

スーパーガウス幾何モデルを用いた 環境汚染物質線形発生源のベイズ推定 Bayesian inference for line source of environmental pollutants with Super-Gaussian geometry model

- 賈 鴻源, 東大生研, 東京都目黒区駒場 4-6-1, E-mail: jhy@iis.u-tokyo.ac.jp
 菊本 英紀, 東大生研, 東京都目黒区駒場 4-6-1, E-mail: kkmt@iis.u-tokyo.ac.jp
 Hongyuan JIA, I.I.S., the Univ. of Tokyo, Komaba 4-6-1, Meguro-ku, Tokyo
 Hideki KIKUMOTO, I.I.S., the Univ. of Tokyo, Komaba 4-6-1, Meguro-ku, Tokyo

This research proposed a new method for the line source identification by combining the Bayesian inference with the Super-Gaussian function. A simple boundary layer was simulated with CFD to obtain the measurements and adjoint concentration flow field, which caused by hypothetical tracers released from each sensor in the reversed flow field. The difference between the measurements and the modelled concentrations was formulated according to Bayesian theorem to estimate the source parameters stochastically. The Super-Gaussian function was employed to approximate the line source with several tractable coefficients. The results showed that this method is capable of identifying all the parameters without any prior geometric information about the line source as long as enough information is provided by sensors.

1. はじめに

健康的な都市空気環境を維持するためには、未知の発生源による空気汚染に速やかに対応し、空気汚染物質の拡散を精度よく監視することが極めて重要である。これを実現するためには、まず、未知の空気汚染発生源の位置・強度を推定する必要がある。ある物質濃度の計測情報からその発生位置・強度を逆解析することは発生源同定と呼ばれる。

様々ある発生源同定手法の中でも、随伴濃度解析手法に基づく手法が注目されている。この手法では、空気汚染物質の濃度場に対応する随伴濃度と呼ばれる仮想的なトレーサー濃度分布を用いて発生源パラメータを効率的に解析する[1]。このトレーサーは、汚染物質の観測点から単位強度で放出され、実際の流れに対し時間・移流方向を反転した場で拡散するよう CFD によりその濃度分布が解析される。しかし、計測・数値解析とともに様々な誤差の混入が避けられず、特に逆解析としての随伴濃度法の解はこれらの誤差に極めて鋭敏に反応してしまう[2]。従って、実際に推定する発生源パラメータは確定値ではなく、ある確率分布をもった変数として同定される必要がある。

Keats [3]らは、随伴濃度とベイズ推定を組み合わせた手法を提案し、都市屋外空間での拡散問題での有効性を報告している。この手法では、解の不確かさを含め確率論的に発生源パラメータの推定が行われる。菊本[4]らは、同手法を用い、2次元居室空間での発生源同定を行い、室内の循環性が強い流れ場における拡散問題に対する適用可能性を検討している。Xue [5]らは、随伴濃度の数値予測に対し、RANS モデルではなく LES から得られた流れ場の時間平均値を利用し、この手法の精度を改良している。ただし、これらの研究はいずれも発生源を理想的な点と仮定している。しかし、現実においては、発生源は線や面あるいは一定の体積を持つものである。したがって、点源の仮定は推定に大きな誤差を引き起こす可能性がある。

発生源の形状の拡張として最も基本的なものとして線源が考えられる。線源は、例えばストリートキャニオン内の交通汚染や室内の空調の送風口などに見られる。したがって、線源の幾何情報（長さ、幅と偏角）を正しく推定するよう発生源同定手法を拡張できれば、汚染制御への適用性を高められるものと考えられる。そして、随伴濃度解析による同定手法を線形の発生源に適用した事例は、著者の知る限り存在しない。そこで本研究は、随伴濃度とベイズ推定を組み合わせた発生源同定手法を線形発生源も取り扱えるように拡張する。そして、同手法を簡易な 3 次元空間での発生源同定問題に適用し、その有効性を検証する。

2. 発生源同定手法

本研究では、定常な乱流場において、ある空気汚染物質が未知の位置に存在する線源から未知の一定強度で連続的に発生している状況を考える。同定対象とする線源は次のパラメータベクトルのように表現できる。

$$\mathbf{m} = (\mathbf{X}_s, q_s) \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{X}_s は発生源の幾何情報と位置を表す。 q_s は発生強度である。この汚染物質の濃度を n 個の観測点 $\mathbf{x}_{0,i}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) で計測し、それらの濃度が D_i であるとする。本研究はこれらの情報を用いて発生源のパラメータベクトルを推定する。

2.1 ベイズ推定を用いた同定手法

ベイズ推定による \mathbf{m} に関する条件付き確率は、次式に従う。

$$P(\mathbf{m}|\mathbf{D}, I) = \frac{P(\mathbf{D}|\mathbf{m}, I)P(\mathbf{m}|I)}{P(\mathbf{D}|I)} \quad (2)$$

\mathbf{D}	: measured data 計測した濃度
I	: background information 背景情報
$P(\mathbf{m} I)$: prior 事前確率
$P(\mathbf{D} \mathbf{m}, I)$: likelihood 尤度関数

$P(\mathbf{m} | \mathbf{D}, I)$: posterior 事後確率
 $P(\mathbf{D} | I)$: evidence 証拠

この中で、証拠 $P(\mathbf{D}|I)$ は正規化係数であり、結果の分布に影響しない。従って、事後確率分布は尤度関数と事前確率によって評価する。

$$P(\mathbf{m}|\mathbf{D}, I) \propto P(\mathbf{D}|\mathbf{m}, I)P(\mathbf{m}|I) \quad (3)$$

実問題においては、真の濃度値 \mathbf{D}_{true} と比べると、 i 番目の観測点のセンサーから得た計測値 D_i と同定手法の予測値 R_i には計測誤差 e^d とモデル誤差 e^m に起因する差異がある。

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \mathbf{D}_{true} + \mathbf{e}^d \\ \mathbf{R} &= \mathbf{D}_{true} + \mathbf{e}^m \end{aligned} \quad (4)$$

Keats ら[3]の研究に倣い、計測及びモデル誤差 e^d 、 e^m はともに平均値 0 でそれぞれ分散 $\sigma_{D,i}^2$ 、 $\sigma_{m,i}^2$ をもつ正規分布に従うと仮定する。本研究の計測は数値解析のデータを用いるため計測誤差は生じないので、尤度関数は次式によってモデル化できる。

$$P(\mathbf{D}|\mathbf{m}, I) \propto \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_i \frac{(\mathbf{D} - \mathbf{R}(\mathbf{m}))^2}{\sigma_{m,i}^2}\right] \quad (5)$$

事前には発生源のパラメータに関しては何も知らないものとする。また、発生源の各パラメータは互いに独立であり、あるパラメータから他のパラメータの情報を得られないと想定する。この状況で、事前確率分布は定義空間において一様分布と与える。

$$P(\mathbf{m}|I) = constant \quad (6)$$

以上より、事前確率分布は定数であるから、事後確率分布は次式のように尤度関数に比例する。

$$\begin{aligned} P(\mathbf{m}|\mathbf{D}, I) &\propto P(\mathbf{D}|\mathbf{m}, I)P(\mathbf{m}|I) \\ &\propto I(\mathbf{m} \in \mathbf{R}) \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_i \frac{(D_i - R_i(\mathbf{m}))^2}{\sigma_{m,i}^2}\right] \end{aligned} \quad (7)$$

この式の中で唯一の未知の項は予測値 $R_i(\mathbf{m})$ である。これらは次節に説明するように随伴濃度により計算できる。

2.2 随伴濃度

RANS モデルによって、空気汚染物質の時空間分布は、次の移流拡散方程式から計算できる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla C - \nabla \cdot (D_t \nabla C) = Q \quad (8)$$

C : concentration distribution of pollution 汚染物質の濃度
 \mathbf{U} : Averaged wind velocity 平均速度ベクトル
 Q : source term for pollution 発生項
 D_t : eddy diffusivity used to model the turbulent scalar fluxes
有効拡散係数

同式は、流れ場が時間的に定常な状態においては、

$$\mathbf{U} \cdot \nabla C - \nabla \cdot (D_t \nabla C) = Q \quad (9)$$

となる。連続的に発生している汚染源の発生項 Q は式(10)に従う。

$$Q = q_s \delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}_s) \quad (10)$$

δ は Dirac のデルタ関数である。

上記の平均速度ベクトルを反転した流れ場において、 i 番目の観測点から仮想的なスカラーを単位強度で連続的に放出した場合に得られる濃度 C_i^* を随伴濃度と呼ぶ。随伴濃度の輸送方程式は次式で表現できる。

$$-\mathbf{U} \cdot \nabla C_i^* - \nabla \cdot (D_t \nabla C_i^*) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{0,i}) \quad (11)$$

Pudykiewicz[1]あるいは菊本ら[2]の研究により、発生源のパラメータベクトルの関数として、観測点の濃度の予測値 R_i と随伴濃度場の間には、次のスカラー場の双対関係が存在する。

$$R_i(\mathbf{m}) = q_s C_i^*(\mathbf{X}_s) = q_s C_i^* \delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}_s) \quad (12)$$

2.3 線源モデル

式(12)の中で、対処が最も難しい項は Dirac のデルタ関数 $\delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}_s)$ である。従来の研究[3]–[6]は点発生源を同定したため、そのデルタ関数を避けて予想される点発生源の座標によって随伴濃度を選択する方法が用いられている。しかし、未知の幾何情報を持つ発生源を推定する場合、事前には発生源の形状がわからないので、どの点、いくつの点の座標を選択すべきかを定めることが難しい。従って、座標選択による手法は線形発生源に対応できない。本研究はガウス関数 f を用いてデルタ関数を代替し、発生源の形状を近似する方法を提案している。式(12)は次式になる。

$$R_i(\mathbf{m}) = q_s C_i^* f \quad (13)$$

また、実都市において、線形を持つ発生源は地面付近の水平面にあるという状況を考え、本研究の対象は特定の高さの平面内の線形発生源に限定する。従って、本研究は次式のような 2 次元ガウス関数を用いてその線形のデルタ関数を近似する。

$$\begin{aligned} f(x, y) &= A \exp(-(a(x - x_0)^2 + 2b(x - x_0)(y - y_0) + c(y - y_0)^2)) \\ a &= \frac{\cos^2 \theta}{2\sigma_x^2} + \frac{\sin^2 \theta}{2\sigma_y^2} \end{aligned} \quad (14)$$

$$b = -\frac{\sin 2\theta}{4\sigma_x^2} + \frac{\sin 2\theta}{4\sigma_y^2}$$

$$c = \frac{\sin^2 \theta}{2\sigma_x^2} + \frac{\cos^2 \theta}{2\sigma_y^2}$$

この関数の形状は 5 個の変量 x_0 、 y_0 、 θ 、 σ_x 、 σ_y と関連する。具体的には、 (x_0, y_0) は線を中心点の座標、 θ は線の傾斜角、 $2\sigma_x$ は線の長さ、 $2\sigma_y$ は線の幅である。事前には発生源の情報を持たないので、変量の値をランダムに指定すれば、同関数の形状はガウス関数の通常の楕円形のようなになる。推定中には観測情報の入力とともに変量の値が真値に近づき、形状も Fig. 1 に示すような線に近い形になる。

しかし、通常のガウス関数では線源の形状の近似として必ずしも精度は高くない。簡単な説明のため、Fig. 2 の 1 次元ガウス関数を考える。目標として点線を近似する場合で、通常のガウス関数(青い線)が両側と中心部の非一致により誤差を引き起こす。この誤差を減らすため、本研究はガウス関数に冪乗を加え、次式のスーパーガウス関数を使用する。

$$f(x, y) = A \exp(-a(x - x_0)^2 + 2b(x - x_0)(y - y_0) + c(y - y_0)^2)^\lambda \quad (15)$$

Fig. 2 が示すように、冪数が増えると、関数の形状が変化しやがて点線の目標とする形に接近する。両側の値が 0 になり、中心部も水平線に近づく。計算負荷と精度のバランスを考え、本研究は λ を 8 に設定することにした。この場合の関数の形状が Fig. 3 示される。発生源のパラメータベクトルは次のように表示される。

$$\mathbf{m} = (x_0, y_0, \theta, \sigma_X, \sigma_Y, q_s) \quad (16)$$

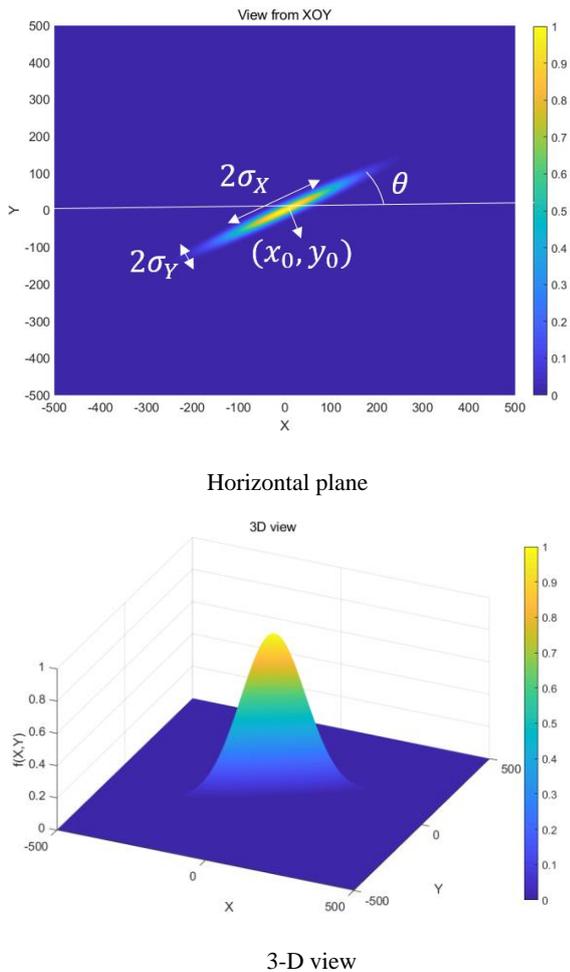


Figure 1. The schematic diagram of Gaussian function

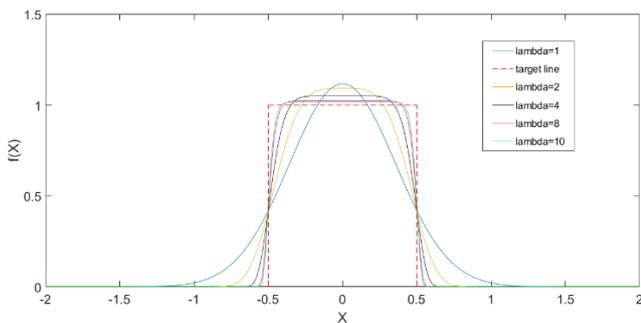


Figure 2. The shape of the Super-Gaussian function with different powers λ

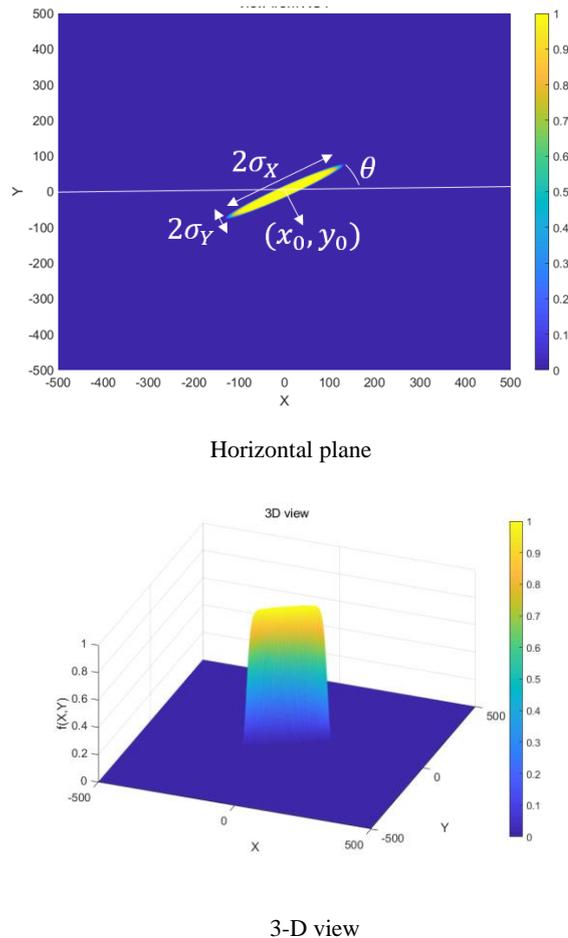


Figure 3. The schematic diagram of super Gaussian function

3. 都市境界層流れにおける線形発生源同定

3.1 問題設定

都市空間を模擬し、都市境界層が形成される 3 次元空間を設定し、その中で上述の手法を用いて線形汚染物質発生源を推定する。まず、CFD 解析による順流れ場での空気汚染物質の拡散解析を実施し、模擬的な観測データ D を得る。その結果に基づき、上述の同定手法及び 2 次元スーパーガウス関数モデルに従って元の線形発生源が適切に同定できるかどうかを検討する。

解析空間は、Fig. 4 に示すように $1500 \text{ m}(x) \times 500 \text{ m}(y) \times 1000 \text{ m}(z)$ の大きさを持つ。解析格子は、 x と y の方向に一樣間隔格子 ($\Delta x = \Delta y = 10 \text{ m}$) を使い、 z 方向に非均一格子を用いた (床面第 1 セルのメッシュ幅を 0.2 m とし、鉛直方向に 1.02 の拡大率とした)。乱流モデルは標準 $k - \epsilon$ モデルを使用し、定常状態に関する解析を行った。都市境界層を生成するため、毎ステップの流入部の境界条件は前のステップの流出部の結果を用いた。その他、詳細な解析条件を Table 1 に示す。

同定対象とする空気汚染物質の発生源は Fig. 7 に示す。発生源強度は $q_s = 1(1/s)$ であり、地面からの高さを 10 m と想定した。線源の長さを $100\sqrt{2} \text{ m}$ 、幅を $10\sqrt{2} \text{ m}$ 、中心点の座標を $(750, 500, 10)$ 、偏角を $\pi/4$ と設定した。

観測点の配置について、従来の研究[3], [6], [7]は Fig. 5 の

ように発生源の下流で均等な配置を用いている。この配置の点源に対する適用性を別途検討し、位置と強度の推定に十分な観測情報を提供できることを確認している。しかし、本研究は線源の位置と強度のほかに、幾何情報を同定しなければならない。従来の配置では幾何情報の推定が失敗する可能性がある。**Fig. 6** のような位置と強度が同じ、偏角が異なる 3 つ線源を考える。3 つの線源の幾何情報は全く異なるが、下流の観測点に対する影響が概ね一様だと言える。従って、同定手法は下流の観測値だけを用いて発生源の幾何情報を識別できない。発生源の付近で他の観測点を追加しなければならない。それを考え、本研究は 14 個の観測点を流れ場に配置し(**Fig. 7**)、それぞれの位置を **Table 2** に表示する。その中で 4、5、6、14 番目の観測点が発生源の付近に配置され、発生源の偏角の情報を提供できる。反転流れ場における各観測点からの随伴濃度の放出においては単位強度の発生とした。

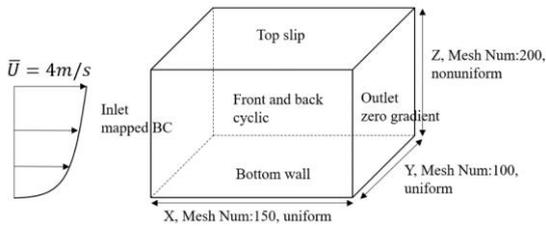


Figure 4. The calculation domain and boundary condition

Table 1. Numerical schemes and boundary condition

Time marching	Steady state (SIMPLE method)
Spatial discretization	Advection term: TVD scheme;
Inlet	$\bar{U}, k, \varepsilon, D_t$: mapped Outlet; C : constant (= 0); C^* : zero-gradient
Outlet	Flow: zero-gradient; C : zero-gradient; C^* : constant (= 0)
Top wall	Slip;
Bottom wall	Flow: generalized logarithmic law; Roughness height: 1.5m Davenport Roughness; C, C^* : zero-gradient
Source	C, C^* : Constant injection rate (= 1 1/s)

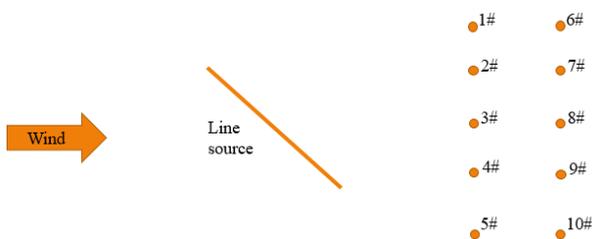


Figure 5. The calculation domain and boundary condition

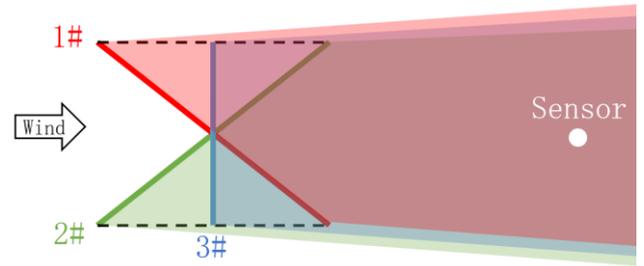


Figure 6. Three different line sources with similar concentration field.

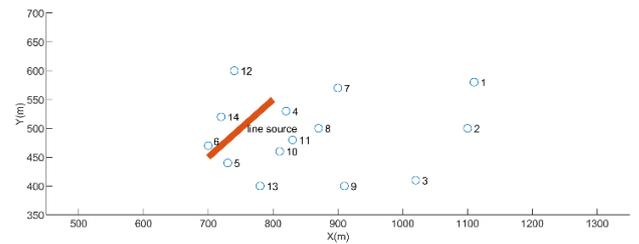


Figure 7. The positions of sensor set and line source

Table 2. Coordinates of measurement points

No.	x(m)	y(m)	z(m)	No.	x(m)	y(m)	z(m)
1	1110	580	10	8	870	500	20
2	1100	500	10	9	910	400	20
3	1020	410	10	10	810	460	30
4	820	530	10	11	830	480	30
5	730	440	20	12	740	600	30
6	700	470	20	13	780	400	30
7	900	570	20	14	720	520	30

3.2 汚染物質濃度と随伴濃度の分布

13 万回の繰り返し計算を経て安定した順流れ場の拡散場を取得した(**Fig. 8**)。その平均速度ベクトルを反転させ、各観測点から仮想的なスカラーを放出し、式(11)の拡散解析から随伴濃度の分布が得られる。**Fig. 9** は 8 番の観測点に対応する随伴濃度の空間水平分布を示す。

ブルから、推定パラメータの事後確率分布を評価した。

3.4 発生源パラメータの推定結果

ここまで述べた手法より、発生源パラメータベクトル $\mathbf{m} = (x_0, y_0, \theta, \sigma_x, \sigma_y, q_s)$ の 6 パラメータの同時推定を行った。

Fig. 10 は、14 個の観測点情報を用いて発生源同定した場合の各発生源パラメータの確率密度関数を示している。

発生源の中心点の座標及び強度は、確率密度の最頻値を推定値とすれば、真の座標と概ね一致している。そして、長さとは幅は真値と比べると、推定結果は 20 m 程度の誤差を含むことが確認された。その原因はスーパーガウス関数の誤差と考えられる。同モデルは線源の形状をかなりよく近似できるが、関数の両側の小さな誤差が避けられず、 $2\sigma_x$ と有効的な線の長さの間にわずかな差が存在する。ただし、今回の推定の解像度を 10 m と設定したことを考えれば、20 m の誤差は許容範囲に入ると思われる。また、偏角の推定の確率分布では高確率領域が真値の周囲に集中した。本研究のセンサー配置では、線源は 4、5、6、14 番目の観測点の間にあり多少回転してもセンサーに対する影響がほとんど変わらないため推定の変動が生じたと考えられる。従って、その偏角の誤差を抑えるため、他の観測点を追加して線源の回転を避ける必要がある。推定の精度が結合確率分布 (**Fig. 11**) から確認することができる。可能性のある領域はほぼ真の発生源位置と重なり、形状と角度も似ている。

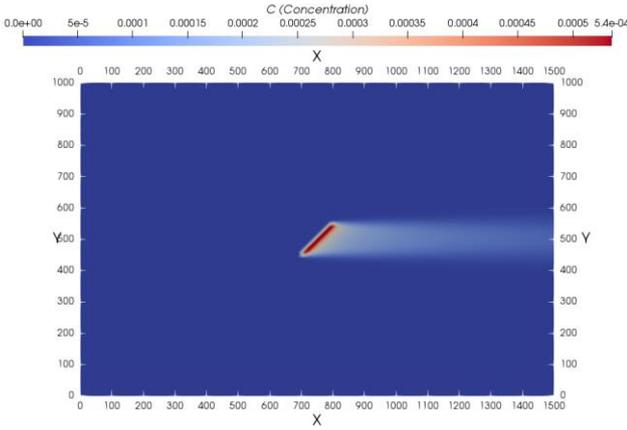


Figure 8. The forward transport field (height = 10 m)

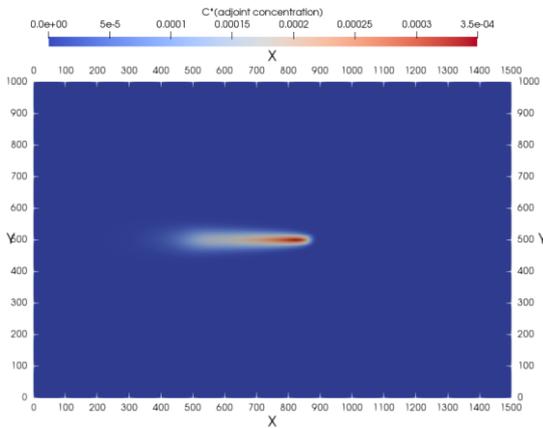


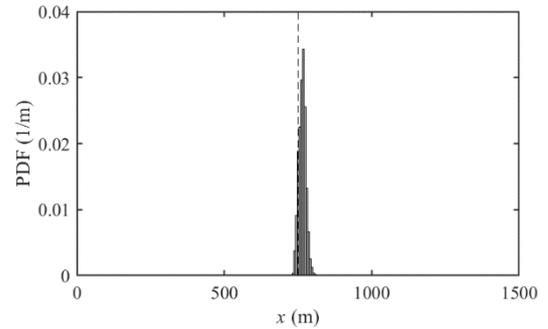
Figure 9. The adjoint transport field (height = 10 m)

3.3 発生源パラメータの推定条件

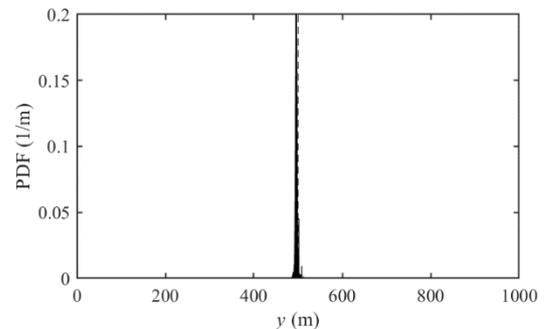
ベイズ推定によって確率的に発生源パラメータの推定を行う。式(7)の事後確率を評価するためには、モデル誤差 σ_m^2 の数値を与えなければならない。モデル誤差について、従来の研究[3], [4]では計測濃度に従って毎観測点の数値を計測の数%に手で設定したが、その設定方法には議論の余地がある。本研究ではいくつかの観測点の濃度が極めて小さく、計測濃度の数%の誤差を設定すれば、分母とする σ_m^2 の数値が 0 に近づき、式(7)の計算が不安定になる。従って、次式のように設定した。

$$\sigma_{m,i}^2 = \begin{cases} 10^{-14} & \text{if } D_i \leq 10^{-9}; \\ 0.3D_i & \text{otherwise;} \end{cases} \quad (17)$$

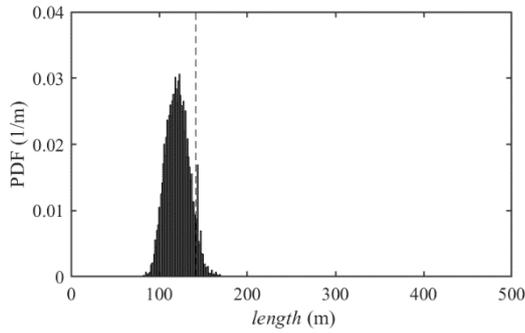
式(7)の事後確率分布を評価するために、本研究ではマルコフ連鎖モンテカルロ法(Markov Chain Monte Carlo, MCMC)を用いた。MCMC とは、ランダムウォークを用いた多変量の確率分布に関する効率的なデータサンプリング手法である。MCMC のサンプリング手法としては Metropolis-Hastings 法を採用した。サンプル列の確率密度分布は事後確率分布に一致し、その事後確率分布から発生源のパラメータの推定値や信頼区間などの不確かさを調べることができる。適当な初期パラメータから MCMC を使用して 10^6 個のサンプルを生成した。初期値依存性を回避するため、初期の 10^5 個を除いたサン



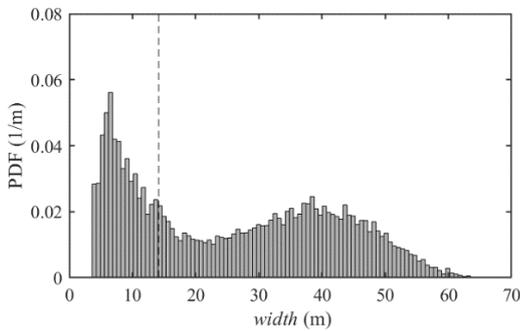
(a) x-coordinate (middle point)



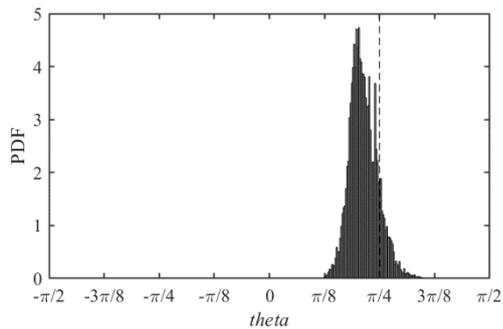
(b) y-coordinate (middle point)



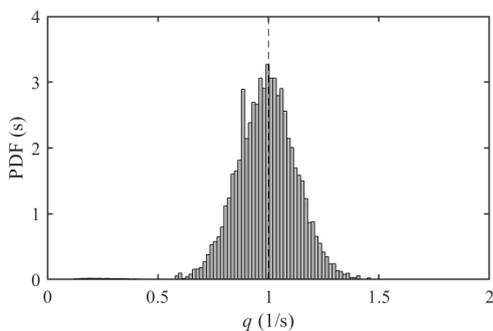
(c) length of the line



(d) width of the line



(e) inclined angle of the line



(f) strength of the source

Figure 10. PDF of source paramters (dotted line: true value)

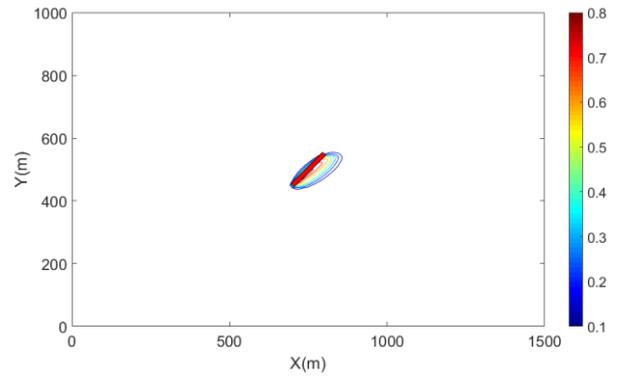


Figure 11. The contour of joint PDF of geometric parameters:

coordinates, length, width and angle

(red patch: line source)

4. まとめ

スーパーガウス幾何モデルを用いた汚染物質の線形発生源のベイズ推定方法を導入し、都市境界層での数値実験を実施し同手法の有効性を検証した。その結果、センサーから十分な観測情報を得られれば、線形発生源の位置、強度と幾何情報を同時に、それらの確率密度分布の形で推定できることを示した。

一方、理想的な点発生源と比べると、従来の観測点配置で提供された情報は線源の幾何情報を推定するには不十分である。本研究では、センサー配置により線源の幾何情報の推定結果が変動することを確認した。線形発生源に対する最も有効なセンサー配置の与え方は今後の検討課題とする。

参考文献

- [1] J. A. Pudykiewicz, “Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters,” *Atmos. Environ.*, vol. 32, no. 17, pp. 3039–3050, Sep. 1998.
- [2] 菊本英紀, 大岡龍三, and 加藤信介, “反転流れ場におけるトレーサー拡散に基づく環境汚染物質の発生源同定,” 日本建築学会環境系論文集, vol. 81, no. 725, pp. 607–614, 2016.
- [3] A. Keats, E. Yee, and F.-S. Lien, “Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment,” *Atmos. Environ.*, vol. 41, no. 3, pp. 465–479, Jan. 2007.
- [4] 菊本英紀, 崔元準, 大岡龍三, and 加藤信介, “随伴濃度とベイズ推定を用いた2次元居室空間における環境汚染物質の発生源同定,” 日本流体力学会年会, 2016.
- [5] F. Xue, H. Kikumoto, X. Li, and R. Ooka, “Bayesian source term estimation of atmospheric releases in urban areas using LES approach,” *J. Hazard. Mater.*, vol. 349, no. January, pp. 68–78, May 2018.
- [6] F. Xue, X. Li, R. Ooka, H. Kikumoto, and W. Zhang, “Turbulent Schmidt number for source term estimation using Bayesian inference,” *Build. Environ.*, vol. 125, pp. 414–422, Nov. 2017.
- [7] P. Kumar, A.-A. Feiz, S. K. Singh, P. Ngae, and G. Turbelin, “Reconstruction of an atmospheric tracer source in an urban-like environment,” *J. Geophys. Res. Atmos.*, vol. 120, no. 24, pp. 12589–12604, Dec. 2015.