

岩盤割れ目ネットワークモデルを用いた地下水流動評価に向けた 合理的な割れ目の水理パラメータ推定手法

A Rational Fracture Hydraulic Parameter Estimation Method for Groundwater Flow Assessment Using Discrete Fracture Network Model

石橋 正祐紀

要 約

割れ目系岩盤の地下水流動・物質移行評価では、割れ目ネットワーク (DFN) モデルが活用されている。モデル構築には、割れ目の透水量係数を設定する必要がある。地層処分事業においては、近年、割れ目の大きさも考慮した確率分布を用いた透水量係数の設定方法が提唱されており、未知パラメータ推定の計算量が増加している。また、割れ目の透水性に関するパラメータ設定は解析担当者の主観に依存する部分が多く、客観性に課題がある。本報では、これらの課題解決に向け、割れ目の透水量係数に関する各種パラメータの影響を評価し、その影響も考慮したベイズ最適化の適用手法を検討した。その後、数値実験による検証を実施し、改良したベイズ最適化を適用することで、従来の客観性の高い手法であるグリッドサーチ法では285,000回程度の計算量が必要な検討を、100回程度で達成できることを検証した。

目 次

- I. はじめに
- II. 実施内容
- III. 水理パラメータが解析結果に与える影響評価
- IV. 水理パラメータ推定フローの検討
- V. 数値実験による適用可能性の検証
- VI. おわりに

I. はじめに

深成岩類などの硬岩は、割れ目などの不連続構造が選択的な水みちとして機能する。このような岩盤は、水理学的に亀裂性媒体として示され、地下水や地下環境中の物質移動を評価する上では、不均質な割れ目分布を考慮することが重要となる¹⁾。特に、放射性廃棄物の地層処分の分野では、地下300m以深に処分する放射性核種の移行特性を評価することが重要となり、割れ目分布を直接的にモデル化できる割れ目ネットワーク (DFN) モデルの活用が有効である²⁾。DFNモデルは、割れ目の中心位置、方位、大きさなどの幾何パラメータや割れ目の透水量係数 (水理パラメータ) を確率論的に表現するモデルである。そのため、DFNモデルを構築するためには、各種確率分布のパラメータを設定する必要がある。

幾何パラメータについては、既存の研究により、原位置情報から算術計算により一義的に推定できることが示されている³⁾。しかし、水理パラメータについては、調査により全ての割れ目個々の透水量係数は取得できないことから、解析的に推定される⁴⁾。具体的には、原位置における複数の水理試験等で取得した透水係数分布や湧水量分布を再現できるパラメータの組合せが推定されるが、解析を行う技術者の知識や経験に依存しており、説明の客観性の観点で課題がある。説明の客観性を高める方法としては、想定されるパラメータ範囲を網羅的に探索する方法 (グリッドサーチ法) や一部の探索結果に基づき、解析者によって推定範囲を絞り込み探索する方法⁴⁾があるが、これらの方法は解析数量が膨大となる。

さらに、従来は、割れ目の透水量係数分布は対数正規分布を仮定されていたことから、推定パラメータは2つ (対数平均値と対数標準偏差) であったが、近年、式 (1) に示すように割れ目が大きいほど透水性が高いという概念が適用されるようになり^{4), 5)}、パラメータ C が新たに付加された。その結果、グリッドサーチ法などでは更に推定時間が膨大になるといった実務上の課題がある。

$$T = \text{lognorm}(\mu, \sigma) \times r^C \dots \dots \dots (1)$$

キーワード : 割れ目ネットワークモデル, 水理学的パラメータ, ベイズ最適化, 地層処分

Keywords : discrete fracture network model, hydraulic parameters, Bayesian optimization, geological disposal of radioactive waste

ここで、 T は割れ目個々の透水量係数 (m^2/s)、 μ は対数平均、 σ は対数標準偏差、 r は個々の割れ目半径[m]、 C は割れ目半径との関係性を示す定数を示す。

そこで、本報では、解析者の主観によらず、少ない解析数量で水理学的パラメータを推定する方法を検討した。具体的には、効率的かつ客観的に3つのパラメータを推定する方法として、機械学習のハイパーパラメータ推定に利用されるベイズ最適化⁶⁾を適用することとした。

II. 実施内容

ベイズ最適化を活用した水理パラメータの推定方法の検討として、水理パラメータが解析結果（ここでは、透水係数分布）に与える影響評価（III章）、水理パラメータの推定フローの検討（IV章）、数値実験による適用可能性の検証（V章）を実施した。

III章では、水理パラメータが解析結果に与える影響を評価するため、水理パラメータの推定を水理試験解析⁷⁾によって実施した。具体的には、岐阜県瑞浪市の日本原子力研究開発機構 東濃地科学センター 超深地層研究所の地下500m坑道で取得された原位置の割れ目情報に基づくパラメータ（Table 2）を活用し⁴⁾、割れ目分布のみを再現したDFNモデル（以下、GeoDFNモデル）を構築する。この際、GeoDFNモデルは、確率的ばらつきを考慮した複数のモデルを10構築する（以下、リアライゼーションと示す）。その後、Fig.1に示すモデル領域とTable 1に示す諸条件を用いた水理試験解析を実施した。水理試験解析では、式（1）に示す μ 値、 σ 値、 C 値が異なる分布で割れ目の透水量係数を設定し、各パラメータの変化が与える透水量係数に与える影響を評価する。なお、各パラメータそのもの影響を評価するため、Table 1に示す「割れ目の透水量係数の上・下限値」は設定していない。解析コードはConnectFlow 12.3⁸⁾を用いた。

IV章では、水理パラメータとその結果として出力される透水係数分布の関係性を考慮したベイズ最適化の適用フローを検討した。ベイズ最適化は、目的関数をガウス過程回帰により確率分布としてモデル化し、その分布を更新しながら最適解を探索する手法である⁶⁾。ベイズ最適化では、最適解の探索に際して、推定値分布（代理モデル）と各点の分散を用いた最も評価点が良いパラメータ組合せ（説明変数）の出力、出力パラメータにおける実測値追加、新たな評価点が良い説明変数の出力、を繰り返す。ベイズ最適化は説明変数が多い場合には、計算容量が大きくなるなどの難点も要するが、ここで検証する水理パラメータの推定に際しては、3パラメータ程度であり効率的に最適解の推定が可能と考えられる。

V章では、検討したベイズ最適化の適用フローの適用可能性の検証として、数値実験を実施した。検証には、手法の柔軟性も合わせて検証するために、既検討として適用実績があ

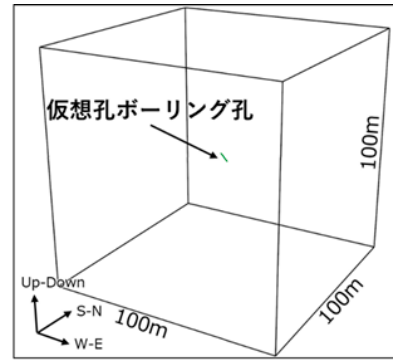


Fig.1 モデル化領域と仮想ボーリング孔の配置 (Modeling Region and Layout of Virtual Borehole)

Table 1 水理試験解析の諸条件 (Conditions for Virtual Hydraulic Test Analysis)

項目	仕様
モデル化領域	100m×100m×100m ※200m×200m×200mでDFNモデルを構築し、中央部から対象領域を抜き出し構築（領域縁辺部の割れ目密度低下を抑制するため）
仮想水理試験解析に用いた仮想孔の仕様	長さ：9.14m，方位：N9.58°W，傾斜：0° ※長さ・方位は、比較対象とするボーリング孔の水理試験区間の平均値を算出して設定
境界条件	外側境界：固定水頭（1.0m） 仮想孔：固定水頭（0.0m）
割れ目の透水量係数の上・下限値	下限値：1E-11m ² /s， 上限値：1E-4m ² /s ※解析の収束性の向上を図るために上下限値を設定（上下限値を越える割れ目については、透水量係数を上下限値に再設定）

Table 2 DFNモデルの幾何学パラメータセット※ (Geometric Parameter Set of DFN Models)

卓越方位 セット	傾斜方位 ／傾斜 [deg.]	Fisher 定数 [-]	割れ目長さ 〔最小長さ[m]， べき指数[-〕	三次元 割れ目密度 [m ² /m ³]
Set1	202.9/ 87.8	18.5	2.0, 3.1	0.43
Set 2	150.6/ 89.6	17.8	2.0, 3.4	0.13
Set 3	80.7/ 86.2	15.3	2.0, 4.7	0.05
Set 4	210.7/ 30.3	12.1	2.0, 3.3	0.08

※割れ目の傾斜方位は、北向き0°とした時計回りの角度を示し、傾斜は水平面から下向きの角度を示す。

り、かつ割れ目の透水性の推定が困難なモデル化方法⁸⁾を検証事例とすることとした。具体的には、DFNモデルの割れ目の透水量係数に上下限值(閾値)を設定するモデル化手法⁸⁾を適用した。透水量係数に閾値を設定するモデル化手法では、高透水部は閾値を設定しない場合に比較して低い値に、低透水部は閾値を設定しない場合より高い値となり、パラメータの推定が難しいモデル化手法である⁸⁾。

Ⅲ. 水理パラメータが解析結果に与える影響評価

水理パラメータの特徴把握に際しては、 μ 値は-20.0 乗～-10.0 乗の 5 ケース、 σ 値は 0.0 ～ 3.0 の 5 ケース、 C 値は 0.0 ～ 10.0 の 5 ケース(合計 125 ケース)の水理試験解析を実施し、ボーリング孔の湧水量から水理公式の一つである Thiem の式で透水性係数を算出し、その関係性を整理した。

水理試験解析から得られる、水理パラメータ(μ 値、 σ 値、 C 値)と透水性係数の関係について、その一例を Fig.2, 3 に示す。また、水理パラメータのうち 2 つを固定し、着目するパラメータを変化させたときの透水性係数の傾きについて整理

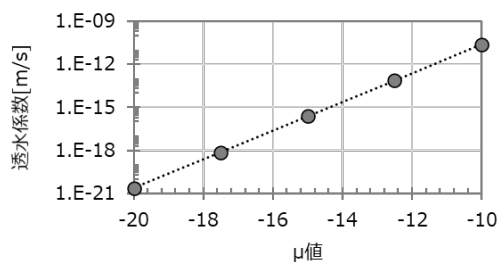


Fig.2 μ 値と透水性係数の関係 ($\sigma = 0.0$, $C = 0.0$ の例)
(Relationship between μ Value and Hydraulic Conductivity
(example for $\sigma = 0.0$ and $C = 0.0$))

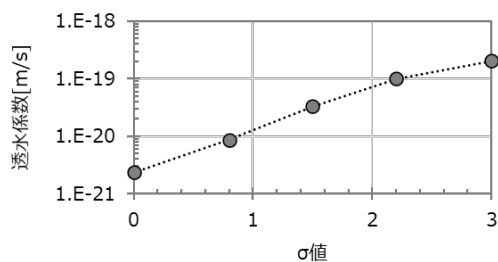


Fig.3 σ 値と透水性係数の関係 ($\mu = -20$, $C = 0.0$ の例)
(Relationship between C Value and Hydraulic Conductivity
(example of $\mu = -20$, $C = 0.0$))

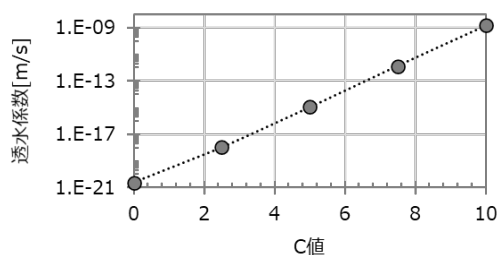


Fig.4 C 値と透水性係数の関係 ($\mu = -20$, $C = 0.0$ の例)
(Relationship between σ Value and Hydraulic Conductivity
(example for $\mu = -20$, $\sigma = 0.0$))

した結果を Table 3 ～ 5 に示す。

Fig.2, 3, Table 3 ～ 5 に示すように、何れも、着目するパラメータ値の増加に伴い透水性係数が増加する傾向が認められる。また、 μ 値に着目すると、 σ 値、 C 値が異なっても、透水性係数と μ 値は傾き 1.0 の線形性があることが確認できる (Table 3)。一方、 σ 値と C 値については、線形関係は認められるが、水理パラメータの組合せによって、傾きの大きさが変化する (Table 4, 5)。これは、 σ 値と C 値は何れも透水性係数のばらつきに寄与するパラメータであることから、割れ目の分布位置や割れ目半径分布によって、水理試験解析における透水性係数に対する影響が異なることが要因と考えられる。

以上より、 σ 値、 C 値については、一般性を得ることは困難と考えられるが、 μ 値については他のパラメータに寄らず、乗算により線形補間が可能であると判断できる。すなわち、 μ 値については、解析実施に依らない補間によりパラメータセット推定における解析数量の削減に寄与することができるパラメータであると評価できる。

Ⅳ. 水理パラメータ推定フローの検討

水理パラメータの水理試験解析結果に与える影響の検討

Table 3 μ 値 (-20.0～-10.0 乗)と透水性係数の関係 (傾き)
(Slope of Hydraulic Conductivity with Respect to Change in μ)

		C 値				
		0.0	2.5	5	7.5	10.0
σ 値	0.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	0.8	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	1.5	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	2.2	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
	3.0	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0

Table 4 σ 値 (0.0 ～ 3.0)と透水性係数の関係 (傾き)
(Slope of Hydraulic Conductivity with Respect to Change in σ)

		C 値				
		0.0	2.5	5	7.5	10.0
μ 値	-10.0	1.5	1.6	1.4	0.6	0.8
	-12.5	1.5	1.6	1.4	1.3	0.0
	-15.0	1.5	1.6	1.4	1.3	0.6
	-17.5	1.5	1.6	1.4	1.3	0.1
	-20.0	1.5	1.6	1.4	1.3	0.1

Table 5 C 値 (0.0 ～ 10.0)と透水性係数の関係 (傾き)
(Slope of Hydraulic Conductivity with Respect to Change in C)

		σ 値				
		0.0	0.8	1.5	2.2	3.0
μ 値	-10.0	2.6	2.6	2.5	2.5	2.3
	-12.5	2.7	2.7	2.7	2.4	2.4
	-15.0	2.7	2.7	2.7	2.4	2.6
	-17.5	2.7	2.7	2.7	2.5	2.4
	-20.0	2.7	2.7	2.7	2.5	2.4

結果から、 μ 値については線形補間が可能であることが明らかとなった。そこで、このベイズ最適化の適用フローにこの特徴を加味し、探索性能の向上を検討した。検討したパラメータ推定フローを Fig.5 に示す。

推定フローの全体像は、まず割れ目の分布や形状などの幾何特性を確率的に再現する DFN モデル (GeoDFN モデル) を構築する。その後、水理パラメータの初期解析パラメータを決定する。この際、本検討では、V 章に示すように、推定範囲の最大・最小値と中央値 (9 パラメータ組合せ) を初期解析パラメータとして採用した。次に、採用した水理パラメータの組合せの確率分布に基づき、割れ目モデルに透水量係数を設定した DFN モデル (HydroDFN モデル) を構築する。構築した HydroDFN モデルを用いて水理試験解析を 10 リアライゼーション実施し、透水係数分布を出力する。その後、正解データ (または実測値) の透水係数分布と解析結果の透水係数分布の誤差として、二乗平均平方根誤差 (RMSE) を算出する。これを初期パラメータ組合せ全てに実施し、初期値としての RMSE を整理する。

ベイズ最適化の実施に際しては、上記 RMSE を目的変数、その際の各種パラメータ (μ 値, σ 値, C 値) を説明変数とし、ガウス過程回帰による誤差分布予測を実施した (代理モデル; RMSE 分布を構築した)。その後、獲得関数としては、適用実績の多い EI 戦略⁶⁾ を用い、RMSE が最小となるパラメータ組合せを探索する。

また、探索性能の向上を目的として、III章で確認された μ 値の特徴を用いて、任意の解析数段階 (本事例では 5 回毎とした) までの全ての計算結果を用いて、 μ 値の乗算補正計算を実施する処理を追加することとした。具体的には、各段階までの水理試験解析で出力した透水係数分布に対し補正係数 (α) を乗じ、乗じた透水係数分布と正解データ (または実測値) との RMSE を算出する。 α については、RMSE が最小となる値を最小二乗法で推定して算出する。なお、最小二乗

法では、式 (2) を最小とする α を求める。

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n (k_{act} - \alpha * k_{analysis})^2}{n}} \dots \dots (2)$$

ここで、 n はリアライゼーション数、 k_{act} は正解データ (または実測値) の透水係数、 $k_{analysis}$ は解析結果の透水係数を示す。

本検討では、これらの水理試験解析を 100 回 (100 個のパラメータ組合せ分) 繰り返すことで、最適なパラメータ組合せを推定することとした。

V. 数値実験による適用可能性の検証

任意の水理パラメータ組合せで構築した HydroDFN モデルの水理試験解析から求められる透水係数分布を正解データとし、パラメータ推定フローの妥当性を検証する。数値実験の正解パラメータ組合せのケースとしては、ケース A (μ 値 = -11, σ 値 = 1.0, C 値 = 0.0) とケース B (μ 値 = -16.3, σ 値 = 2.3, C 値 = 6.2) を設けた (Fig.6, 7)。ケース A については、正解パラメータ組合せが初期パラメータ組合せに近く、かつ透水係数分布のばらつきが σ 値のみで決定され、割れ目長さによる影響を受けないシンプルなケースとして設定した (Fig.6)。ケース B については、正解パラメータ組合せが初期パラメータから離れており、かつ透水係数分布のばらつきが σ 値のみならず C 値 (割れ目の長さ分布にも影響を受けるパラメータ) によっても変化することから、推

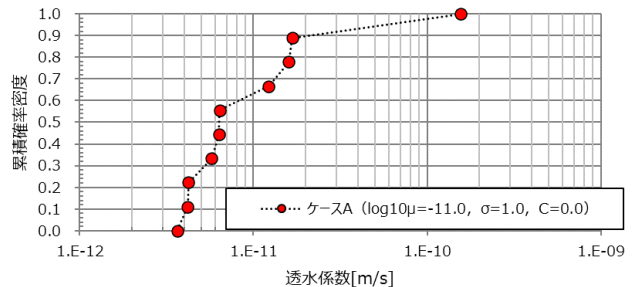


Fig.6 数値実験におけるケース A の透水係数分布 (Distribution of Hydraulic Conductivity for Numerical Experiments (Case A))

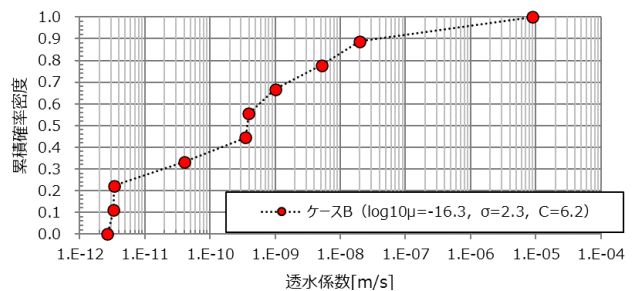


Fig.7 数値実験におけるケース B の透水係数分布 (Distribution of Hydraulic Conductivity for Numerical Experiments (Case B))

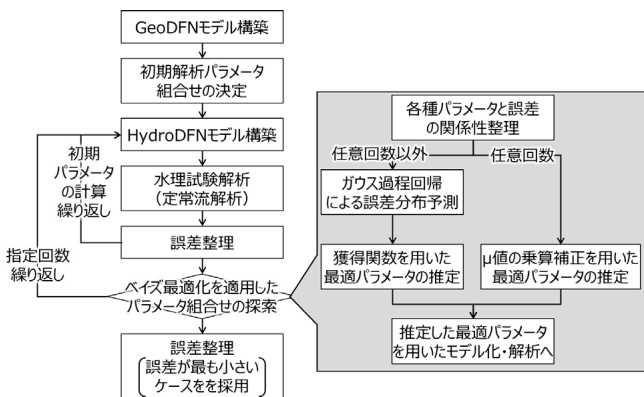


Fig.5 μ 値による透水係数補正を加味したベイズ最適化を用いたパラメータ推定フロー (Parameter Estimation Flow Using Bayesian Optimization Taking into Account the Hydraulic Conductivity Correction by μ Value)

定が困難な複雑なケースとして設定した (Fig. 7)。なお、構築した透水係数分布は、各ケースについて 10 リアライゼーション計算し、それぞれを累積確率密度で整理した。

初期パラメータ組合せとしては、経験的に選定されるパラメータ範囲の最大値、最小値および中央値の合計 9 点 (μ 値は -10, -20, σ 値は, 3.0, 0.0, C 値は 9.0, 0.0 が最大・最小値) を設定した。初期パラメータ組合せによる RMSE の初期分布 (代理モデル) を Fig.8 に示す。初期分布からの推定結果としては、ケース A については、図の左側 (μ 値が 15 付近, σ 値, C 値が 0 付近) で最適なパラメータ組合せがある可能性を示唆し、ケース B については、図の右下から左上の奥側の範囲に最適なパラメータ組合せがある可能性を示唆する。

この初期分布を用いて、ベイズ最適化を 100 回繰り返した結果を Fig.9 に示す。なお、ベイズ最適化に際して μ 値, σ 値, C 値それぞれ, 0.1 間隔で探索することとした。このため、グリッドサーチ法を適用した場合, 101 (μ 値のケース数) \times 31 (σ 値のケース数) \times 91 (C 値のケース数) = 284,921 ケースの計算が必要となる。ベイズ最適化は、ガウス過程回帰で構築した値の分布を代理モデルとして活用することから、実際に水理試験解析を実施したパラメータ組合せ (各図の灰色点) 周辺を球状に補間する。そのため、解析点が少ない範囲では RMSE 値が球状に補間されるが、初期の代理モデル (Fig.8) に対してベイズ最適化後の代理モデルでは計算結果の追加により RMSE 分布が詳細化されていることが分かる。また、探索点は RMSE の低い範囲に集中する傾向があり、当該手法により選択的に RMSE が小さい箇所の探索が行えていることが分かる。

この代理モデルの構築過程における、最小 RMSE の変化を Fig.10 に示す。ケース A, ケース B ともに、ベイズ最適化の繰り返しにより、段階的に最小 RMSE が低下していることが確認できる。この結果、ケース A については、 μ 値補正を実施している 40 回目の探索において (Fig.10 左)、ケース B についても、 μ 値補正を実施している 85 回目の探索において最も小さい誤差のパラメータ組合せに到達している (Fig.10 右)。これは、 μ 値補正機能の付加により、この回数までの単純なベイズ最適化では探索されない可能性のあるパラメータ組合せを抽出した結果と推察され、 μ 値補正の有効性が確認できたと考えられる。

推定したパラメータ組合せによる透水係数分布と正解データの透水係数分布の比較結果を Fig.11 に示す。推定したパラメータ組合せは、ケース A で μ 値 = -11.0, σ 値 = 1.0, C 値 = 0.0 (RMSE = 0.0), ケース B で μ 値 = -16.2, σ 値 = 2.3, C 値 = 6.1 (RMSE = 0.01) となった。ケース B については、やや正解データとの乖離が認められるが、何れのケースも、正解データと整合しており、グラフ化した結果では、正解データとの差を確認することが困難である (Fig.11)。

以上の結果から、検討したパラメータ推定フローを用いることで、数値実験上のデータに対しては、 μ 値補正を施すことで 100 回程度のベイズ最適化の実施で高い精度でパラメータ組合せを推定できることが示唆されたと考えられる。

VI. おわりに

割れ目が主たる水みちとなる岩盤の地下水流動・物質移行解析で用いられる DFN モデルの透水パラメータについて、解析者の判断 (主観) によらず効率的かつ客観的に 3 つの水

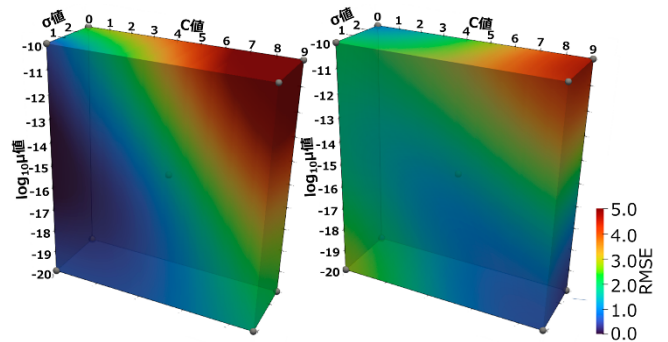


Fig.8 初期パラメータ (9 ケース) の解析結果に基づく正解データとの推定誤差 (RMSE) 分布 (左: ケース A, 右: ケース B)

(Distribution of Estimation RMSE with Correct Data Based on Analysis of Initial Parameters (Left: Case A, Right: Case B))

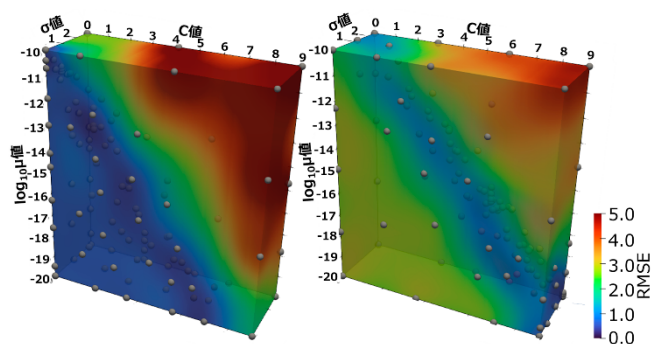


Fig.9 ベイズ最適化を 100 回繰り返した差異の誤差 (RMSE) 分布 (左: ケース A, 右: ケース B)

(Distribution of the RMSE after 100 Iterations of Bayesian Optimization (left: Case A, right: Case B))

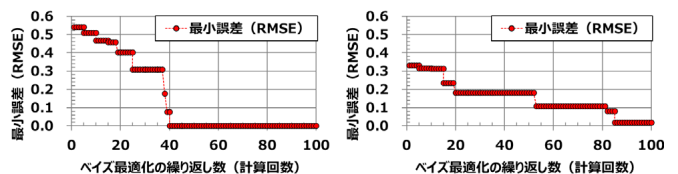


Fig.10 ベイズ最適化の繰り返し回数に対する最小誤差 (RMSE) の変遷 (左: ケース A, 右: ケース B)

(Transition of the Minimum Error (RMSE) for the Number of Bayesian Optimization Iterations (left: Case A, right: Case B))

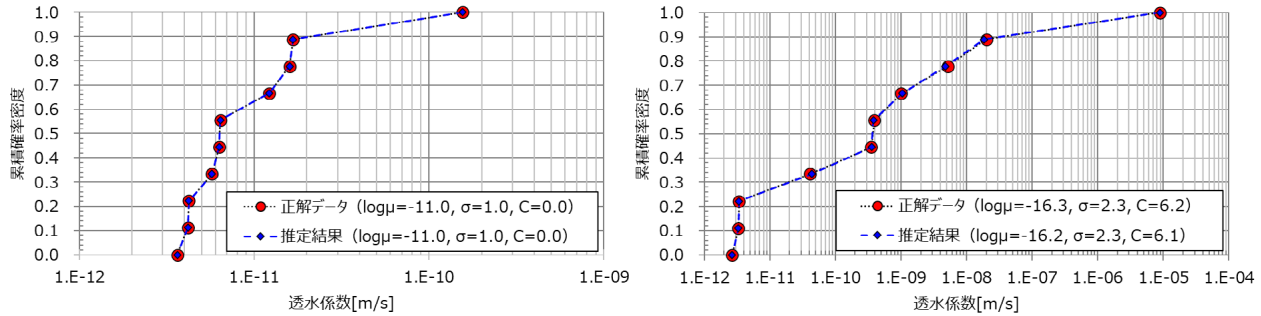


Fig.11 推定したパラメータ組合せと正解データの透水係数分布の比較結果 (左：ケース A, 右：ケース B)

(Comparison of Hydraulic Conductivity Distribution of Estimated Parameter Combinations and of Correct Data (left: Case A, right: Case B))

理パラメータを推定する方法について検討した。その結果、従来の客観性が高いグリッドサーチ法では 285,000 ケース程度の解析計算が必要なパラメータ区間に対して、 μ 値補正を付与した改良したベイズ最適化を適用することで、解析者の主観に関わらず十分な精度、かつ少ない解析数量 (100 ケース程度) で自動的に水理パラメータが推定できる可能性が示唆された。一方、数値実験において少なからず正解データとの乖離が認められた。今後、水理パラメータの推定結果の誤差が、坑道への湧水量解析や物質移行解析などへの影響を評価し、当該手法によるパラメータ推定の妥当性や有効性を検証していく。

参考文献

1) 吉田ほか；深部花崗岩中の割れ目解析-岐阜県東濃地域に分布する花崗岩類を例にして-, 応用地質, 30, 3, 1989, pp.11-22.
 2) JNC；わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の

技術的信頼性, JNC TN1400 99-020, 1999.

3) Munier et al ; Statistical analysis of fracture data, adapted for modelling Discrete Fracture Networks, SKB R-04-66, 2004.
 4) Onoe et al ; Development of modeling methodology for hydrogeological heterogeneity of the deep fractured granite in Japan, Int. J. Rock Mech. Min. Sci., 114, 104737, 2021.
 5) SKB ; Site description of Forsmark at completion of the site investigation phase, SKB TR-08-05, 2008.
 6) Snoek et al ; Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms, Advances in Neural Information Processing Systems, 2012.
 7) 石橋ほか;割れ目ネットワークモデルにおける割れ目長さを考慮した透水量係数の推定, 令和 4 年度日本応用地質学会研究発表会講演論文集, 2022, pp.173-174.
 8) Jacobs ; ConnectFlow Technical Summary Version12.3, https://www.connectflow.com/resources/docs/conflow_technical.pdf (2022 年 2 月 7 日閲覧)

A Rational Fracture Hydraulic Parameter Estimation Method for Groundwater Flow Assessment Using Discrete Fracture Network Model

Masayuki Ishibashi

A fracture network (DFN) model is used to evaluate groundwater flow and mass transport in fractured rock mass. In constructing the DFN model, it is necessary to set the hydraulic conductivity coefficients for fractures. Recently, a method for setting these coefficients using a probability distribution that takes fracture size into account was proposed for geological disposal projects, and the calculation cost for estimation tends to increase with the increase in the number of unknown parameters. In addition, the setting parameters for the fracture permeability depend on the skill of the analyst. In this paper, to solve these problems, we evaluate the influence of various parameters on fracture permeability coefficients and investigate a method using Bayesian optimization considering the influence of the parameters. Numerical experiments are then conducted to verify the results. It is demonstrated that the improved Bayesian optimization can be performed about 100 times, while the conventional grid search method, which is a highly objective method, requires calculation done about 285,000 times.