

連続的データ同化法を用いた屋外空間における汚染物質放出源の推定

Estimation of contaminant source in outdoor space by using variational continuous assimilation method

学生会員 ○松本 貴也 (大阪大学)

学生会員 松尾 智仁 (大阪大学)

正会員 近藤 明 (大阪大学)

正会員 嶋寺 光 (大阪大学)

Takaya MATSUMOTO^{*1}, Akira KONDO^{*1}, Tomohito MATSUO^{*1}, Hikari SHIMADERA^{*1}

^{*1} Osaka University

For the case where hazardous contaminants are emitted to the atmosphere, understanding the concentration field by contaminant source is important to protect the surrounding environment from pollutant threat. In this study, based on Computational Fluid Dynamics, a data assimilation technique called the Variational Continuous Assimilation (VCA) method was utilized to estimate not only the concentration field but also the location and intensity of air contaminant source. The correction term added to the mass conservation equation by the VCA method is equivalent to the pollutant source. Observation information of the concentration on the windward side improved estimation accuracy.

1. はじめに

化学薬品工場での漏洩事故や生物・化学兵器による攻撃をはじめとして、危険な汚染物質が大気中に放出されるような事例が考えられる。こうした汚染物質による脅威から、人々の安全や周辺環境を守るためにも、大気汚染物質の濃度分布を把握することが重要であり、そのために放出源に関する正確な情報が不可欠となる。大気汚染濃度の推定には、これまで観測や数値計算が用いられてきた。しかし、観測では、対象全域からデータを得ることはできず、データに欠損が生じてしまう。一方、数値計算では、対象全域を推定することが可能であるが、適切な初期条件や境界条件を与えることが難しく、モデル化に際しての誤差や計算上の丸め誤差といった様々な要因から推定精度が下がりやすい。

こうした観測と数値計算の欠点を補い合う手法として、本研究では Derber¹⁾が気象場の推定精度向上のために開発した連続的データ同化法 (Variational Continuous Assimilation method: VCA 法) に着目した。大気汚染濃度の推定に利用するため、物質輸送方程式のアナロジーから汚染濃度分布だけでなく、放出源の位置と放出強度の推定が可能となるよう同手法を修正した。これにより、汚染物質の大気環境への放出事故の実態把握へのアプローチとしてより有効な手段となる。

本研究では、汚染物質が定常的に放出される場合について、複数の観測データを用いて汚染物質放出源の位置、強度、放出された濃度分布を推定する数値シミュレーションを行った。シミュレーションにより作成した 3 次元屋外空間の汚染濃度分布に VCA 法を適用し、推定結果との比較から VCA 法の妥当性を評価した。

2. 連続的データ同化法(VCA 法)の概要

VCA 法は、式(1)に示すように支配方程式に修正項を付与することで、数値計算と観測の誤差を最小化する手法である。各観測点、各観測時刻における数値計算の値と観測値の間の誤差の大きさは(2)式で定義される評価関数により定義される。

$$\Psi^n = A^n(\Psi^{n-1}) + \lambda^n \varphi \quad (1)$$

$$I = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P (\Psi^p - \tilde{\Psi}^p)^T (\Psi^p - \tilde{\Psi}^p) \quad (2)$$

ここで、 n は計算ステップ、 Ψ^n は計算値ベクトル、 A^n は Ψ^{n-1} から Ψ^n への変換行列、 $\lambda^n \varphi$ は修正項である。 p は観測ステップ、 P は観測回数、 Ψ^p , $\tilde{\Psi}^p$ はそれぞれ時刻 t_p における計算値ベクトル、観測値ベクトル (T は転置行列を表す)。

また、支配方程式に加えた修正項 $\lambda^n \varphi$ は、物質輸送方程式のアナロジーから、放出源の発生項とみなすことができる。 λ^n は時間的な分布を示す行列であり、放出があるときは単位行列、放出がないときには零行列とした。また、 φ は空間的な分布を示すベクトルである。VCA 法では、評価関数 I を最小化するようなベクトル φ を決定する。評価関数 I の修正ベクトル φ に対する導関数は式(3)で表される。ここで、式(3)の導関数が 0 になるような φ を式(4)に示す最急降下法による繰り返し計算により探索する。

$$\frac{\partial I}{\partial \varphi} = \sum_{p=1}^P \frac{\partial \Psi^p}{\partial \varphi} (\Psi^p - \tilde{\Psi}^p) \quad (3)$$

$$\varphi^{k+1} = \varphi^k + \alpha \left. \frac{\partial I}{\partial \varphi} \right|_{\varphi=\varphi^k} \quad (4)$$

ここで、 k は繰り返し回数であり、 α は修正ベクトルの変化幅を定める学習係数である。

3. 数値シミュレーション

3.1 VCA 法による放出源と数値計算

本研究では観測誤差やモデル誤差の影響を排除するため、データ同化に用いる観測データにも数値計算の結果を用いた。正しい放出源情報を用いた数値結果を正解値とし、正解値のうち観測点の存在する地点の濃度を観測値として利用した。放出源を置かずに再度シミュレーションを行った数値計算結果に対して、観測値を同化させ、数値計算を修正した。

3.2 計算条件

数値計算には、有限体積法により離散化を行い、圧力解法には、SIMPLE 法²⁾を用いた。移流・拡散項の差分法にはべき乗則を用い、乱流モデルには、標準 $k-\epsilon$ モデルを用いた。

計算対象領域は、3次元屋外での汚染物質の貯蔵区画を想定した。その平面図と立面図を図1に示す。9 m×5.25 m×4 m の区画を 0.25 m の均一メッシュで分割し、各境界面には x 方向に 1.0 m/s の一様な風を与えた。放出源の存在する $x = 3.375$ m の yz 面および $z = 1.625$ m の xy 面の流れ場を図2に示す。

貯蔵所として直方体の建物を配置した。汚染物質の放出源位置は、貯蔵所の上部の 1 メッシュ分の大きさである $1.563 \times 10^{-2} \text{ m}^3$ の空間から、放出強度が $1 \text{ g/m}^3/\text{s}$ の連続放出がなされている仮定した。

汚染物質の放出開始時刻からの正解値濃度分布の時間変化を図3に示す。

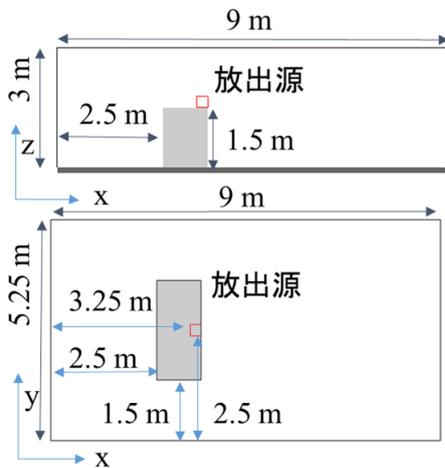


図1. 対象領域(上図:立面図,下図:平面図)

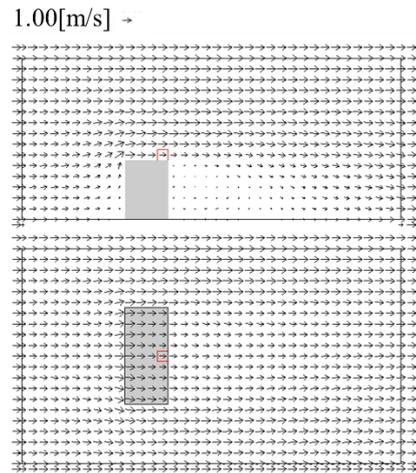


図2. $x=3.375$ m の yz 面(上図), $z=1.625$ m の xy 面(下図)での流れ場

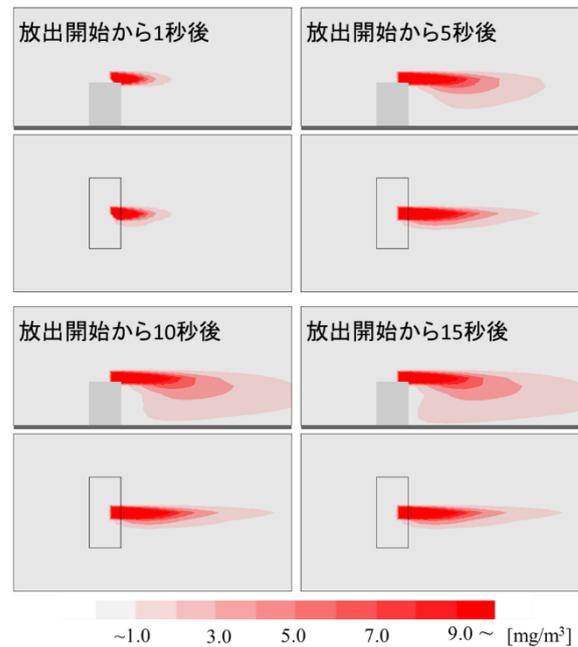


図3. $x=3.375$ m の yz 面と $z=1.625$ m の xy 面での正解値濃度分布の時間変化

3.3 観測条件

観測点については、放出源位置の x 方向側の後方 1m の地点を中心に、y 方向 z 方向のそれぞれに 0.5m 間隔に 3×3 の 9 か所に設置した観測点配置 A をもとに、放出源位置の x 方向側の前方 1m 側に観測点を追加した観測点配置 B と放出源位置の x 方向側の前方 1m の地点を中心に、y 方向 z 方向のそれぞれに 0.5m 間隔に 3×3 の 9 か所を追加した C を図 4(a)~図 4(c)のように配置した。

観測対象時間は放出開始から 90 秒間とし、観測は 1 秒間に 1 回行った。正解値の濃度分布から観測点配置 A,B,C の観測点位置の濃度情報を、放出源を置かずにシミュレーションを行った数値計算結果に対して同化させ、数値計算を修正した。

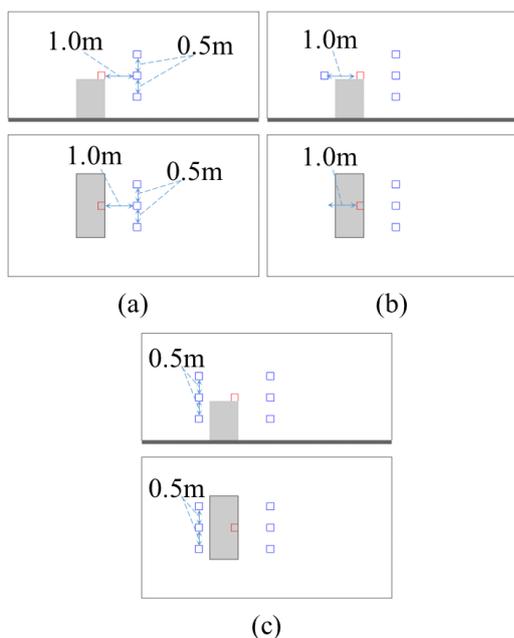


図 4. (a)観測点配置 A (b)観測点配置 B (c)観測点配置 C

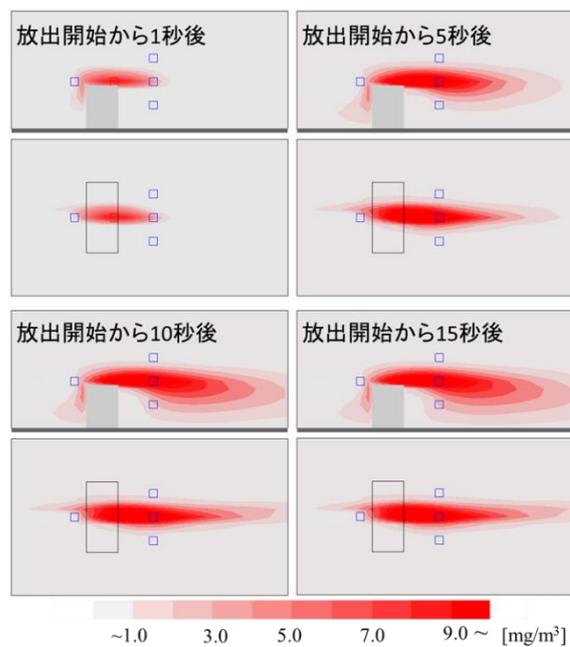


図 6. VCA 結果 B の濃度場

4. 結果

4.1 汚染物質の濃度分布

観測点を置かずにシミュレーションした数値計算結果に対し、正解値濃度場の観測点配置 A,B,C の地点の濃度情報を与え、VCA 法を適用した。計算によって得られた濃度分布の計算結果を各観測点配置に従い、VCA 計算結果 A,B,C として、各々図 5~図 7 に示す。

放出源よりも風下側の濃度のみを観測値として与えた VCA 結果 A では、全体に大きく広がる濃度分布が得られたが、風上側にセンサを配置した VCA 結果 B では、風上側の濃度が抑えられ、さらにセンサを多く配置した VCA 結果 C では、風上側への濃度が大きく抑えられた。

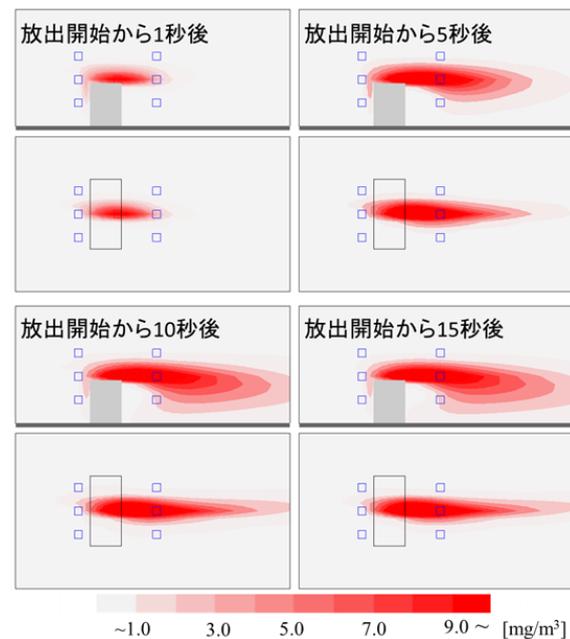


図 7. VCA 結果 C の濃度場

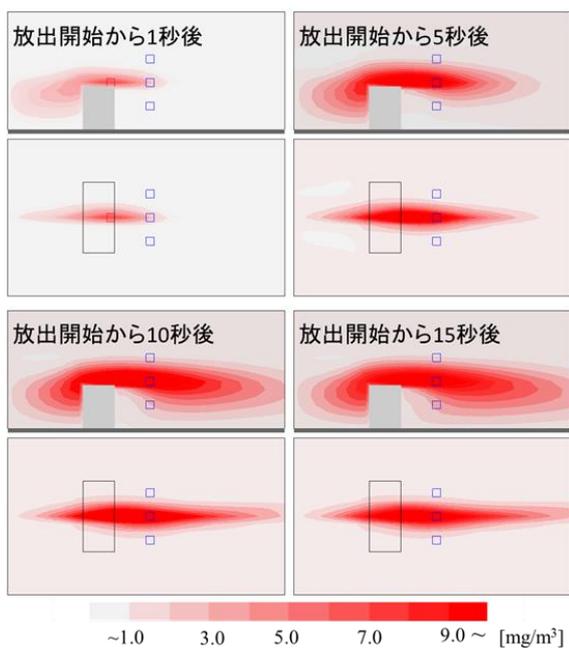


図 5. VCA 結果 A の濃度場

濃度場の推定結果は、式(6)に示す計算対象領域全体における濃度の平均二乗誤差(Root Mean Square Error: RMSE)で評価した。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{M_{all}} \sum_{i=1}^{M_{all}} (\Psi_{i,true} - \Psi_{i,calc})^2} \quad (6)$$

ここで、 M_{all} は計算対象メッシュの総数、 $\Psi_{i,true}$ 、 $\Psi_{i,calc}$ はそれぞれ i 番目のメッシュにおける濃度の正解値と、計算値を示す。また、修正前の計算値の誤差に対する VCA 法を適用した場合の誤差の大きさは、推定結果の RMSE を VCA 法の適用前の汚染物質を置かずに計算した結果の濃度の計算値を RMSE で除し、正規化して用いた。正

規化を施した RMSE を正規化 RMSE と表す。図 8 に時間ごとの正規化 RMSE の時間変化を示す。

放出源よりも風下側の濃度のみを観測値として与えた VCA 結果 A では、VCA 適用前に比べ、誤差は大きく、どの時間においても正解値と計算値の間の誤差がほとんど減衰することはなかった。一方で、風上側にセンサを配置した VCA 結果 C では、VCA 適用前と比べ、観測値と計算値の間の誤差が大きく改善され、VCA 結果 A と、B よりも濃度分布に関して、対象領域全域で大きく推定精度が向上している。

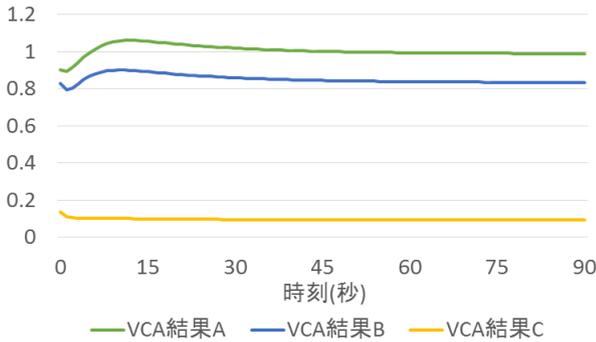


図 8. 正規化 RMSE

4.2 放出強度推定

(1)式で支配方程式に加えた修正項のうち、空間の修正ベクトル φ の総計を放出強度として表した。図 9 に放出強度の推定結果を示す。

推定された放出強度は、いずれの条件においても正解値より大きな値となった。これは放出源より風上側や上部に濃度が現れる修正がなされていることが原因であり、放出直後に一番広く濃度が分布している VCA 結果 A ではその傾向が顕著であった。

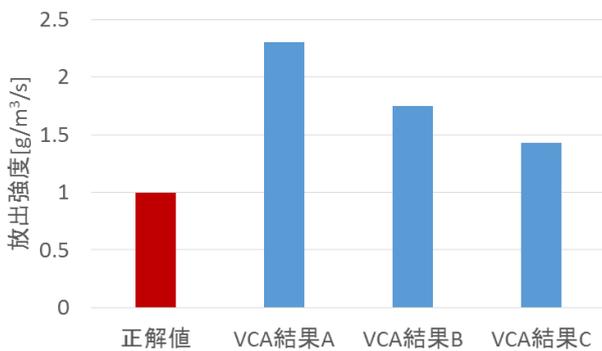


図 9. 放出強度の推定結果

4.3 放出源位置推定

放出位置の推定は、(1)式で支配方程式に加えた修正項のうち、空間の修正ベクトル φ について、全修正に占める修正の割合が 50%と 90%を閾値としたコンター図で表示した。また、図中の白い丸で示した地点が、最も大きな修正がかけられた場所であり、計算によって推定され

た放出源位置とする。図 10 に VCA 法を適用した計算結果の放出源位置の推定結果を示す。

放出源位置に関しては、どの条件でも 0.5m 以内に推定がなされる良好な結果が得られた。

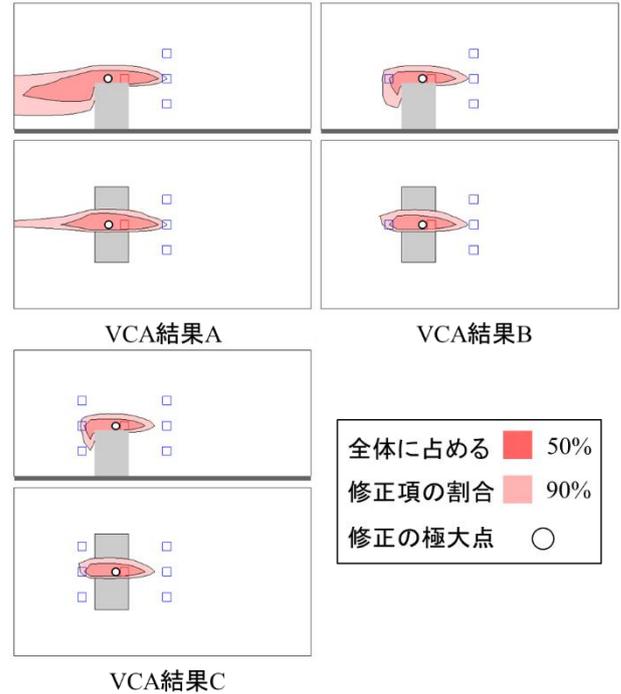


図 10. 放出源位置の推定結果

5. 結論

本研究では、3次元の定常流れ場の屋外空間を対象に、連続的に放出される汚染物質の放出源推定を行うため、データ同化法の一つである連続的データ同化法 (Variational Continuous Assimilation method: VCA 法) の適用を行った。

VCA法の適用のために用いる観測データは数値解析を用いて作成し、観測誤差はないものと仮定した。

汚染物質の風下だけでなく風上にも観測点を配置することで、濃度分布および、放出源位置、放出強度の推定に関して、より正確な予想を可能とした。

参考文献

- 1) Derber, J.C.: A Variational Continuous Assimilation Technique, Monthly Weather Review, 1989, 117, 2437-2446
- 2) スハス V. パタンカー (著)、水谷幸夫 (訳)、香月正司 (訳) : コンピュータによる熱移動と流れの数値解析, 130-136, 1985