

2次フィルターによる定係数一次元確率移流分散方程式の濃度予測について
On the Prediction of the Concentration Distribution
of One-Dimensional Constant Coefficient Stochastic Convective-Dispersion Equation
Based on the Second-Order Filter

九州大学大学院	吉 永 宙 司	Hiroshi YOSHINAGA
九州大学工学部	河 村 明	Akira KAWAMURA
九州大学工学部	神 野 健 二	Kenji JINNO
九州大学工学部	上 田 年比古	Toshihiko UEDA

Two methods, one uses the second-order filter and the other the extended Kalman filter are proposed, which are used to predict the concentration distribution and to identify the parameters of the one-dimensional stochastic convective-dispersion equation is discussed. It is shown that the proposed methods identify the parameters effectively and predict the concentration distribution accurately. It is clarified that the computational time for the second-order filter requires about two times longer than that for the extended Kalman filter, whereas the accuracy of prediction of the second-order filter is almost the same as that of the extended Kalman filter.

Keyword: concentration distribution, convective-dispersion equation, second-order filter, parameter identification

1. はじめに

移流分散現象を考える場合、従来、確率変動項は無視され確定論的アプローチがなされて、初期条件、境界条件および物理パラメータは既知情報として取扱われている。また移流分散現象の濃度の観測データについては、空間的に任意に設置された観測点において経時観測が行われているが、得られた観測情報は移流分散方程式の解析解、数値解の吟味に使われる程度である¹⁾。著者らは、上述の問題の解決へのアプローチとして、確率移流分散方程式をフーリエ級数展開を用いてフーリエ係数に関する連立常微分方程式に変形し、次いで、初期条件、境界条件および物理パラメータすなわち物理量(流速、分散係数、一次反応係数)は不明であるとし、空間的に任意に設置された観測点からの定時観測データを用いて、各時点毎に物理量およびフーリエ係数を拡張カルマンフィルターにより逐次同定しながら濃度予測を行う手法を提案している^{2)~4)}。本論文ではさらに、テイラー級数展開の2次項までを考慮して、カルマンフィルターの連続時間非線形状態方程式をbias correctionと呼ばれるベクトル外力関数で補正する2次フィルター^{5)~7)}により、定係数一次元確率移流分散方程式の濃度予測を行う手法を定式化する。次いで、本手法および1次フィルター(拡張カルマンフィルター)を模擬発生データに適用し、物理量の観測の有無の効果、組み込むべきフーリエ級数の項数および、観測情報の入手時間間隔の影響と濃度予測精度との関係などについて検討を行い、両者のフィルターの特性について比較したものである。

2. 濃度予測手法の定式化

2.1. 2次フィルターの算定^{5)~7)}

2次フィルターは式(1)で示される連続時間非線形状態方程式にしたがって遷移するシステム状態量 X を推定するのに適用される理論で、本研究の濃度予測の問題では、 X は線形の観測方程式(2)を通してある離散時間間隔ごとに観測される。

$$dX/dt=f(X(t))+v(t) \quad (1) \quad y(k)=H(k)X(k)+w(k) \quad (2)$$

ここに、 t : 時間を表す変数 k : 観測量の得られる時点 X : システムの状態量ベクトル

f : ベクトル X の非線形ベクトル関数 y : 観測量ベクトル H : 既知の観測行列

v : システム雑音ベクトルで、平均値0、共分散行列 V の正規性白色雑音

w : 観測雑音ベクトルで、平均値0、共分散行列 W の正規性白色雑音

次にある時刻 $t(k < t \leq k+1)$ において、 $t=k$ までの観測量を用いて得られるシステム状態量 X の最適推定値およびその推定誤差共分散行列をそれぞれ $\hat{X}(t|k)$ 、 $P(t|k)$ と表示すると、これらは次の微分方程式を解くことによって求められる。

$$d\hat{X}(t|k)/dt=f(\hat{X}(t|k))+\mu(t) \quad (3)$$

$$dP(t|k)/dt=A(\hat{X}(t|k))P(t|k)+P(t|k)A^T(\hat{X}(t|k))+V(t) \quad (4)$$

$$\text{ここに、} \mu : \text{bias correctionで、} \mu(t)=(1/2)\sum_i \Phi_i \text{tr}[B_i(\hat{X}(t|k))P(t|k)] \quad (5)$$

Φ_i : i 番目の要素が1、その他の要素が0であるベクトル $\text{tr}(\cdot)$: 行列のトレース

B_i : ベクトル関数 f のHessian行列 A : ベクトル関数 f のJacobian行列 T : 転置記号

観測量 y が $t=k+1$ で得られるとすれば、 $\hat{X}(k+1|k+1)$ および $P(k+1|k+1)$ はカルマンフィルター理論により次式で求められる。

$$\hat{X}(k+1|k+1)=\hat{X}(k+1|k)+K(k+1)[y(k+1)-H(k+1)\hat{X}(k+1|k)] \quad (6)$$

$$P(k+1|k+1)=[I-K(k+1)H(k+1)]P(k+1|k) \quad (7)$$

ここに、 I : 単位行列 K : カルマン・ゲイン・マトリックスで、

$$K(k+1)=P(k+1|k)H^T(k+1)[H(k+1)P(k+1|k)H^T(k+1)+W(k+1)]^{-1} \quad (8)$$

なお、1次フィルター(拡張カルマンフィルター)の場合は $\mu(t)=0$ である。

2. 2. 2次フィルターによる濃度予測計算の定式化

本論文では次式に示すような定係数一次元確率移流分散方程式を考えることにする。

$$\partial C(x,t)/\partial t+u\partial C(x,t)/\partial x=D\partial^2 C(x,t)/\partial x^2-\gamma C(x,t)+\epsilon(x,t) \quad (9)$$

ここに、 C : 濃度(g/m³) u : 流速(m/day) D : 分散係数(m²/day) γ : 一次反応係数(1/day)

x : 距離(m) t : 時刻(day) ϵ : 平均値0、分散 σ_{ϵ}^2 の正規性白色雑音(g/(m³day))

なお物理量 u , D , γ は時空間的に一定の場合を想定している。

さて、式(9)には右辺第3項に確率項が含まれており、また初期条件、境界条件および物理量が未知の場合には、式(9)を解析的に解くことは不可能である。また通常の差分法や有限要素法をでは、移流項が分散項より卓越するときには移流項の離散化誤差が大きく影響し、不確実性が増大することが予想される⁹⁾。したがってここでは、空間的に任意に設置された観測点より得られる情報を基に物理量を推定しつつ濃度 C を予測することを考える。式(9)を常微分方程式に直すために濃度 $C(x,t)$ および雑音項 $\epsilon(x,t)$ を次式のように変数 x に関してフーリエ級数に展開し、任意の波数のフーリエ係数について解析を行う。

$$C(x,t)=B_0(t)+\sum_{m=1}^M[A_m(t)\sin(2\pi mx/\ell)+B_m(t)\cos(2\pi mx/\ell)] \quad (10)$$

$$\epsilon(x,t)=\sum_{m=1}^M[E_m(t)\sin(2\pi mx/\ell)+F_m(t)\cos(2\pi mx/\ell)] \quad (11)$$

ここに、 B_0 : 濃度 C の平均値に相当するフーリエ係数(g/m³) M : 取り込むフーリエ級数の項数

A_m, B_m : 濃度 C の波数 m に関するフーリエ係数(g/m³) ℓ : 基本波長

E_m, F_m : ϵ の波数 m に関するフーリエ係数(g/m³)

式(10), (11)を式(9)に代入すると、 $B_0(t)$ および波数 m のフーリエ係数に関して次式のような連立常微分方程式が得られる。

$$\begin{bmatrix} dB_0/dt \\ dA_m/dt \\ dB_m/dt \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\gamma & 0 & 0 \\ 0 & -R_m & Q_m \\ 0 & -Q_m & -R_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_0(t) \\ A_m(t) \\ B_m(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ E_m(t) \\ F_m(t) \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$\text{ここに、} R_m = D(2\pi m/\ell)^2 + \gamma \quad (13) \quad Q_m = u(2\pi m/\ell) \quad (14)$$

ここでは、カルマンフィルタにおけるシステム状態量として式(9)の物理量 u , D , γ および式(10)のフーリエ係数 B_0 , A_m , B_m ($m=1\sim M$)をまとめて X とおく。すなわち、

$$X(t) = [u \ D \ \gamma \ B_0(t) \ A_1(t) \ B_1(t) \ \cdots \ A_M(t) \ B_M(t)]^T \quad (15)$$

ここで、式(9)の u , D , γ の値は時空間的に一定の場合を考えているので、これらに対する遷移方程式は次式となる。 $du/dt=0$, $dD/dt=0$, $d\gamma/dt=0$ (16)

よって $X(t)$ のシステム方程式は式(12)と式(16)をまとめて次式となる。

$$dX/dt = f(X(t)) + v(t) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -B_0(t)\gamma \\ -R_1 A_1(t) + Q_1 B_1(t) \\ -Q_1 A_1(t) - R_1 B_1(t) \\ \vdots \\ -R_M A_M(t) + Q_M B_M(t) \\ -Q_M A_M(t) - R_M B_M(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ E_1(t) \\ F_1(t) \\ \vdots \\ E_M(t) \\ F_M(t) \end{bmatrix} \quad (17)$$

次に式(2)における観測量 y として、 x 軸上に任意に配置された観測点 x_n ($n=1\sim N$)から一定の時間間隔で得られる濃度 C を考える。この場合観測雑音 w が混入するものとする。したがって式(2)における y のある観測点 x に対応する成分 y_x は次式で表される。

$$y_x(k) = [0 \ 0 \ 0 \ 1 \ \sin(2\pi x/\ell) \ \cos(2\pi x/\ell) \ \cdots \sin(2\pi Mx/\ell) \ \cos(2\pi Mx/\ell)] [u \ D \ \gamma \ B_0(k) \\ A_1(k) \ B_1(k) \ \cdots \ A_M(k) \ B_M(k)]^T + w(x, k) \quad (18)$$

式(18)の右辺第1項のベクトルをすべての観測地点についてまとめてマトリックス表示すると、式(2)の観測行列 $H(k)$ [$N \times (2M+4)$] 行列]は次式のようなになる。

$$H(k) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & \sin(2\pi x_1/\ell) & \cos(2\pi x_1/\ell) & \cdots \sin(2\pi Mx_1/\ell) & \cos(2\pi Mx_1/\ell) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \sin(2\pi x_N/\ell) & \cos(2\pi x_N/\ell) & \cdots \sin(2\pi Mx_N/\ell) & \cos(2\pi Mx_N/\ell) \end{bmatrix} \quad (19)$$

なお上記の観測点以外の点で u , D , γ が観測される場合には、式(19)の行数を増やせばよい。

以上のようにしてカルマンフィルタのシステム方程式(1)と観測方程式(2)が定式化されたので、あとは式(11)の ℓ , M , 濃度観測点数 N およびその地点 x_n を定め、状態量 X の初期推定値 $X(0|0)$ およびその推定誤差共分散行列の初期値 $P(0|0)$ 、システム雑音、観測雑音の分散共分散行列 $V(k)$, $W(k)$ を適当に与えれば、2. 1. の2次フィルタにより、式(3)、(4)の離散時間間隔 Δt ごとに X の最適推定値が求められ、これを用いて濃度 C の予測が行われる。

3. 適用例

ここでは、本手法の有用性および特性の把握のために、以下の方法で発生させた真値の分かっているデータに対して検討する。確率項の加わった移流分散方程式に従う濃度を模擬発生させる場合、まず図-1に示した初期濃度分布よりフーリエ係数の初期値を求める。次いで、 $u=1.0$ (m/day), $D=0.5$ (m^2/day), $\gamma=0.01$ (1/day), $\Delta t=0.1$ (day), 基本波長 $\ell=100$ (m), フーリエ項数 $M=20$ とし、式(14)の雑音項 $E_m(t)$, $F_m(t)$ には平均0、分散 $(0.005)^2$ の正規乱数を与え、ルンゲ・クッタ・ギル(Runge-Kutta-Gill)法により式(12)を数

値積分し、500ステップほど模擬発生する。さらに模擬発生して得られたフーリエ級数から式(10)により濃度分布を計算し、これを真値とした⁴⁾。ここで図-1の初期濃度分布は式(9)の方程式で雑音項 $\varepsilon(x,t)$ を除いた確定方程式において、 $C(X,0)=1(0 \leq x \leq 5)$, $C(x,0)=0(-\infty < x < 0, 5 < x < \infty)$ の初期条件で解析解に $t=10(\text{day})$ を与えたものである。以上のようにして式(9)の定係数確率移流分散方程式に従う濃度分布の真値を模擬発生させた結果を図-1の実線

に示している。なお、実際に各地点で観測される濃度として上述の真値に平均0, 分散 $(0.01)^2$ の観測雑音を加えた。また物理量が任意の1点で観測される場合にはその観測物理量には真値の10%の2乗の分散をもつ雑音を加えている。

次に模擬発生させた濃度分布に対して2.で述べた手法により濃度予測を行う。この場合物理量 u, D, γ およびフーリエ係数 B_0, A_m, B_m の初期値すなわち状態量 $\lambda(0)$ には真値の50%の値を与えた。ここで濃度観測点が図-1の矢印に示したようにランダムに20地点、物理量 u, D, γ の観測はない場合で、観測時間間隔を10ステップすなわち $10\Delta t=1(\text{day})$ 、フーリエ級数の項数 $M=20$ とした場合の2次フィルタによる10ステップ先の予測を図-1に示している。また物理量 u, D, γ フーリエ係数 B_0 および A_m, B_m の同定結果の一部を図-2に示している。次に、図-1の条件において物理量が観測される場合、観測時間間隔が変化する場合、およびフーリエ級数の項数が変化する場合の1次および2次フィルタの濃度予測精度 J の変化をそれぞれ図-3, 図-4, 図-5に示している。この場合、 J として次のような指標を用いた。

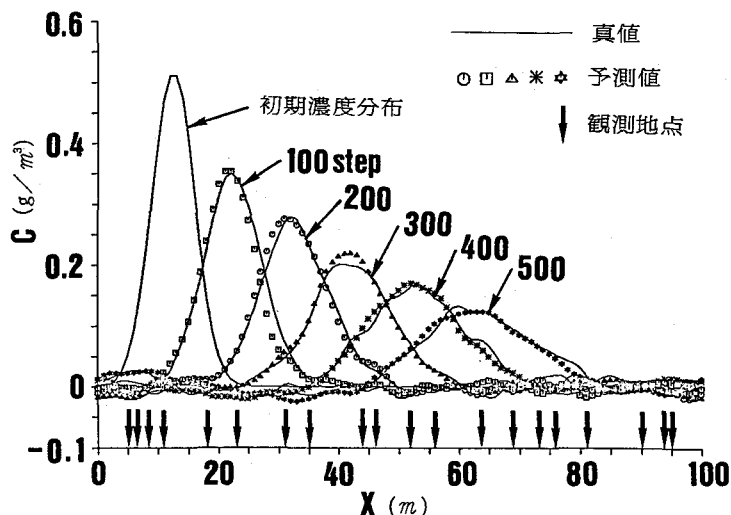


図-1 模擬発生濃度(真値)とその予測値

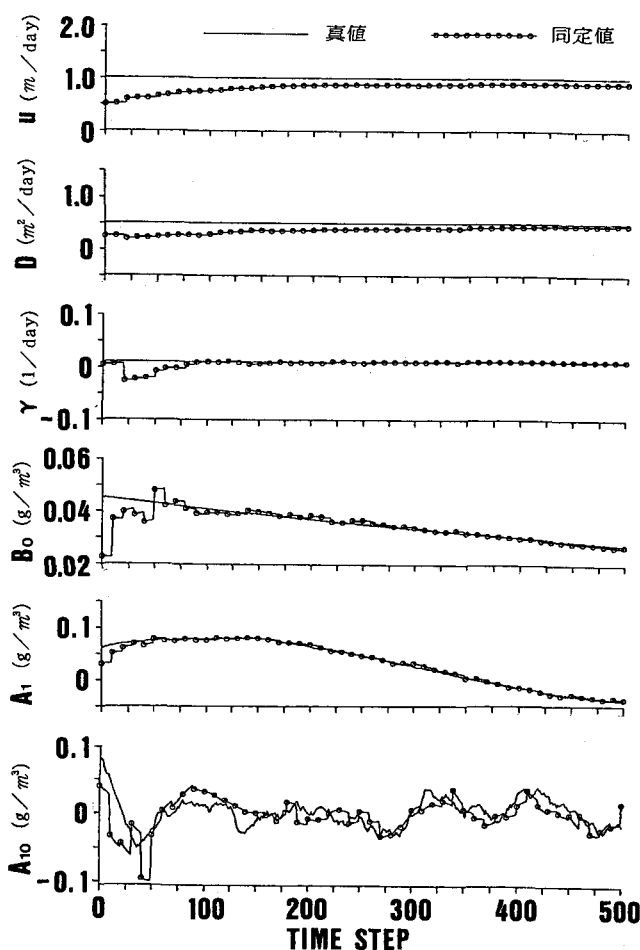


図-2 物理量およびフーリエ係数の同定結果

$$J = \sum_k J_k / N_2 \quad (20)$$

$$J_k = \frac{1}{N_1} \sum_x [\hat{C}(x, k|k-1) - C(x, k)]^2 \quad (21)$$

ここに、 $C(x, k)$: 濃度の真値

$\hat{C}(x, k|k-1)$: $t=k-1$ までの観測量が得られた場合の濃度 $C(x, k)$ の予測値

N_1 : 評価地点数で、この場合0mから100mまで1mおきに101地点を取った。

N_2 : 評価時点数で、この場合100時点から500時点までの100時点おきの5時点をとった。

4. 考察

図-1の実線より時間の経過と共に濃度分布の乱れが大きくなっているのが分かる。また2次フィルターによる10ステップ先の予測値をみると、雑音に埋もれている高周波成分の小さな変動分布の予測は困難なものの、時点の進行とともに濃度分布が乱れても精度良く濃度分布形状を予測しているといえよう。

次に図-2のu, D, γ の同定結果をみると、およそ150ステップくらいで同定値が収束しており、いずれも精度良く同定されているといえる。またフーリエ係数 B_0 , A_1 については同定値は100ステップまでには収束し、それ以後真値の変動を精度良く同定している。 A_{10} については高周波成分のため、システム雑音の影響を強く受け真値および同定値ともかなり変動しており、同定精度は低くなっている。これは高波数のフーリエ係数が時点の進行に伴い雑音レベルの中に埋もれてしまうためと考えられる⁴⁾。

次に図-3より、1次、2次フィルターとも濃度予測精度に差はなく、濃度観測点数Nが10以下の場合には、物理量を観測した方が予測精度が向上している。また物理量のうちuを観測した場合がもっとも精度が良く、つづいてD, γ の順となっている。またNを15点以上にとると、物理量の観測の有無にかかわらずJの値は0.008程度に落ち着いている。以上より観測点数を多く取ること、および観測点数が十分でないときには流速uを観測することが予測精度向上につながると考えられる。

次に図-4より、1次、2次フィルターともNを15以上とすると予測精度は安定してくるが、その精度は観測時間間隔が短いほど高くなっている。これは観測時間間隔が短い程、観測情報が多く入手されることおよび短期間予測となるためであると考えられる。またNが10以下の場合には観測時間間隔が小さくなくても必ずしも精度向上していない。これは、カルマンフィルターは濃度観測地

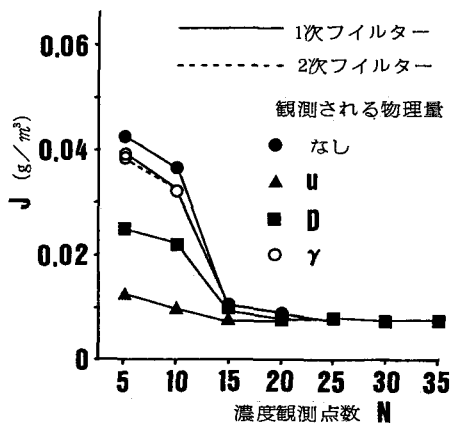


図-3 物理量の観測の有無に対する予測精度

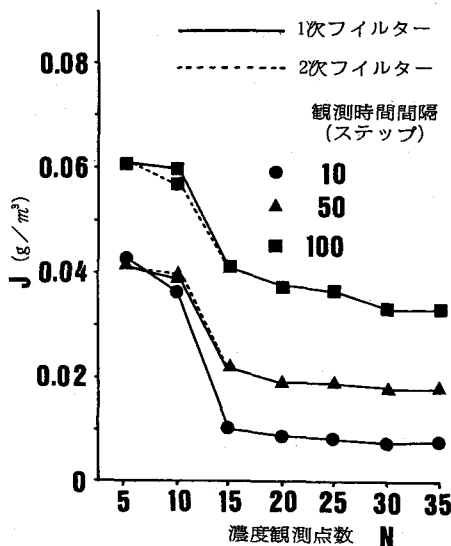


図-4 観測時間間隔の変化に対する予測精度

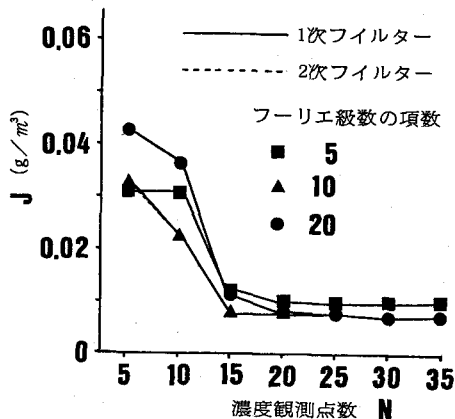


図-5 フーリエ級数の項数変化に対する予測精度

点のみの予測誤差をフィードバックしパラメータを修正するので、観測地点での予測精度が向上するものの全体的な分布は逆に合わないためと考えられる。事実、濃度観測地点のみで予測精度を評価すると観測時間間隔の短い方が高精度となっている。

次に図-5より、1次、2次フィルターとも N を15以上とればフーリエ級数の項数10の濃度予測精度は項数20のそれとほとんど同程度になっている。また N が10以下と少なくなると項数10の方が項数20よりも濃度予測精度が良くなっている。これは N が少ない場合、項数が多くなると同定すべきパラメータが多くなるので、これらのパラメータをかえて精度良く同定できず濃度予測精度が低くなるものと考えられる。

最後に図-1と同じ条件で1次フィルターを用いて濃度予測を行った場合、およそ半分の演算時間で図-1とほぼ同様の濃度予測結果が得られた。これは状態方程式の非線形ベクトル関数 f にそれほど強い非線形性がなく、したがって本手法に関する限り、2次フィルターのbias correctionは演算時間を要するだけで予測精度の向上に有効ではなかったと考えられる。

5. むすび

本報では、空間的に任意に設置された観測点から、ある時間間隔で入手されるデータを用いて、2次フィルターにより定係数一次元確率移流分散方程式で記述される濃度分布を予測する手法を定式化し、次いで本手法を模擬発生濃度分布に適用した。その結果、本手法により精度良く濃度分布を予測することができることが示され、また物理量の観測の有無、観測時間間隔および読み込むべきフーリエ級数の項数などの濃度分布予測精度に対する影響が評価された。また、2次フィルターの予測精度は1次フィルターのそれと比較してほとんど同様であるが、演算時間はおよそ2倍を必要としており、実際上は1次フィルターで十分高い予測が可能であることが示された。

参考文献

- 1) 神野健二・上田年比古・安田 裕：実時間観測データによる定係数2次元移流分散方程式のパラメータ同定と濃度予測、第30回水理講演会論文集、pp.313~318、昭和61年2月。
- 2) 河村 明・神野健二・上田年比古：定係数一次元確率移流分散方程式の濃度予測手法について、土木学会第42回年次学術講演会概要集第2部、pp.6~7、昭和62年9月。
- 3) 吉永宙司・河村 明・神野健二・上田年比古：定係数一次元確率移流分散方程式の濃度予測手法の特性について(第2報)、土木学会第43回年次学術講演会概要集第2部、pp.194~195、昭和63年10月。
- 4) 河村 明・神野健二・上田年比古・吉永宙司：カルマンフィルターによる定係数一次元確率移流分散方程式のオンライン濃度分布予測について、九州大学工学集報、第62巻、第1号、pp.17~24、1989年1月。
- 5) Athans, M., Wisher, R. P. and Bertolini, A.: Suboptimal state estimation for continuous-time nonlinear systems from discrete noisy measurements. IEEE Trans. on Automatic Control, Vol. AC-13, No.5, pp.504~514, October, 1968.
- 6) Geb, A. (ed.): Applied Optimal Estimation, The MIT Press, pp.180~228, 1974.
- 7) 神田 徹・藤田睦博：新体系土木工学26水文学、技報堂出版、pp.231~246、1982年1月。
- 8) 神野健二・上田年比古：粒子の移動による移流分散方程式の数値解法の検討、土木学会論文報告集、第271号、pp.45~46、1978年3月。