

1. まえがき 地下水汚染は大気や湖沼、河川、海域による汚染に比べて輸送速度が通常は極めて遅いこと、汚染の拡りが観測されるまでにかかなりの年月が経過していること、汚染が我々の目に触れない地下での現象であることなどから、汚染源の推定が困難であると言われている。本報では、地下水汚染の予測の問題に対して、「予測」→「観測」→「予測誤差の計算モデルへのフィードバック：予測精度の向上」→「予測」の機能を持つ計算アルゴリズムの適用を試みる。そのため、このような問題解決への一段階として場所的に一定の物理パラメータを持つ2次元・移流・分散・吸着・確率微分方程式で記述される系に対してカルマンフィルタ理論を応用している。即ち、時・空間的に白色な正規雑音により乱された場の濃度変化を領域の任意の場所に設けられた観測点で経時観測を行いながら、流速、分散係数および一次反応係数の同定と濃度分布の予測を行なうアルゴリズムについて検討を加えている。

2. システム方程式 次式に示すような定係数をもつ2次元確率微分方程式を考える：

$$\partial C / \partial t + u \partial C / \partial x + v \partial C / \partial y = D_{xx} \partial^2 C / \partial x^2 + (D_{xy} + D_{yx}) \partial^2 C / \partial x \partial y + D_{yy} \partial^2 C / \partial y^2 - \gamma_0 C(x, y, t) + f a \cdot \epsilon(x, y, t) \quad \text{--- (1)}$$

ここに、 $C(x, y, t)$: 汚染物質濃度、 $V=(u, v)$: 流速、 $D=[D_{xx}, D_{xy}, D_{yx}, D_{yy}]$: 分散係数テンソル、 γ_0 : 一次反応係数、 $\epsilon(x, y, t)$: 正規性白色雑音、 $f a$: 雑音強度である。なお、周知のように分散係数テンソルの各成分は、 $V=(u^2+v^2)^{1/2}$ 、 D_m を分子拡散係数とすると

$$D_{xx} = \alpha_L \cdot u^2 / V + \alpha_T \cdot v^2 / V + D_m, \quad D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \cdot u \cdot v / V, \quad D_{yy} = \alpha_T \cdot u^2 / V + \alpha_L \cdot v^2 / V + D_m \quad \text{--- (2)}$$

の関係式で分散の特性長 α_L 、 α_T が与えられれば流速 V から一意的に定まるが、これらの特性長がここでは一応不明である場合を含めて解析する。雑音項 $\epsilon(x, y, t)$ を次のように2重Fourier級数に展開する：

$$\epsilon(x, y, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} [A_{mn}(t) \sin f(x, y; m, n) + B_{mn}(t) \cos f(x, y; m, n)], \quad f(x, y; m, n) = 2\pi m x / \ell x + 2\pi n y / \ell y \quad \text{--- (3)}$$

ここに、 $\ell x, \ell y$ は x 及び y 方向の基本波長である。 $A_{mn}(t)$ 、 $B_{mn}(t)$ は次の関係を満たすものとする：

$$R E(\xi, \eta) = E[\epsilon(x, y, t) \cdot \epsilon(x + \xi, y + \eta, t)] = (1/2) \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} E[A_{mn}^2 + B_{mn}^2] \cos f(\xi, \eta; m, n) \quad \text{--- (4)}$$

$$(1/2) E[A_{mn}^2 + B_{mn}^2] = \sin(m\pi / \phi x \ell x) \cdot \sin(n\pi / \phi y \ell y) / \{(m\pi / \phi x \ell x) \cdot (n\pi / \phi y \ell y) \cdot (2\ell x \ell y)\} \quad \text{--- (5)}$$

ここに“ E ”は期待値演算子である。式(4)、(5)に対応して $C(x, y, t)$ を2重Fourier級数に展開する：

$$C(x, y, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} [C_{mn}(t) \sin f(x, y; m, n) + D_{mn}(t) \cos f(x, y; m, n)] \quad \text{--- (6)}$$

式(3)、(6)を式(1)に代入すれば $m, n(m=0 \sim \infty, n=0 \sim \infty)$ に対し次の連立常微分方程式を得る：

$$\begin{bmatrix} dC_{mn}/dt \\ dD_{mn}/dt \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -F(D_{xx}, D_{xy}, D_{yy}, \gamma_0) & G(u, v) \\ -G(u, v) & -F(D_{xx}, D_{xy}, D_{yy}, \gamma_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{mn}(t) \\ D_{mn}(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f a \cdot A_{mn}(t) \\ f a \cdot B_{mn}(t) \end{bmatrix} \quad \text{--- (7)}$$

ここに、 $F(D_{xx}, D_{xy}, D_{yy}, \gamma_0) = (2\pi m / \ell x)^2 D_{xx} + (8\pi^2 m n / \ell x \ell y) D_{xy} + (2\pi n / \ell y)^2 D_{yy} + \gamma_0$,

$$G(u, v) = (2\pi m / \ell x) u + (2\pi n / \ell y) v \quad \text{--- (8, 1), (8, 2)}$$

である。次に、 V, D, γ_0 に関する状態方程式は： $dV/dt=0$ -- (9), $dD/dt=0$ -- (10), $d\gamma_0/dt=0$ -- (11)

である。式(7)は V, D, γ_0 も未知量とするときには非線形方程式となるからカルマンフィルタを用いる場合には線形近似を行なう。

3. 観測方程式 観測点は任意に2次元平面上に配置されているものとする。観測値を $C(k, t)$ ($k=1 \sim K$)とする。 k は観測点番号である。観測方程式は：

$$\begin{aligned} C(k, t) &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} [\sin f(k; m, n) C_{mn}(t) + \cos f(k; m, n) D_{mn}(t)] + n(k, t) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} [\sin f(k; m, n) C_{mn}(t) + \cos f(k; m, n) D_{mn}(t)] \\ &\quad + \sum_{m=M}^{\infty} \sum_{n=N}^{\infty} [\sin f(k; m, n) C_{mn}(t) + \cos f(k; m, n) D_{mn}(t)] + n(k, t) \end{aligned} \quad \text{--- (12)}$$

ここで $n(k, t)$: 観測機器の雑音である。

4. 赤池の情報量基準(AIC)によるFourier係数の最適項数の決定

無数に存在する未知のFourier係数を有限個の観測値から推定することが必要であるが、観測点の空間配置上の制約から全ての係数を求めることは不可能である。ここではFourier係数の項数の決定に、赤池の情報量基準(AIC)を用いる¹⁾。

$$AIC=K \cdot \ln(\sigma^2)+2\theta \quad \text{---(13)}$$

ここに、K:データ数、 θ :パラメータ数 $=2(M+1)(N+1)-2$ 、M、N:mおよびnの項数、 σ^2 : $C(x,y,t)$ の推定誤差の分散である。最小2乗法ではパラメータ数はデータ数以下でなければならないから、基本波長 ℓ_x, ℓ_y に対して $\theta \leq K$ を満たすFourier係数の項数の全てのm,nの組合せに対してそれぞれAICを計算すると図-1に示されるようなAICの等高線が得られる。 $\theta > K$ であるようなm,nの組合せは図-1のbより外側の領域で示される。一般に高周波数成分は低周波数成分に比べてレベルが低いので、図-2のように次数が高くなると、Fourier係数のスペクトルは雑音レベルを下まわると考えられる。従って、ある観測時点でのデータから、AICによって最適な打ち切り項数を決めるという考えを採用すれば、雑音のレベルを下まわる高周波数成分(例えば、図-1、2のB点)は不必要であり、雑音のレベルを上まわる次数の領域(図-1のaの領域)でm,nの組合せが決定される。一方、カルマンフィルタで同定するパラメータ数 θ はFourier係数のほかに式(1)のV,D, γ_0 も未知量とするので、 $\theta = \theta + 6$ になる。本報の計算では $K = \theta$ を満たし、かつAICの値が少ないm,nの組合せ(図-1、2のA点)を最適なFourier係数の項数としている。

5. 計算の安定条件 実際の計算に際してはシステム方程式を離散化し、更に線形近似する。式(7)の連立常微分方程式を差分化すると

$$\begin{cases} C_{mn}(t+\delta t) = (1-\delta t \cdot F)C_{mn}(t) + \delta t \cdot G \cdot D_{mn}(t) \\ D_{mn}(t+\delta t) = -\delta t \cdot G \cdot C_{mn}(t) + (1-\delta t \cdot F)D_{mn}(t) \end{cases} \text{---(14)}$$

が得られる。この漸化式を各時間ステップごとに計算することにより C_{mn}, D_{mn} の値が求められる。その場合、式(14)の安定条件は図-3に示されるように、中心 $(1/\delta t, 0)$ 、半径 $1/\delta t$ の円の内側:

$$(F_{mn} - 1/\delta t)^2 + G_{mn}^2 \leq 1/\delta t^2 \quad \text{---(15)}$$

で与えられる。計算実行中にはD,V, γ_0 の同定値に対して式(15)の条件が満たされることが必要である。図-3ではこれらのことが模式的に示されている。即ち、(1)は計算が安定条件を満たしつつ行なわれている状態、(2)は安定条件を満たさずに発散する状態である。

参考文献 1)中川 徹、小柳 義夫:最小二乗法による実験データ解析、東京大学出版会(1983)

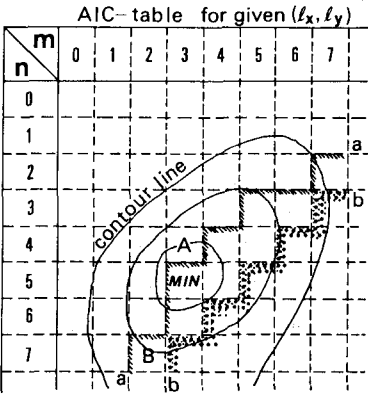


図-1 AIC表の等高線

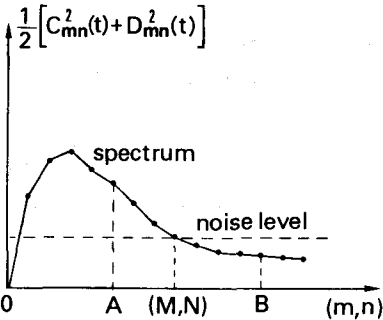


図-2 Fourier係数のスペクトルと項数

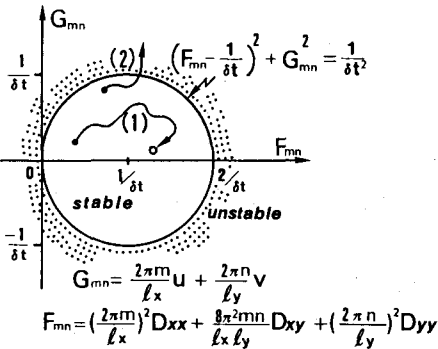


図-3 計算の安定条件