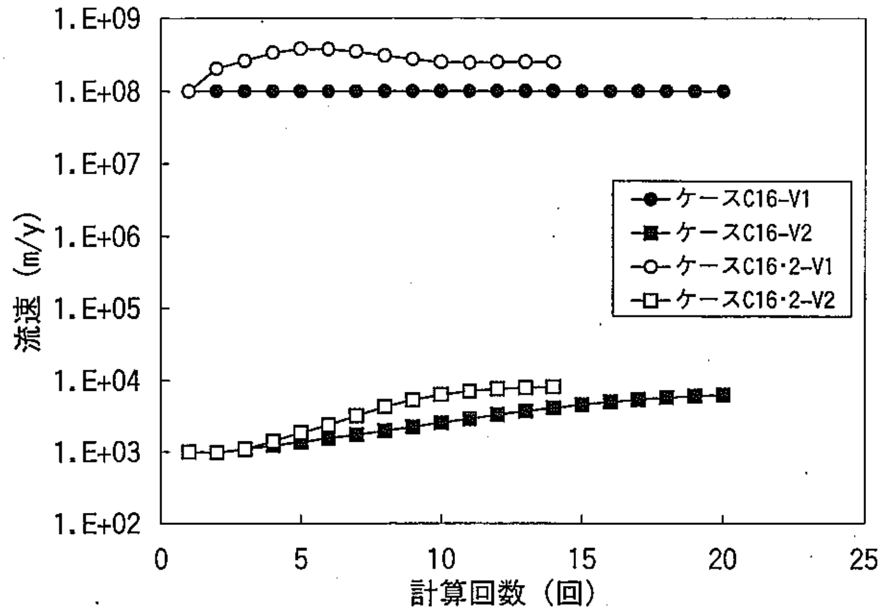
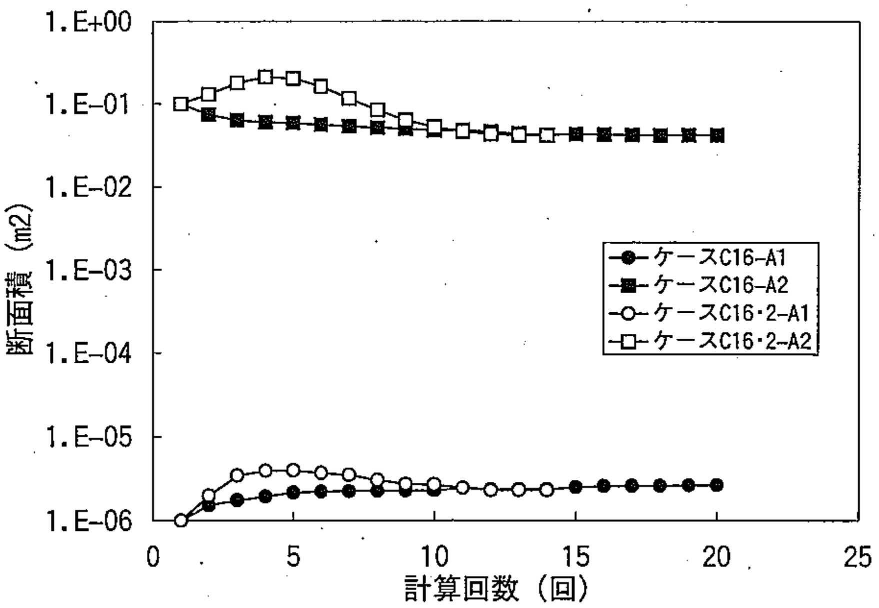


図 6.22　ケース C16 および C17 の再解析結果
（白抜きは再解析前，塗潰しは再解析後を表す）

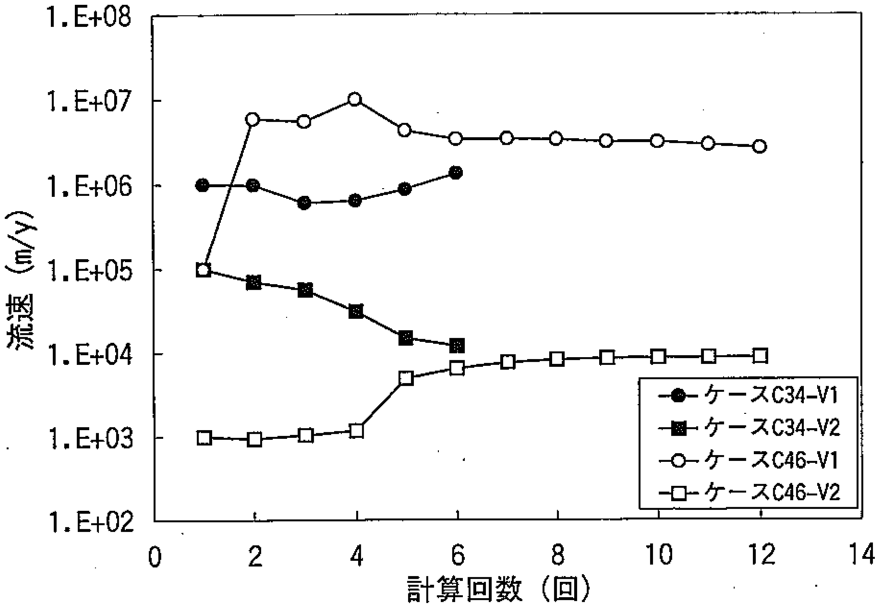


(a) 流速（*v1*, *v2* はそれぞれ経路 1 と 2 の流速を表す）

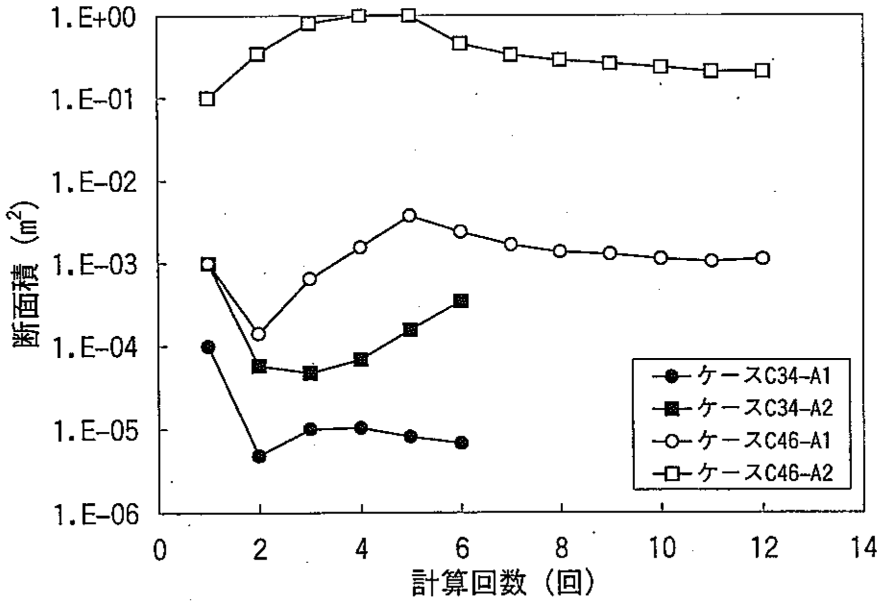


(b) 断面積（*A1*, *A2* はそれぞれ経路 1 と 2 の断面積を表す）

図 6.23 ケース C16 再解析のパラメータ収束状況



(a) 流速（$v1$, $v2$ はそれぞれ経路 1 と 2 の流速を表す）



(b) 断面積（$A1$, $A2$ はそれぞれ経路 1 と 2 の断面積を表す）

図 6.24 ケース C34 および C46 のパラメータ収束状況

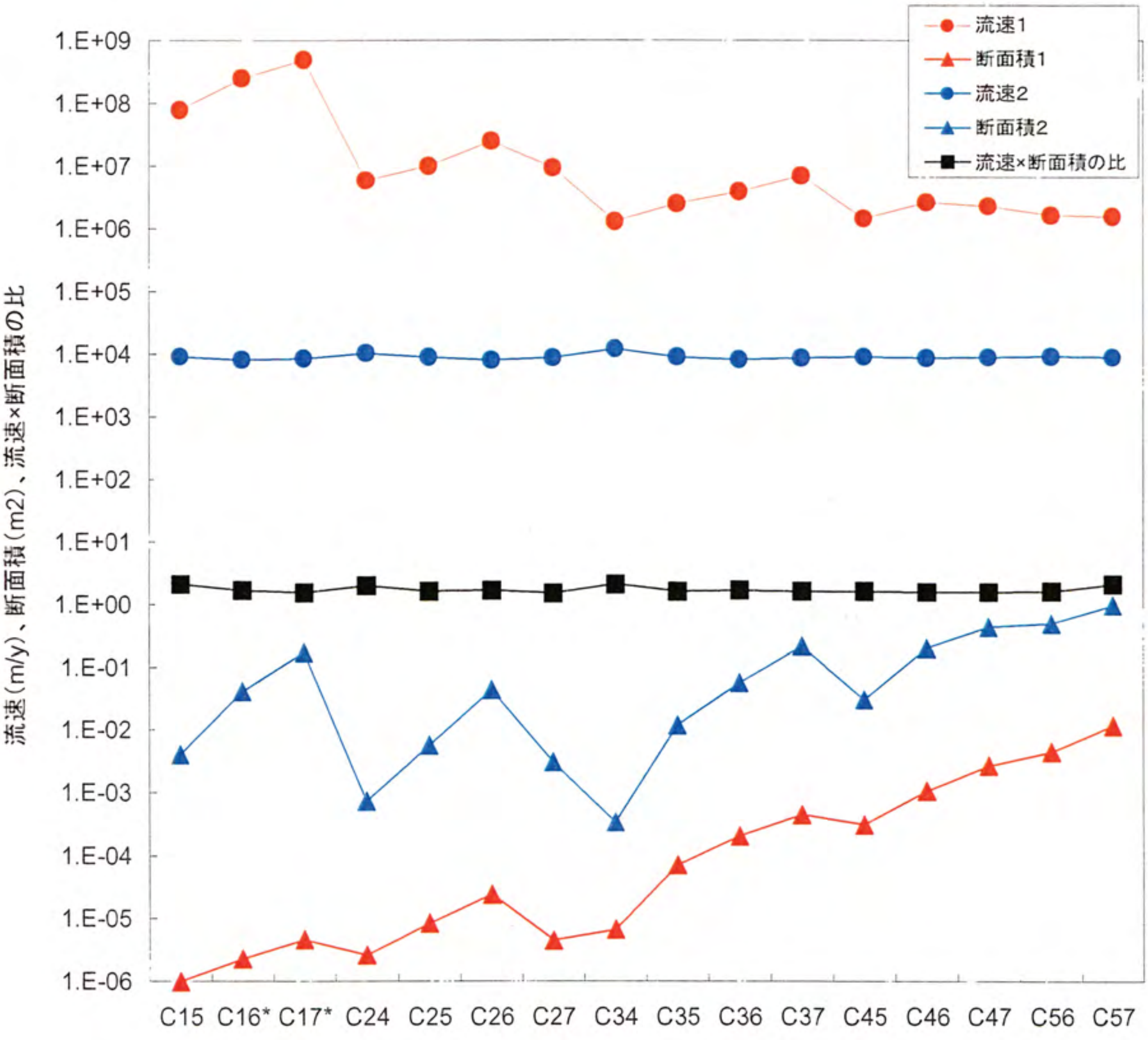


図 6.25　流速，断面積および流速×断面積比の一覧

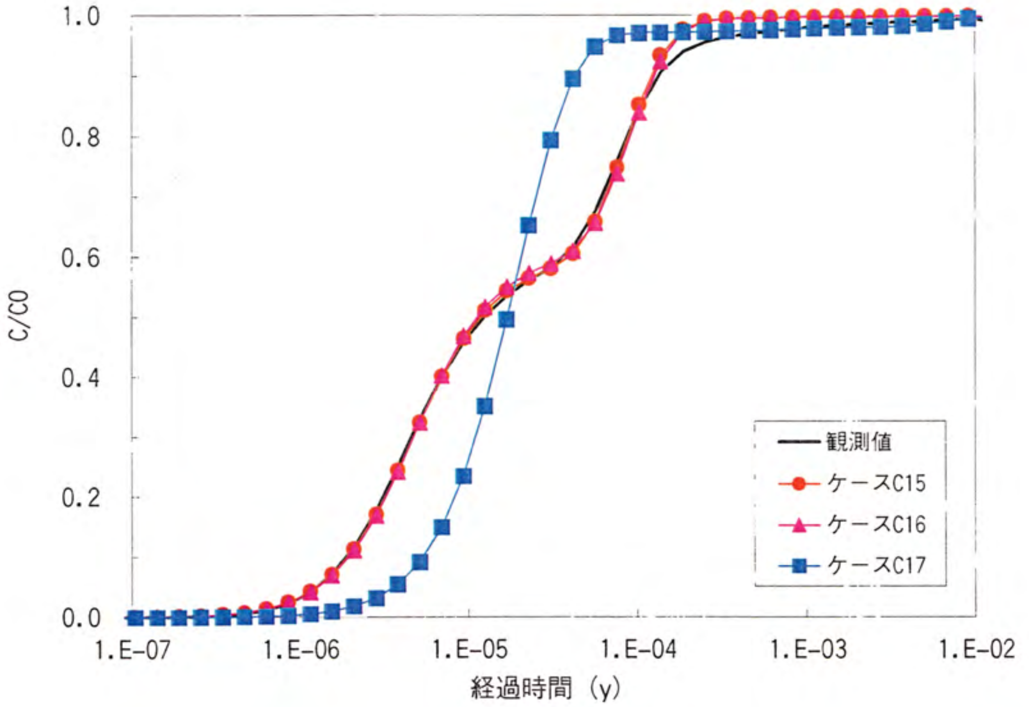
(*は再解析，流速×断面積比は(流速×断面積)$_{経路1}$／(流速×断面積)$_{経路2}$を表す)

(2) 分散が未知の場合

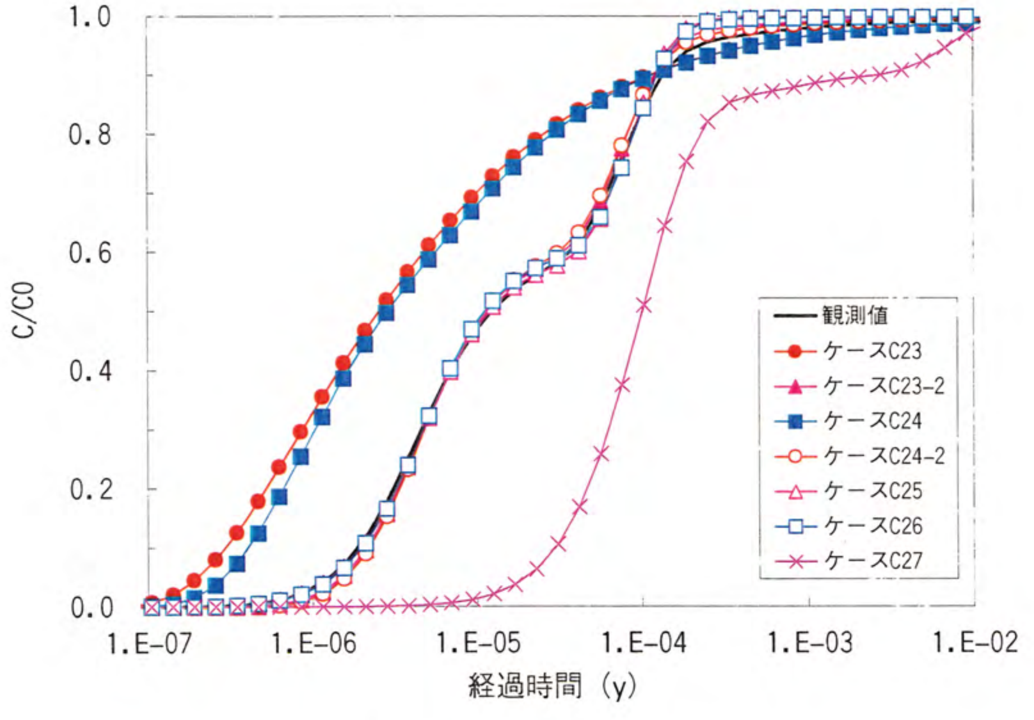
分散が未知の場合は，表 6.15に示す同じ初期値のケースを除いたケースについて逆解析を実施する。なお，同定精度が悪い場合については再解析を実施した。同定されたパラメータ値を用いた濃度破過曲線計算値を観測値とともに図 6.26に示し，同定結果一覧を表 6.16に示す。分散が未知の場合も既知の場合と同様，精度よくパラメータが同定されることが確認された。

表 6.15 解析ケース（分散未知）

		パイプ2						
	流速[m/y] 断面積[m^2]	10^8 10^{-6}	10^7 10^{-5}	10^6 10^{-4}	10^5 10^{-3}	10^4 10^{-2}	10^3 10^{-1}	10^2 1
	10^8 10^{-6}		×	×	×	C15	C16	C17
パ	10^7 10^{-5}			C23(再)	C24(再)	C25	C26	C27
イ	10^6 10^{-4}				×	C35(再)	C36	C37
プ	10^5 10^{-3}					C45(再)	C46	C47
1	10^4 10^{-2}						C56(再)	C57
	10^3 10^{-1}							C67(再)
	10^2 1							

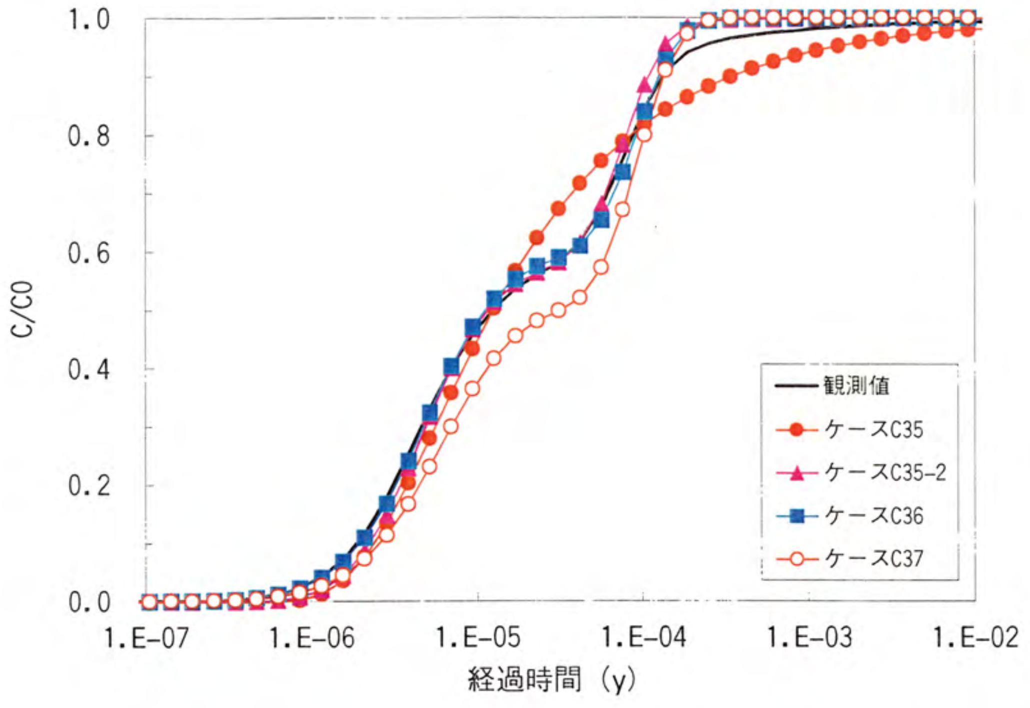


(a)　ケース C15～C17

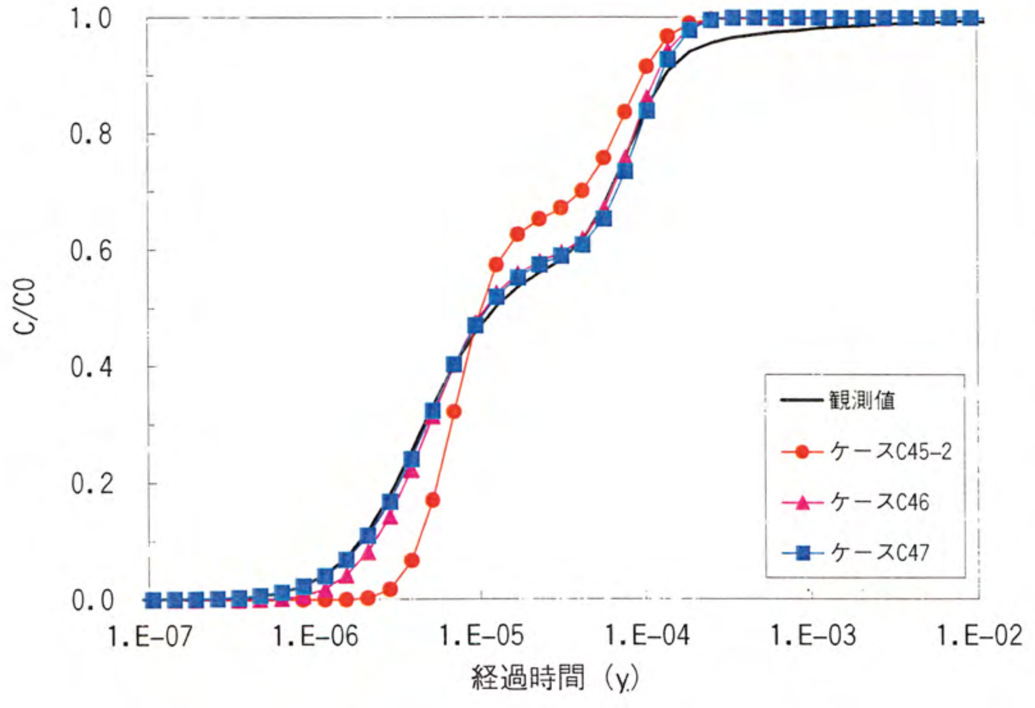


(b)　ケース C23～C27

図 6.26　濃度破過曲線（解析ケース C，2 経路モデル，分散未知）

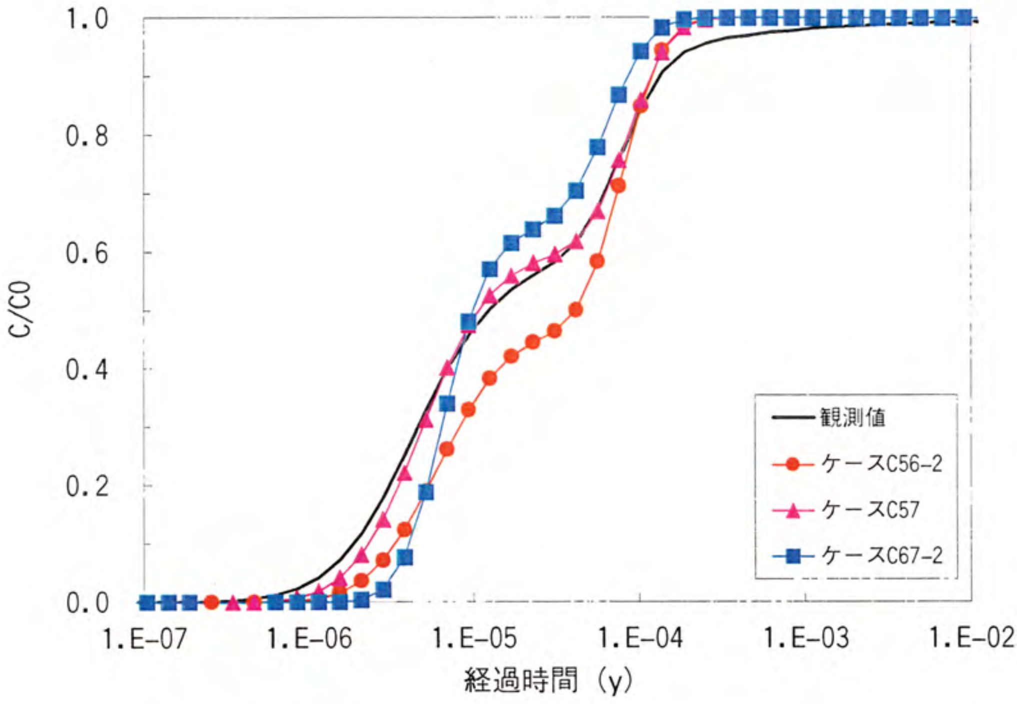


(c) ケース C34～C37



(d) ケース C45～C47

図 6.26 濃度破過曲線（解析ケース C，2 経路モデル，分散未知）



(e)　ケース C56～C67

図 6.26　濃度破過曲線（解析ケース C，2 経路モデル，分散未知）

表 6.16　逆解析同定結果（分散未知）

（同定精度：○＝良，△＝中，×＝悪）

	流速[m/y] 断面積[m^2]	パイプ2 10^8 10^{-6}	 10^7 10^{-5}	 10^6 10^{-4}	 10^5 10^{-3}	 10^4 10^{-2}	 10^3 10^{-1}	 10^2 1
パイプ1	10^8 10^{-6}		×	×	×	C15 ○	C16 ○	C17 ×
	10^7 10^{-5}			C23(再) ○	C24(再) ○	C25 ○	C26 ○	C27 ×
	10^6 10^{-4}				×	C35(再) ○	C36 ○	C37 △
	10^5 10^{-3}					C45(再) △	C46 ○	C47 ○
	10^4 10^{-2}						C56(再) △	C57 ○
	10^3 10^{-1}							C67(再) △
	10^2 1							

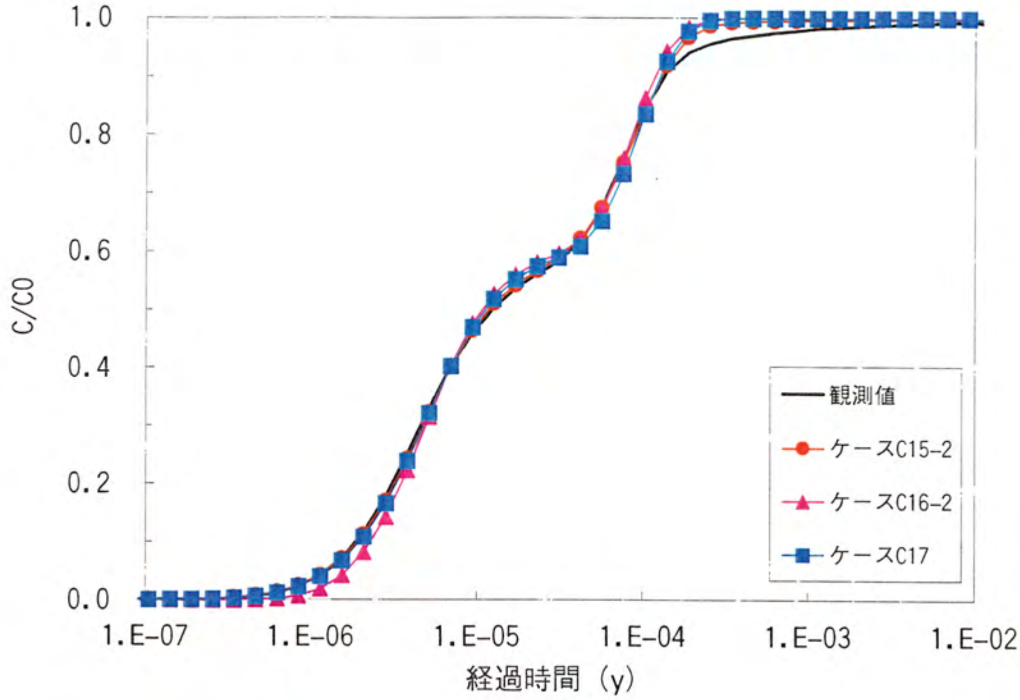
6.4.2.3　不均質 3 経路モデルによる同定

不均質 3 経路モデルにおける解析ケースと同定結果一覧を表 6.17に示し，同定された流速と断面積を用いて計算された濃度破過曲線を図 6.27に示す。不均質 3 経路モデルでは，不均質 2 経路モデルでは同定された解析ケース C35，C36，C67 などで解が求まらなかった。したがって，パラメータ数が増えるほど逆解析では解が求まらない場合がでてくるため，解が求まるまで初期値を変更したりする必要があると考えられる。

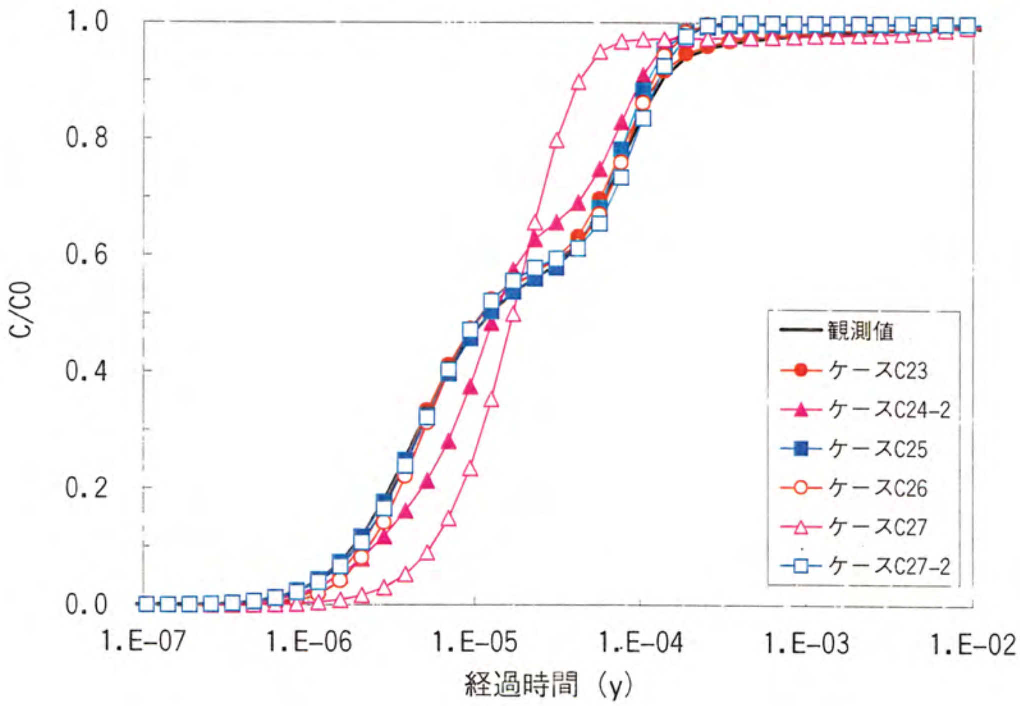
表 6.17　解析ケースと逆解析同定結果（分散未知）
（同定精度：○＝良，△＝中，×＝悪）

		パイプ2						
	流速[m/y] 断面積[m^2]	10^{8} 10^{-6}	10^{7} 10^{-5}	10^{6} 10^{-4}	10^{5} 10^{-3}	10^{4} 10^{-2}	10^{3} 10^{-1}	10^{2} 1
パイプ1	10^{8} 10^{-6}		×	×	×	C15(再) ○	C16(再) ○	C17 ○
	10^{7} 10^{-5}			C23 ○	C24(再) ○	C25 ○	C26 ○	C27(再) ○
	10^{6} 10^{-4}				C34 ○	×	×	C37(再) △
	10^{5} 10^{-3}					C45 ○	C46 ○	C47 ○
	10^{4} 10^{-2}						C56(再) ○	C57 ○
	10^{3} 10^{-1}							×
	10^{2} 1							

ただし，パイプ 3 の流速と断面積の初期値はそれぞれ 10^{5}[m/y]および 10^{-3}[m^2]とし，全パイプの上下限値は表 6.13と同じ値とする。

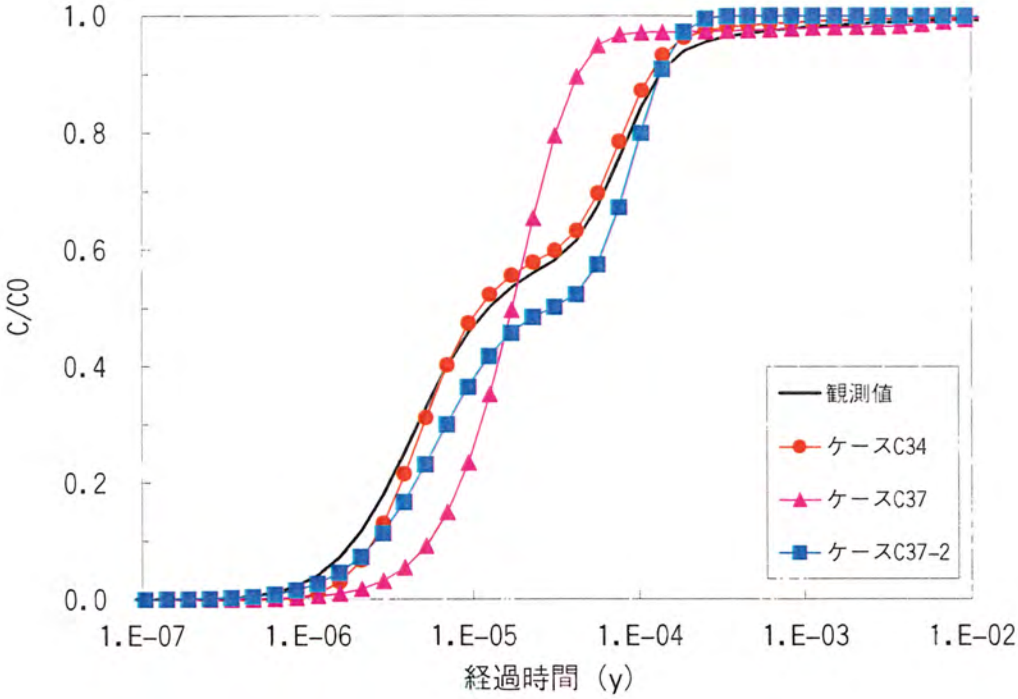


(a)　ケース C15～C17

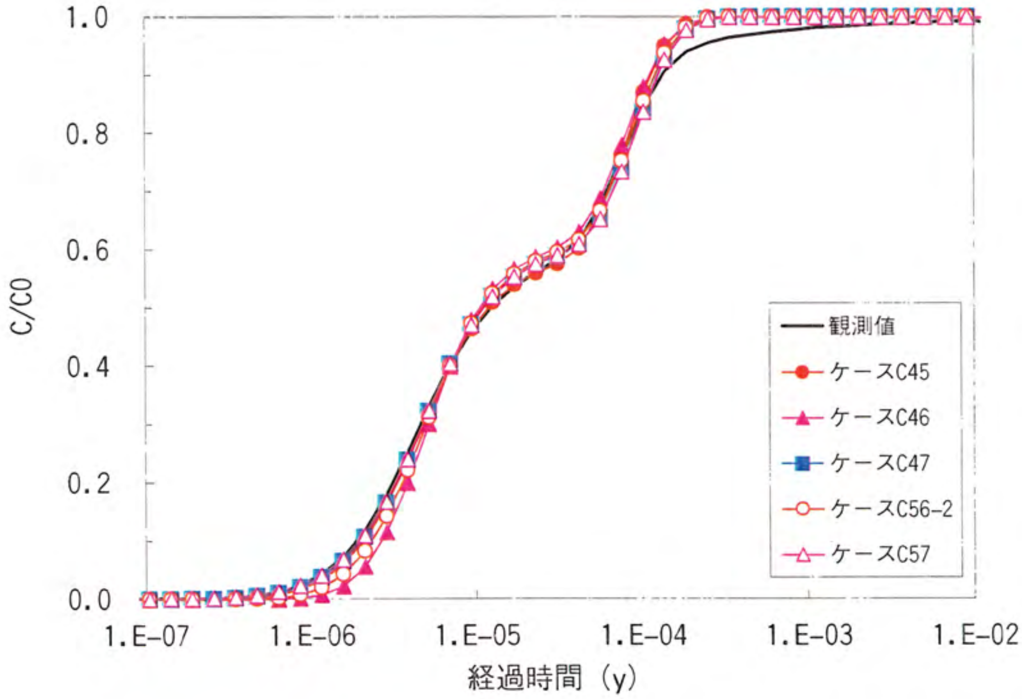


(b)　ケース C23～C27

図 6.27　濃度破過曲線（解析ケース C，3 経路モデル，分散未知）



(c) ケース C34～C37



(d) ケース C45～C57

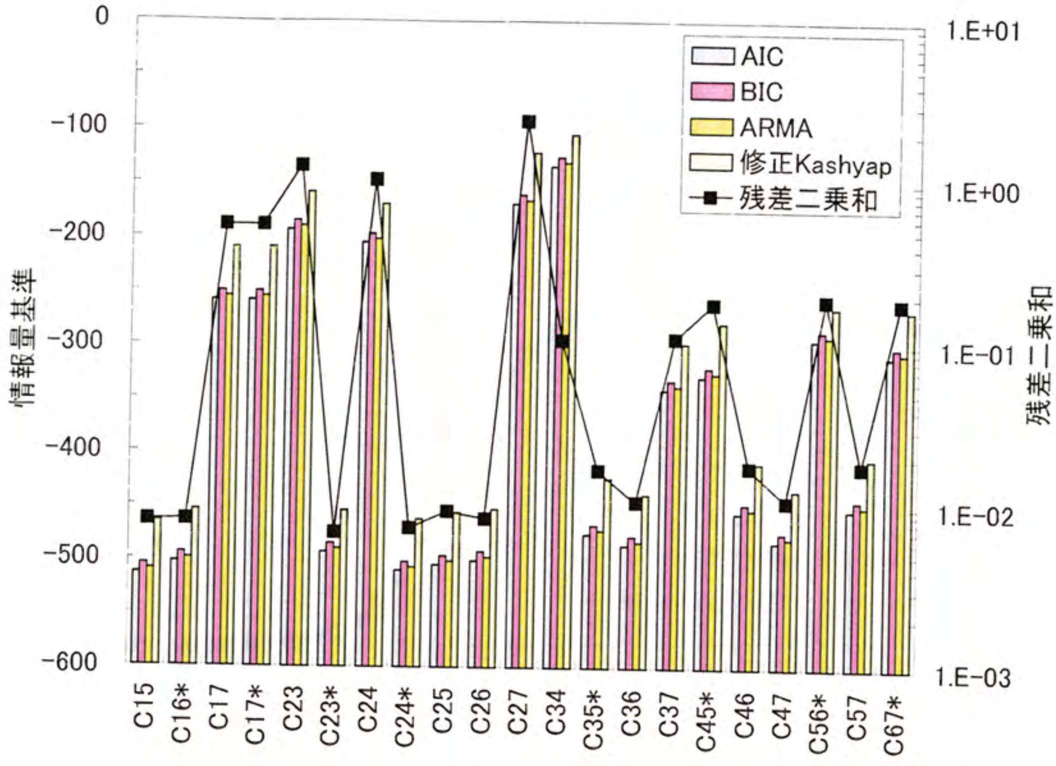
図 6.27 濃度破過曲線（解析ケースC，3経路モデル，分散未知）

6.4.3　情報量基準による最適モデルの選定

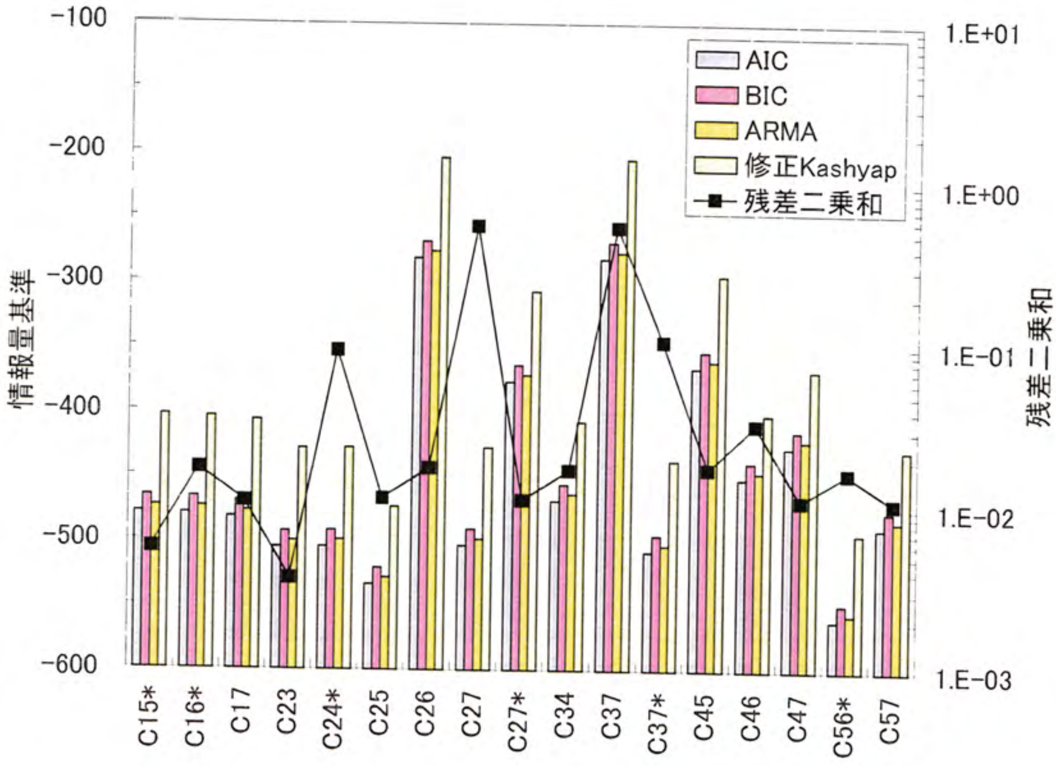
分散が未知の場合の均質 1 経路モデル，不均質 2 経路モデル，不均質 3 経路モデル間で情報量基準を比較して最適モデルの検討を実施する。

不均質 2 経路モデルおよび不均質 3 経路モデルの各解析ケースにおける情報量基準(AIC, BIC, ARMA，修正 Kashyap）と残差二乗和の一覧を図 6.28に示す。また，均質 1 経路モデルと不均質 2 経路モデル・不均質 3 経路モデルの比較的同定精度の高い解析ケース C25 の濃度破過曲線を図 6.29に示し，情報量基準と残差二乗和を図 6.30に示す。以上の結果より，以下のような知見が得られる。

- 図 6.28より，不均質 3 経路モデルの方が不均質 2 経路モデルよりも全体的に情報量基準と残差二乗和がともに小さい傾向が認められ，不均質 3 経路モデルの方が適用性が高いことがわかる。
- 図 6.30より，不均質モデルの方が均質 1 経路モデルよりも適用性が高いことがわかる。



(a)　不均質 2 経路モデル



(b)　不均質 3 経路モデル

図 6.28　残差二乗和と情報量基準（分散未知の場合）

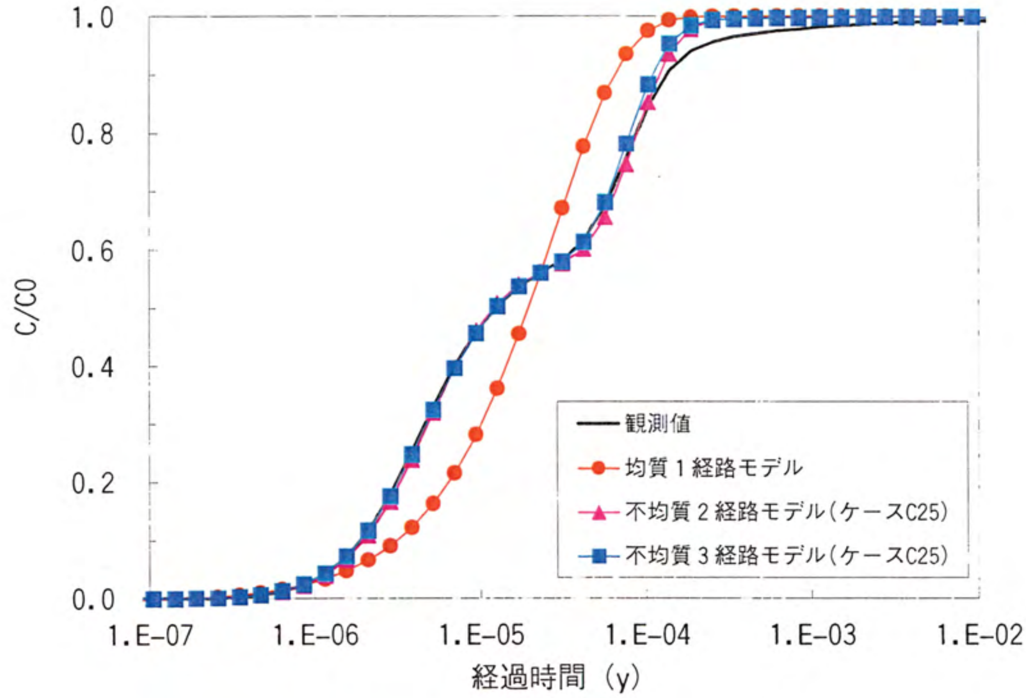


図 6.29　濃度破過曲線の比較（分散未知）

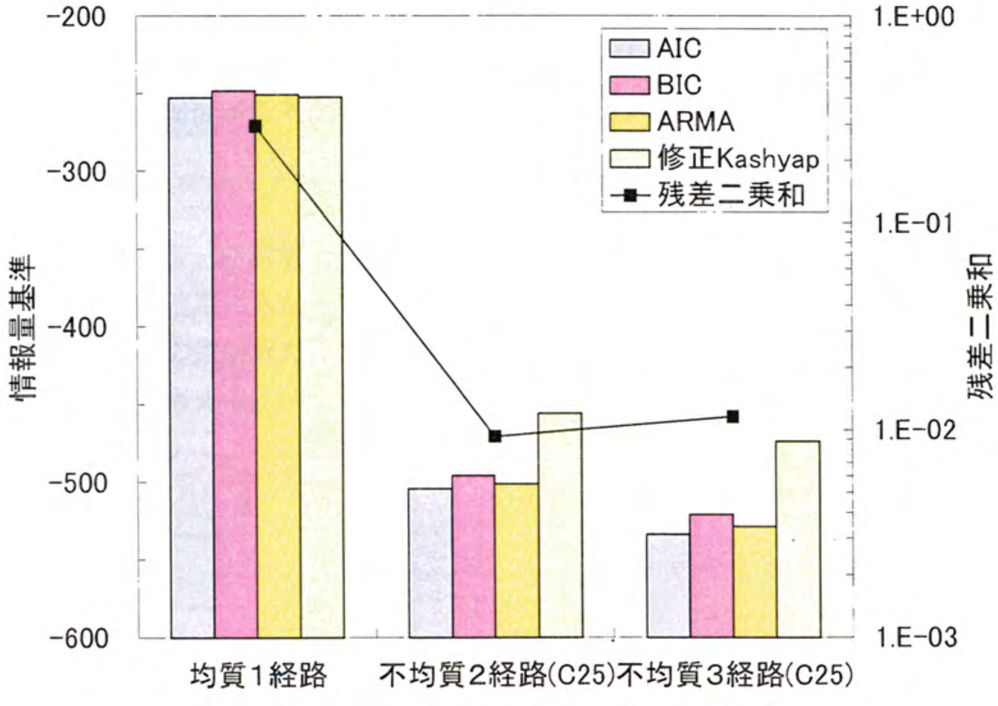


図 6.30　残差二乗和と情報量基準（分散未知）

7. まとめ

同定したパラメータ値の不確実性（信頼性）を評価できる確率論的手法を用いた核種移行逆解析プログラムを作成した。

順解析により人工的に作成した観測値を用いて検証解析を実施した結果，作成した逆解析プログラムは基本性能を満たしていることが確認された。また，検証解析を通じて核種移行逆解析に関して以下のような知見が得られた。

- 初期値により同定精度が異なる場合があるため，初期値を変えて逆解析することが必要である（初期値依存性）。
- 感度が小さいパラメータやパラメータの組み合わせ（流速と断面積など）によっては，観測値をよくシミュレーションできても（残差二乗和が十分に小さくても）正解値とは異なる場合がある（解の不定）。
- 未知パラメータ数が多いほど同定精度が低下する場合も増加する場合もあり、問題に依存する（未知パラメータの増加により，解析ケースＡでは残差二乗和・情報量基準が増加，解析ケースＢとＣでは残差二乗和・情報量基準が減少した。ただし，解析ケースＣでは解が求まらない場合もある。）。
- 初期値が正解値よりも数桁以上離れている場合には，最適解が効率的に求められない場合があるため，事前にある程度範囲を絞り込んでから逆解析するのが効率的と考える。
- 複数の経路を有するモデルでは，各経路に同じ初期値を用いると，同じ方向に最適値を探しにいくため，良い結果が得られない。
- 逆解析に用いる初期値が上下限値と同じ場合には，最適値の探索方向が１方向に限られてしまうため，同定精度が低下する場合があるため，上下限値は余裕を持って設定するのが好ましい。

今後は，原位置トレーサ試験データを用いて逆解析を実施し，さらなる知見を蓄積するとともに，実際の問題への適用にあたってコードの改良を行うことが必要と考える。また，流速と断面積のように核種移行の逆解析だけでは一意に求まらないパラメータもあるため，水理の逆解析コードの開発も必要と考える。

8. 参考文献

石原義尚，石黒勝彦，梅木博之：Se-79 の半減期の長期化による地層処分システム性能評価への影響，核燃料サイクル開発機構技術資料，JNC TN8400 99-086，1999.

中川徹，小柳義夫：最小二乗法による実験データ解析プログラム SALS，東京大学出版会，1982.

Bard, Y. : *Nonlinear Parameter Estimation, Academic*, Orlando, Fla., 1974.

Bury, K.V. : *Statistical Models in Applied Science*, John Wiley, New York, 1975.

Carrera, J. and Neuman, S.P. : Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 1. Maximum likelihood method incorporating prior information, *Water resources Research*, Vol.22, No.2, pp.199-210, 1986a.

Carrera, J. and Neuman, S.P. : Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 1. Uniqueness, stability, and solution algorithms, *Water resources Research*, Vol.22, No.2, pp.211-227, 1986b.

Carrera, J. and Neuman, S.P. : Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 1. Application to synthetic and field data, *Water resources Research*, Vol.22, No.2, pp.228-242, 1986c.

de Hoog, F.R., Knight, J. and Stokes, A.: An improved method for numerical inversion of Laplace transform, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 3(3), pp.357-366, 1982.

Shah, P.C., Gavalas, G.R. and Seinfeld, J.H. : Error analysis in history matching: The optimum level of parameterization, *Soc. Pet. Eng. J.*, 18, pp.219-228, 1978.

Sudicky, E.A.: The Laplace transform Galerkin technique for efficient time-continuous solution of solute transport in double-porosity media, *Geoderma*, 46, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, pp.209-232, 1990.

Yeh, W.W-G. : Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem, *Water Resources Research*, Vol.22, No.2, pp.95-108, 1986.

Yeh, W.W-G. and Yoon, Y.S. : A systematic optimization procedure for the identification of inhomogeneous aquifer parameters, in *Advances in Groundwater Hydrology*, edited by Z.A. Saleem, pp.72-82, American Water Resources Association, Minneapolis, Minn., 1976.