地下水汚染の予測方法の研究

九州大学工学部　正員　神野健二
々　上田年比古
○　学生員　塚本和寛

1．まえがき　最近トリクロロエチレン、テトラクロロエチレンなどの有機ハロゲン化合物による地下水の汚染が全国的に問題となっているが、地下水汚染が大気や湖沼、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。従来よりこのような汚染物質の輸送問題を予測する手段の１つとして有限要素法や差分法のような数値計算が適用されていて、実用的には十分な精度を持つアルゴリズムが完成されている。しかしながら、実際にこれらの計算手法を適用する場合には計算に用いる流速分布や拡散係数の分布、あるいは境界条件の設定など多くの問題点が残されている。また、従来の決定論的アプローチでは期待値としてしての濃度分布が仮に求められても、その精度評価につながる信頼区間の議論がなされていないので、シミュレーション結果を実際の計画に移すとき計算結果をどのように評価してよいのか合理的な議論が難しい。次に汚染物質濃度の観測を行なっても、物理定数と計算領域の境界条件を与えて一意的に数値解が求まった時点で、観測結果をどのように計算モデルに反映させるのか従来のアプローチではこの点に関する合理的議論が欠けているように思われる。このような問題点に対しては「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が必要であろう。本報ではまず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ー理論を適用することを試みている。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：

$$\partial C/\partial t+u\,\partial C/\partial x+v\,\partial C/\partial y=Dxx\,\partial^2C/\partial x^2+(Dxy+Dyx)\,\partial^2C/\partial x\partial y+Dyy\,\partial^2C/\partial y^2 -\gamma_0 C(x,y,t)+fa\cdot\varepsilon(x,y,t) \qquad \text{---(1)}$$

ここに、$C(x,y,t)$:汚染物質濃度、$\mathbf{V}=(u,v)$:流速、$\mathbf{D}=\{Dxx,Dxy,Dyx,Dyy\}$:分散係数テンソル、$\gamma_0$:一次反応係数、$\varepsilon(x,y,t)$:正規性白色雑音、fa: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き

$$Dxx=\alpha_L\cdot u^2/V+\alpha_T\cdot v^2/V+D_M,\quad Dxy=Dyx=(\alpha_L-\alpha_T)\cdot u\cdot v/V,\quad Dyy=\alpha_T\cdot u^2/V+\alpha_L\cdot v^2/V+D_M \qquad \text{---(2)}$$

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$\varepsilon(x,y,t)$を次のように2重フーリェ級数に展開する：

$$\varepsilon(x,y,t)=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\{Amn(t)\sin f(x,y;m,n)+Bmn(t)\cos f(x,y;m,n)\},$$

$$f(x,y;m,n)=2\pi mx/\ell x+2\pi ny/\ell y \qquad \text{---(3)}$$

ここに、ℓx, ℓyはx及びy方向の基本波長である。Amn(t)、Bmn(t)は次の関係を満たすものとする：

$$R\varepsilon(\xi,\eta)=E[\varepsilon(x,y,t)\cdot\varepsilon(x+\xi,y+\eta,t)]=(1/2)\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}E[Amn^2+Bmn^2]\cos f(\xi,\eta;m,n) \qquad \text{---(4)}$$

$$(1/2)E[Amn^2+Bmn^2]=\sin(m\pi/\phi x\,\ell x)\cdot\sin(n\pi/\phi y\,\ell y)/\{(m\pi/\phi x\,\ell x)\cdot(n\pi/\phi y\,\ell y)\cdot(2\ell x\,\ell y)\} \qquad \text{-(5)}$$

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重フーリェ級数に展開する：

$$C(x,y,t)=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\{Cmn(t)\sin f(x,y;m,n)+Dmn(t)\cos f(x,y;m,n)\} \qquad \text{---(6)}$$

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

$$\begin{bmatrix} dCmn/dt \\ dDmn/dt \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -F(Dxx,Dxy,Dyy,\gamma_0) & G(u,v) \\ -G(u,v) & -F(Dxx,Dxy,Dyy,\gamma_0) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} Cmn(t) \\ Dmn(t) \end{bmatrix}+\begin{bmatrix} fa\cdot Amn(t) \\ fa\cdot Bmn(t) \end{bmatrix} \qquad \text{---(7)}$$

ここに、$F(Dxx,Dxy,Dyy,\gamma_0)=(2\pi m/\ell x)^2 Dxx+(8\pi^2 mn/\ell x \ell y)Dxy+(2\pi n/\ell y)^2 Dyy+\gamma_0$,

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

である。次に、V，D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。

<u>３．観測方程式</u>　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：

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

ここで$n(k,t)$:観測機器の雑音である。M,Nは次式に示す赤池の情報量基準によって求められる最適打切り項数である: $AIC=K\cdot \ell n(\sigma^2)+2\theta\rightarrow \mathrm{minimum}$, $\theta=2(M+1)(N+1)-2$：パラメータ数 ---(13)
定数２はC_{00}と濃度$C(x,y,t)$の直流部分を表わすD_{00}とを予め差しひいて解析を行うため、パラメータが２個少なくなるためである。式(12)右辺第2項は与えられた観測網に対する観測誤差である。式(12)をk=1~Kについて書き下し、行列表示すればいわゆるカルマンフィルタ-における観測方程式になる。

<u>４．システム雑音及び観測雑音の共分散行列について</u>　システム雑音ベクトルは

$$\mathbf{e}(t)=[0,0,0,0,0,0,\delta tfaA_{01},\delta tfaB_{01},\cdots,\delta tA_{MN},\delta tB_{MN}]' \qquad \text{---}(14)$$

ここに記号「'」は転置を表わす。従って、共分散行列 Snは:$Sn(t)=E[\mathbf{e}(t)\mathbf{e}(t)']$ ---(15)
$Sn(t)$の０でない小行列の、あるm,nに対する対角成分の一例は :$E[(\delta tfa)^2 Amn^2]$或は$E[(\delta tfa)^2 Bmn^2]$などである。非対角成分は $E[(\delta tfa)^2 Amn\cdot Am'n']=0$ $(m\neq m', n\neq n')$などから0となる。式(5)から$E[Amn^2]=E[Bmn^2]$の値を計算することが出来る。次に観測雑音を式(12)の右辺第2、3項の和と考え、これを改めて$\mathbf{n}(t,k)$と表わす。この共分散行列を$\mathbf{E}(t)$とすると: $\mathbf{E}(t)=E[\mathbf{n}(t,k)\mathbf{n}(t,k)']$ ---(16)
観測値の打ち切り項は、時間の経過に伴う濃度変化によって変化することを考慮する必要がある。

<u>５．計算のアルゴリズム</u>　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。状態量:$[\mathbf{V}(t),\mathbf{D}(t),\gamma_0(t),C_{01}(t),D_{01}(t),\cdots,C_{MN}(t),D_{MN}(t)]'$の変動分を$\mathbf{X}(t)$、システム行列を$\mathbf{\Phi}$、観測行列を$\mathbf{S}$、観測値を$\mathbf{Y}(t)$、観測雑音を$\mathbf{n}(t)$、カルマンゲインを$\mathbf{K}(t)$、予測誤差の共分散誤差行列を$\mathbf{P}(t+\delta t/t)$、推定誤差の共分散誤差行列を$\mathbf{P}(t/t)$、イノベーションを $\boldsymbol{\nu}(t+\delta t)$とすれば

〔システム方程式〕 $\mathbf{X}(t+\delta t)=\mathbf{\Phi}\mathbf{X}(t)+\mathbf{e}(t)$ --(17)	〔観測方程式〕 $\mathbf{Y}(t+\delta t)=\mathbf{S}\mathbf{X}(t+\delta t)+\mathbf{n}(t)$ --(18)
〔状態予測式〕 $\hat{\mathbf{X}}(t+\delta t/t)=\mathbf{\Phi}\hat{\mathbf{X}}(t/t)$ --(19)	〔観測値の予測式〕 $\hat{\mathbf{Y}}(t+\delta t/t)=\mathbf{S}\hat{\mathbf{X}}(t+\delta t/t)$ --(20)
〔イノベーション〕 $\boldsymbol{\nu}(t+\delta t)=\mathbf{Y}(t+\delta t)-\hat{\mathbf{Y}}(t+\delta t/t)$ --(21)	〔状態推定式〕 $\hat{\mathbf{X}}(t+\delta t/t+\delta t)=\hat{\mathbf{X}}(t+\delta t/t)$ $+\mathbf{K}(t)\boldsymbol{\nu}(t+\delta t)$--(22)
〔カルマンゲイン〕 $\mathbf{K}(t+\delta t)=[\mathbf{P}(t+\delta t/t)\mathbf{S}'][\mathbf{S}\mathbf{P}(t+\delta t/t)\mathbf{S}'+\mathbf{E}]^{-1}$ --(23)	
〔Ｐの遷移式〕 $\mathbf{P}(t+\delta t/t)=\mathbf{\Phi}\mathbf{P}(t/t)\mathbf{\Phi}'+\mathbf{S}n$ --(24),	$\mathbf{P}(t+\delta t/t+\delta t)=[\mathbf{I}-\mathbf{K}\mathbf{S}]\mathbf{P}(t+\delta t/t)$ --(25)

が計算に必要な式である。ここに記号「^」は推定値、Ｉは単位行列を表す。計算はまえがきで述べたように、「式(20)による予測」→「式(21)による予測誤差(イノベーション)の計算」→「式(22)によるフィードバック」→「式(20)による予測」を逐次行なう。$\mathbf{K}(t)$,$\mathbf{P}(t/t)$などは式(23)~(25)によって求める。