室蘭工業大学
学術資源アーカイブ
Muroran Institute of Technology Academic Resources Archive

多孔体の分散係数の最適同定について

メタデータ	言語: jpn 出版者: 室蘭工業大学 公開日: 2014-03-04 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 藤間, 聡, 馬場, 一孝 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10258/1084

多孔体の分散係数の最適同定について

藤　間　　聡・馬　場　一　孝*

Optimum Identification of Dispersion Coefficients in Porous Media

Satoshi TOHMA and Kazutaka BABA

Abstract

Recently, the problem of predicting the movement of pollutants in groundwater has gained attentions. To solve such problems a number of numerical methods has been developed. But dispersion coefficients are always assumed to be a known values, the result of such numerical approach then becomes questionable.

In this paper, dispersion coefficients were investigated using laboratory column and sand aquifer tracer tests.

Powell's conjugate direction method was applied together with the error function type solution to obtain the dispersion coefficients. Powell's method is efficient technique for the parameter identification of dispersion phenomena in porous media. Comparing the observed data and analytical solutions, obtained dispersion coefficients were reasonable.

1．ま　え　が　き

多孔体における分散現象の解明は，近年著しく進行している地下水汚染の防止対策を講ずる上で重要な課題である。現在多孔体内の汚染物質の挙動の予測は，主に数値解析を使用して詳細な研究[1,2]が進められている。しかし，これらの予測法は分散係数をあらかじめ既知量として解析を行っているため，実際に予測を行う場合，分散係数の与え方が難しく精度のよい予測は行われ難いと考えられる。

分散係数は多孔体を構成する粒子径，空隙径，流速等に規定されるパラメータで，その同定には明確な定式化がなく試行錯誤により主観的に決めているのが実状である。

本研究は，分散係数の同定に最適化手法の一つであるPowellの共役方向法を適用し，精度良く分散係数を推定する方法を示し，併せて流速との相関関係を検討するものである。

＊長崎県土木部

2．Powellの共役方向法[3)]

本研究において使用したPowellの共役方向法は制約条件のない最適化問題に対する一解法である。この方法により分散係数の同定はn次元変数からなる目的関数の最小化問題に変換される。即ち分散実験で得られた実測値と分散方程式による計算値との誤差の加重平方和を目的関数とし，この関数を最小にする分散係数を探索することになる。

この方法は他の最適化法と異なり一階偏導関数の値を必要としなく，一般に計算処理時間が少ない特徴を有する。しかし，初期点の推定精度が低い場合には最小点から隔たった点が求められ，最小点に近接するのに時間を要するという探索効率のうえで欠点を有する。本章では共役法の数学的証明は省略し，アルゴリズムのみを示す。但し，以下で使用する記号は，α_i：独立変数，$f(\alpha_i)$：目的関数，j：反復回数を表わすものとする。

(1) $j=0$ とし，初期点 α_0，探索方向 d_1 を与える。最初の探索方向は各座標軸に平行な単位ベクトルを用いる。

(2) 点 α_{i-1} から探索方向 d_i に進み目的関数 $f(\alpha_i)$ の最小点 α_i を求める。次に α_i から再出発し，方向 d_{i+1} についての最小点 α_{i+1} を求める。以下同様の操作を繰り返えす。

(3) 次の繰り返しに使用する新しいベクトルの組を選択するため，$\delta=|f(\alpha_{m-1})-f(\alpha_m)|=\max\{f(\alpha_{i-1})-f(\alpha_i)\}$ を満足する整数mを見いだす。

(4) $f_1=f(\alpha_0)$，$f_2=f(\alpha_n)$，$f_3=f(2\alpha_n-\alpha_0)$ を算出する。

(5) $f_3\geq f_1$ あるいは，$(f_1-2f_2+f_3)\cdot(f_1-f_2-\delta)\geqq\delta(f_1-f_3)^2/2$ のいずれかが満足されると次の反復では現段階の探索方向をそのまま保有する。

(6) 上記条件が満足されなければ，方向 $d=\alpha_n-\alpha_0$ についての最小点を求め，この点を次の出発点とする。また新しい探索方向として d を最後に付け加え，d_m を取り去る。

(7) 前段階の反復で得られたベクトル α_i と現段階のベクトル α_i との誤差が許容値以内であれば計算を終了し，そうでなければ $j=j+1$ として(2)に戻る。

上記のアルゴリズムのうち(2)の最小点の求め方は，一探索方向上の三点で目的関数を評価し関数値を求め，この三点を用いて2次近似を実施し，最小点の位置が指定精度に達するまで引き続き2次近似を行なう。

3．分散係数の同定

分散係数をPowellの共役方向法を用いて探索するためには，分散現象を正確に表現するモデルの設定が必要となる。本研究でのモデルは次の偏微分方程式から成り立つものとする。

$$\frac{\partial C}{\partial t}=-\alpha_1\frac{\partial C}{\partial x}+\alpha_2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+\alpha_3\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+\alpha_4\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \tag{1}$$

ここに，C：物質濃度，x，y，z：座標，t：時間，α_i：分散係数等の未知パラメータを示す。但し，α_1：流速(V)，α_2：縦方向分散係数(K_L)，$\alpha_{3,4}$：横方向分散係数(K_T)とし，ここでは，流速の同定も併せて行うものとする。

モデル解 $C(x, y, z, t)$ は(1)式を初期・境界条件の下で解析的にまたは数値解析法により求めることができる。ここでは次の解析解を用いる。

トレーサ連続放出による一次元分散方程式の解：

$$C(x,t)=\frac{C_0}{2}\left[\mathrm{erfc}\left(\frac{x-Vt}{\sqrt{4K_Lt}}\right)+\exp\left(\frac{Vt}{K_L}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{x+Vt}{\sqrt{4K_Lt}}\right)\right] \tag{2}$$

但し，初期条件：$C(x,\ t=0)=0 \quad x>0$

境界条件：$C(x=0,\ t)=C_0 \quad t>0$，$C(x\to\infty,\ t)=0 \quad t>0$

トレーサ瞬間放出による二次元分散方程式の解：

$$C(x,y,t)=\frac{C_0Q}{8\pi K_LR}\exp(-\gamma t)\left[\exp\left(\frac{Vx-\beta R}{2K_L}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{R-\beta t}{\sqrt{4K_Lt}}\right)+\exp\left(\frac{Vx+\beta R}{2K_L}\right)\mathrm{erfc}\left(\frac{R+\beta t}{\sqrt{4K_Lt}}\right)\right] \tag{3}$$

ここに，$R=\sqrt{x^2+Y^2}$，$Y=y\sqrt{K_L/K_T}$，$\beta=\sqrt{V^2-4K_L\gamma}$，$\gamma$：トレーサ減衰率，$C_0$：初期濃度，$Q$：流量。

分散係数の最適解の決定は，一般に実測値 $c(x, y, z, t)$ に対する上述の解 $C(x, y, z, t)$ の誤差を目的関数とし，この目的関数が最小となる分散係数を求めることである。誤差の表わし方としては，絶対誤差の和，絶対誤差の平方和及び相対誤差の和など[4]が考えられる。本研究においては最も一般的な絶対誤差の平方和を目的関数とする。

$$f(\alpha)=\sum_{i=1}^{n}(C_i-c_i)^2 \tag{4}$$

(4)式で定義した目的関数の最小化を行なう場合，Powell の共役方向法は制約条件のない最適化法であるので，負の分散係数を得る可能性が生じる。この欠点を補うため次のペナルティ関数[5]を導入する。

$$J_P=\sum_{i=1}^{n}P(\alpha_i) \qquad \begin{cases}P(\alpha_i)=0 & \alpha_i>0\\ P(\alpha_i)=|\alpha_i|\times10^8 & \alpha_i<0\end{cases} \tag{5}$$

(5)式のペナルティ関数を導入することにより，目的関数を次式のように再定義する。

$$J=f(\alpha)+J_p \tag{6}$$

4．分　散　実　験

4．1　一次元カラム分散実験　この実験装置は Fig. 1 に示すように，内径 $\phi=10.6$ cm，長

さL＝100.0 cmの透明アクリル製カラムから成り，多孔体が最下端から高さ80 cmに充填されている。多孔体として使用した試料は海砂(有効径0.075 cm，空隙率0.376)，ガラス球（平均径0.10 cm，空隙率0.383)，ボリスチレン球（平均径0.15 cm，空隙率0.367及び平均径0.13 cm，空隙率0.351）の3種4試料である。

実験は多孔体の空隙系に影響を及ぼす連行空気をできるだけ排除するため，カラムを満水状態にして上部から試料を徐々に充填し，規定長の多孔体を形成する。多孔体内の流れが定常状態に達した後，一定濃度$c=10.0\,g/l$の塩水をトレーサとして連続供給し，多孔体上面から26.0，46.0，66.0 cmの3点においてその濃度を測定する。塩分濃度は導電率計（計測技研製MK-106）を通して4チャンネルのデータレコーダ（ティアク製R-61）に記録し，パソコン（ティアク製PS-80）によりデータ処理を行なった。

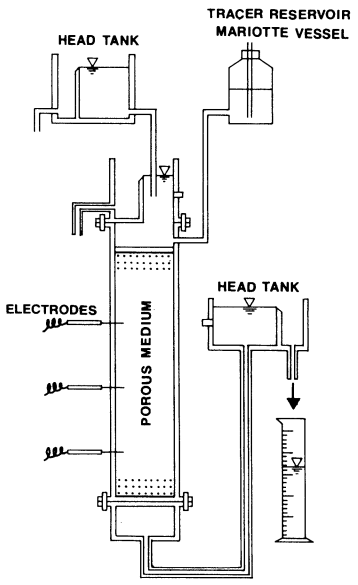

Fig. 1　Experimental Setup.

4．2　二次元平面分散実験　二次元平面分散実験は，高さ1.0 m，幅0.4 m，長さ4.5 mの両面透明アクリル張り鋼製二次元水路にカラム実験と同一の海砂を使用して高さ0.58 m，幅0.4 m，長さ2.0 mの被圧帯水層を設置し，定常一様流状態下で行なった。トレーサは濃度$c=20.0\,g/l$の塩水を用い，その濃度変化を帯水層上流面から20.0，60.0，100.0，140.0，180.0 cmに設けた観測井に直径6 mmの検出器を挿入し測定した。観測井は直径$\phi=20$ mmの有孔塩ビ製パイプからなる完全貫入井でほぼ直線上に配置されている。トレーサは瞬間放出とし，投入点は20.0 cmの位置にある観測井を用いた。なお測定機器はカラム実験と同一の装置である。

5．解析結果及び考察

5．1　一次元分散　本解析により得られた結果の一部をFig. 2に示す。同図は海砂を用いて水頭差Hを6段階に変化させて流速及び分散係数を最適同定したものである。流速に関しては実験値の相対濃度$c/c_0=0.5$の移動速度と同定された流速は一致し，同定値は的確であると考えられる。一方，分散係数に関してはほぼ満足する値が得られている。実験値はいずれも相対濃度$c/c_0=0.9$以上で到達時間が遅れる傾向を有するが，これはトレーサの一部が砂粒子の表面に吸着するためと思われる。Powell法は初期値の設定が適切でない場合，最適同定の探索効率が非常に低下するため，本解析においては次の方法により初期値を与えた。実験で得られる濃度の破過曲線は，一般に誤差曲線の積分形を呈することを考慮し流速の初期値には相対

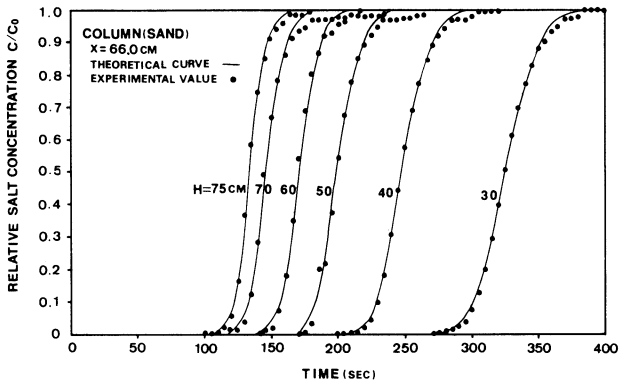

Fig. 2 Comparison of measured concentration histories with analytical solutions.

Table−1 Values of the Iterations in the identification of V and K_L

Iteration	V	K_L
Initial	0.68200	0.09500
1	0.78200	0.09500
2	0.58200	0.09500
3	0.66206	0.09500
4	0.64212	0.09500
5	0.60225	0.09500
6	0.65145	0.09500
7	0.66078	0.09500
8	0.65051	0.09500
9	0.65051	0.19500
10	0.65051	0.14500
11	0.65051	0.04500
12	0.65051	0.10133
13	0.65051	0.08867
14	0.65051	0.07602
15	0.65051	0.09145
16	0.63476	0.08967
17	0.66625	0.09322
18	0.65066	0.09147
19	0.65044	0.09116
20	0.65038	0.09081

濃度0.5の移動速度を与える。一方，分散係数の初期値は破過曲線の相対濃度0.16から0.84までの区間を分散帯と定義すると次式で与えられる。[6)]

$$K_L=((x-Vt_{0.16})/(t_{0.16})^{1/2} -(x-Vt_{0.84})/(t_{0.84})^{1/2})^2/8 \quad (7)$$

得られた初期値からPowell法によりパラメータが同定する過程をTable−1に示す。この解析例はポリスチレン球（平均径0.13 cm）からなる多孔体において，測定点x＝66.0 cmで得られたトレーサ放出後90秒から134秒までの2秒毎の23個のデータを用いた。本例では20回の反復で最適値に達しており，初期値である実測値との相対誤差は5％以内である。

同定された流速及び分散係数を(2)式に代入して得られる計算値と実測値とをTable−2に示す。両者の値の比較から流速，分散係数とも的確な値であることが認められる。

Table−2 Identification values by powell's method

```
STYRENE   HEAD=18.0CM   TIME=  90.0 - 134.0SEC
 INITIAL VALUE   VELOCITY= 0.6820    DISPERSION COE.= 0.0950
 IDENTI. VALUE   VELOCITY= 0.6504    DISPERSION COE.= 0.0908

                    ***** CALCULATION VALUE TABLE *****

 0.0009 0.0029 0.0079 0.0190 0.0405 0.0775 0.1343 0.2130 0.3113 0.4231
 0.5394 0.6504 0.7482 0.8280 0.8887 0.9316 0.9601 0.9779 0.9883 0.9941
 0.9972 0.9987 0.9994

                    ***** EXPERIMENTAL DATA TABLE *****

 0.0013 0.0031 0.0042 0.0144 0.0366 0.0789 0.1317 0.2106 0.3116 0.4307
 0.5416 0.6506 0.7465 0.8208 0.8847 0.9354 0.9618 0.9749 0.9944 1.0000
 1.0000 1.0000 1.0000

 ERROR SQUARE SUM= 0.00031
```

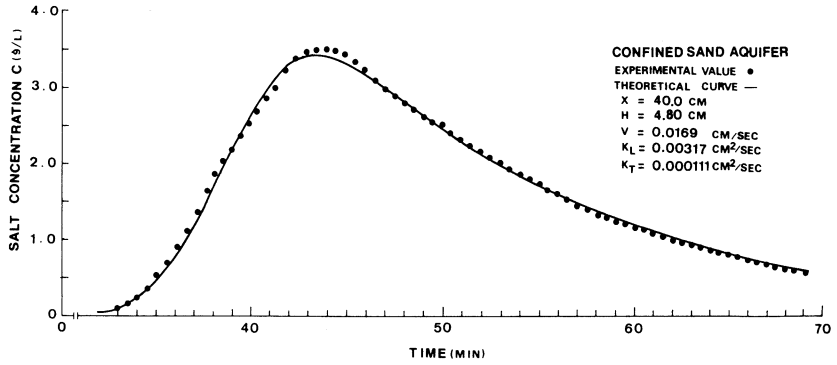

Fig. 3　Comparison of measured concentration history with analytical solution.

5．2　二次元平面分散　本解析で得られた結果の一例を Fig. 3 に示す。同図は砂帯水層において水頭差 $H=4.8$ cm の定常流に 5 秒間トレーサを点放出し，放出点から 40.0 cm にある観測井で測定されたものである。この解析例では流速，縦方向分散係数（主流方向）及び横方向分散係数（主流に直角方向）の 3 個のパラメータを同定している。3 個を同時に同定するためには異なる 3 地点の測定データまたは 1 地点での 3 個以上の測定データが必要となるが，ここでは同一地点の 74 個のデータを使用した。計算値と実測値との比較から流速及び縦・横方向分散係数は一次元分散と同様に的確に同定されていると考えられる。

本例の濃度破過曲線はピーク点に関して非対称形を呈している。一般に，トレーサを短時間放出した場合の破過曲線は矩形波が流下距離とともに変形し，正規分布形になることが知られているが，本実験ではトレーサが投入井から矩形波状でなく，指数関数的に逓減しながら流出するものと考えられる。(3)式においてはこの現象を考慮して減衰率 γ を導入している。Table 3 は水頭差を種々変化させて得られた分散係数を示している。縦方向分散係数は流速の増加にともない値が大きくなるが，横方向分散係数はほぼ一定値をとることが認められる。横方向分散係数は分子拡散係数（NaCl の場合 2.0×10^{-5}cm²/sec）[7] の約 10 倍の値をとるが，実験で使用した塩水が比較的高濃度のため主流に直角方向への移動が大きくなるものと思われる。

Table－3　Identification of V, K_L and K_T

水頭差 H(cm)	流速 V(cm／s)	縦方向分散係数 K_L(cm²／s)	横方向分散係数 K_T(cm²／s)	K_T/K_L
4.80	0.0169	0.00317	0.000111	0.0350
8.55	0.0357	0.00489	0.000188	0.0384
11.45	0.0404	0.00558	0.000230	0.0412
15.80	0.0538	0.00685	0.000187	0.0273
17.50	0.0627	0.00795	0.000196	0.0247
19.90	0.0693	0.00859	0.000180	0.0210

次に同定された一、二次元分散の流速と分散係数との相関関係を求める。分散係数は，粒子径，空隙径及び流速等に規定されるが，次元解析によりこの関係を求めると次の無次元量が得られる。

$$P_e = Vd/K_L \tag{8}$$

ここに，P_e：ペクレ数，d：粒子平均径。

本実験においてはこのペクレ数がほぼ一定値（$P_e \fallingdotseq 1.0$）となり，従って(8)式から分散係数と流速とは比例関係を有することがわかる。Fig. 4は一次元分散実験100データ，二次元分散実験20データをとりまとめたものである。同図から最小2乗近似により次の関係を得た。

$$K_L = 0.139\, V^{1.025}$$
$$(0.01 < V < 1.0 \text{cm/sec}) \tag{9}$$

上式から縦方向分散係数はほぼ流速に比例し，定数0.139は使用した試料の平均径に近い値を示している。この値は試料の空隙の幾何学的特性を示すものと解釈できる。

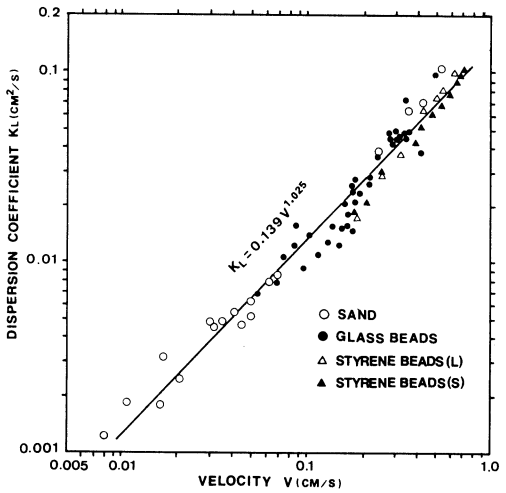

Fig. 4 Relation between velocity and dispersion coefficient.

6．結　　論

本研究において得られた結果を要約すると次のとおりである。

1）分散方程式とPowell法を組み合せることにより的確に分散係数値を推定できる。

2）縦方向分散係数は流速との間に次の関係が成立する。

$$K_L = 0.139\ V^{1.025} \quad (0.01 < V < 1.0 \text{ cm/sec})$$

3）横方向分散係数は縦方向分散係数の10^{-2}のオーダにある。

7．あ　と　が　き

以上ほぼ均一な粒径を有する試料を用いて，飽和多孔体における塩水分散の分散係数をPowell法により最適同定する方法を示した。その結果，一次元及び二次元平面分散に関して的確に分散係数を求め得ることが実証された。縦方向分散係数は，浸透流速が1.0 cm/sec以下の範囲においては浸透流速にほぼ比例することが確められた。流速が1.0 cm/secの場合本実験ではレイノルズ数$Re = 1.0$に相当する。この値は浸透流が層流であるための上限値に相当することから，上記の比例関係は層流域で成り立つものと考えられる。

この方法を実際の地下汚染の予測に用いる際に，汚染物質が構成粒子と化学反応または吸着

現象を生じる場合には流速及び分散係数を場の関数とし数値解析によらなければならない。しかし数値解析法の一法である重味付残差法を使用してTable－1の解を求める場合，計算時間が解析解の場合に比較して600倍程度要し，二，三次元解析を行うには計算効率を高める工夫が必要となる。今後はこうした定式化を含めて実際の汚染物質の挙動の予測に関する研究を進める所存である。

謝辞：本研究の遂行にあたり，終始御教示を頂いた本学土木工学科近藤俶郎教授，九州大学工学部水工土木学科上田年比古教授並びに神野健二助教授に深甚なる謝意を表します。なお，本研究の計算には九州大学大型計算機センター並びに室蘭工業大学情報処理教育センターの電子計算機を使用したことを付記する。

（昭和59年5月19日　受理）

参　考　文　献

1）Pinder, G. F., W. G. Gray：Finite Element Simulation in Surface and Subsurface Hydrology, Academic Press, 1977

2）河野伊一郎，西垣誠，田中慎一：飽和・不飽和浸透流における非定常塩水化現象の有限要素法解析，土木学会論文報告集，No. 331，pp. 133-141，1983

3）Box, M. J., D. Davies（黒田　充訳）：非線形最適化の技法，培風館，pp. 42-47，1972

4）小林慎太郎，丸山利輔：Powellの共役方向法によるタンクモデル定数の探索，農業土木学会論文集，第65号，pp. 42-47，1976

5）前出4）

6）Fried, J. J., M. A. Combarnous：Dispersion in Porous Media, Advances in Hydroscience, Vol. 7, pp. 169-282, 1971

7）福井正美，桂山幸典：飽和多孔性媒質内における分子の拡散および分散現象に関する研究，土木学会論文報告集，No. 246, pp. 73-82,1976