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

SOURCE IDENTIFICATION OF ENVIRONMENTAL POLLUTANTS BASED ON
TRACER DISPERSION IN REVERSED FLOW FIELD

菊本英紀*, 大岡龍三**, 加藤信介***

Hideki KIKUMOTO, Ryoza OOKA and Shinsuke KATO

This study presents a novel method for identifying the source of an environmental pollutant continuously released from a point source in a turbulent flow field at a statistically steady state. The method employs the analysis of tracer dispersion in a reversed flow field (RFF) released from observation points of the pollutant. The RFF is artificially produced from the forward flow field (FFF); the direction of temporal progress and velocity vectors are produced in the opposite direction to those in the FFF. Based on the probabilistic behavior of a virtual particle in the flow fields, we derived a symmetric property of the expected staying time (EST) of a pollutant and tracer particles in the FFF and RFF. The symmetry of the EST is an indication of the duality of the scalar fields, which states that a measured concentration of the pollutant and a distribution of the EST of the tracer give the estimated source strength as a function of the source position. When multiple observation points are available, the source position can be determined by the uniqueness of the estimated source strength at a point. This paper introduces the basic idea of the present method based on a physical consideration of the particle behavior in the RFF. An example of the source identification procedure is also presented for pollutant dispersion in a two-dimensional uniform flow field.

Keywords: Inverse problem, Turbulent dispersion, Particle behavior, Duality

逆問題, 乱流拡散, 粒子挙動, 双対関係

1. はじめに

都市・建築空間中においてある環境汚染物質の濃度が検出された場合、その物質の発生源（発生位置および強度）を迅速に特定できれば、同物質の濃度や被害低減のための効果的な対応が可能となる。しかし、流れ場や発生源の十分な情報が与えられ、その結果生じる濃度分布を予測する順問題としての拡散解析に対し、結果としての濃度計測値からその原因としての発生源を推定する発生源同定の問題は、一般に逆問題の性質を示し適切な解を得るのが難しい^{1),2)}。

発生源同定は、環境工学の様々な分野における普遍的な問題として、これまでも多くの研究がなされてきた。拡散現象におけるガウス・ブルームモデル³⁾など発生源位置・強度と観測濃度との関係が解析的に与えられる場合には、その方程式を逆に解くことで観測濃度から発生源位置および強度を推定することができる。Islam⁴⁾は大気拡散、Ala⁵⁾や Alapati, Kabala⁶⁾は地下水汚染の問題において解析的手法により発生源の同定を行っている。しかし、解析的關係が得られるのは、一様流れ場など単純な状況に限られる。

発生源位置・強度と観測濃度との関係を利用する他の方法として、最適化手法による発生源同定も検討されている。そこでは、考えられる様々な発生条件と観測点での濃度応答との関係を事前に調べて

おき、実際に環境汚染物質の濃度が計測された場合には、その観測濃度と計算濃度との誤差を最小化するよう最適な発生源位置および強度を探索する。例えば、Gorelick⁷⁾は地下水汚染の2次元平面中の問題に最適化アプローチによる発生源同定を適用している。また建築分野においても、石田ら⁸⁾は Computer fluid dynamics (CFD) による拡散解析を活用し、3次元空間中の解析格子点各点からの仮想的なトレーサーの単位放出と観測点での非定常濃度応答との関係を調べ、その応答係数行列を解くことで発生源位置および発生量の時系列変化を推定する方法を提示している。しかし、潜在的な流れ場および発生源の組み合わせは膨大な数に及ぶため、これら最適化手法における事前の拡散解析の計算コストは自然と高いものとなる。

発生源同定の問題を時間逆転積分の問題として捉え、直接的に過去の状況を解析する手法も検討されている。このような手法では、汚染物質が放出された後、環境中にある程度拡散してしまった状況において、その時点の濃度分布を初期条件として、発生時点と考えられる時間まで移流拡散方程式を時間逆方向に積分することで、過去の濃度分布を解析し、最も高濃度となる位置を発生源として同定する。実際の解析は、移流や拡散の方向を反転させ、時間を正の方向に積分することで実現されるが、拡散項の係数が負になることで

* 東京大学生産技術研究所 助教・博士(工学)
** 東京大学生産技術研究所 教授・博士(工学)
*** 東京大学生産技術研究所 教授・工博

Research Assoc., Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Ph.D.(Eng.)
Prof., Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Ph.D.(Eng.)
Prof., Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Dr.Eng.

数値計算は極めて不安定となる^{9),10)}。

小林ら¹¹⁾は、空気余命の評価手法として、このCFDによる時間逆転積分の手法を室内でのトレーサ拡散解析に適用した。しかし、計算安定化のためとして拡散項の係数は正のまま解析が実施された。Zhang, Chen²⁾は、負の係数をもつ拡散項の2階微分を4階微分に変更して安定性を確保するQuasi-reversibility手法¹²⁾を採用し、2次元航空機キャビンと3次元オフィス空間での発生源同定を行っている。Badyら¹³⁾あるいは安部、加藤らの一連の研究^{9),10),14),15)}では濃度あるいは濃度フラックスへフィルター操作を施すことで負拡散に起因する数値不安定性を緩和し、境界層や建物周りの拡散場における発生源同定を試みている。しかし、これらの負拡散への安定化手法が加わることで、時間順方向での移流拡散方程式とは支配方程式が厳密に一致しなくなるため、既往研究においても発生源近傍の濃度が高くなるといった程度の結果しか得られていない。

このような状況の中、同様に移流方向を反転した流れ場での拡散解析を利用した随伴法(Adjoint method)に基づく発生源同定手法が開発されている。同手法では、環境汚染物質の濃度場に対する随伴濃度場と呼ばれる仮想的なスカラーを用意する。このスカラーは、汚染物質の観測点から単位発生源強度で放出され、移流方向を反転した流れ場でその濃度分布が解析される。ただし、拡散に関してはこの反転流れ場での正の拡散として取り扱われるため、先述の移流拡散方程式の時間逆転積分のような負拡散による計算不安定は生じない。そして、定常状態においては、汚染物質濃度と随伴濃度の輸送現象の線形性から、移流拡散方程式を用いて解析的に(1)式のようなスカラー場の双対関係(Duality)と呼ばれる関係が導かれる¹⁶⁾。

$$c(\mathbf{x}_o) = q_s c_a(\mathbf{x}_s) \quad (1)$$

ここで、 $c(\mathbf{x}_o)$ は観測点 $\mathbf{x}_o$ における環境汚染物質濃度、 $c_a(\mathbf{x}_s)$ は発生源位置 $\mathbf{x}_s$ での随伴濃度、 q_s は環境汚染物質の発生源強度である。

随伴濃度場を用いた発生源同定は、例えば、Neupauer, Wilson¹⁷⁾が地下水汚染の問題に、Pudykiewicz¹⁸⁾が全球スケールでの放射線物質のモニタリングに適用している。また、気象スケールでの大気拡散の問題にも多く適用例があり¹⁹⁻²¹⁾、Keatsら¹⁶⁾は都市スケールでの汚染物質の発生源同定に用いている。

随伴濃度は、ある位置に汚染物質発生源があった場合の観測点濃度への影響度を示すものと解釈される。多数の発生源候補位置に対して各々順方向の拡散解析を行う方法と比較し、随伴法は格段に小さい計算コストで発生源と観測濃度との関係が調べられるため、発生源同定において大変有用な手法である。しかし、随伴濃度は解析的な観点から導入されるためその物理量としての意味が明確で無い。

そこで本研究ではまず、移流方向を反転した流れ場での粒子の拡散挙動を考察する。そして、粒子位置の確率密度の観点から先の双対関係を導出するとともに随伴濃度の新たな物理的解釈を与える。また、一般の乱流拡散場において点源から放出された環境汚染物質に関して、この双対関係を利用した発生源の同定手法を提案する。最後に、2次元一様流れ場での環境汚染物質の拡散問題を題材に、本手法に基づく発生源同定の具体例を紹介する。

なお、本手法においては、流れ場や拡散場の解析、濃度計測など必要とされる各手続きに全く誤差が混入しない理想的な状況においては、 n 次元空間における発生源位置および発生源強度の計 $n+1$ 個の未知数に対して、それに等しい $n+1$ 個の観測点において環境汚染

物質の濃度が観測されれば、原理的には厳密な意味で環境汚染物質の発生源位置および強度が同定される。

2. 前提条件

本研究が想定する流れおよび環境汚染物質発生の条件を述べる。まず、流れ場は非一様な一般乱流場を対象とするが、その統計的性質は定常で、かつその空間的分布は極めて高い精度で解析可能であるとする。また、環境汚染物質は、流れに完全に追従し、かつ流れ場には影響を与えないパッシブスカラーとしての性質を示し、化学反応等の質的变化や沈着現象などによる消失も生じないものと仮定する。そして、このような物質が、先の流れ場の中で未知の位置に存在するひとつの点源から、時間的に一定の未知の発生源強度で発生し、その濃度を十分な数の観測点で計測したとする。

3. 発生源同定の理論と手法

3.1. 粒子挙動の確率的表現と濃度の関係

まず、流れに追従する粒子の一般流れ場における挙動を考察し、拡散解析が与える濃度と粒子挙動の確率的表現との関係を考察する。

時刻 t_1 に位置 $\mathbf{x}_1$ にいた粒子が時刻 t_2 に位置 $\mathbf{x}_2$ にいる単位体積あたりの確率密度関数を $p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1)$ と表現する。また、粒子の移動を追跡する一定の検査空間を設定し、その体積を V とする。

時刻 t_1 に $\mathbf{x}_1$ から放出された粒子が時刻 $t_2 (t_1 \leq t_2)$ にこの検査空間内に存在する確率を $P_V(\mathbf{x}_1, t_1, t_2)$ とすれば、次の関係がある。

$$\int_V p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_1) d\mathbf{x}_2 = P_V(\mathbf{x}_1, t_1, t_2) \quad (2)$$

しかし、定常状態を考えれば P_V は t_1, t_2 に依らず、それらの差 $t_3 = t_2 - t_1$ のみの関数となり、(2)式は(3)式のように書き換えられる。

$$\int_V p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_2 - t_3) d\mathbf{x}_2 = P_V(\mathbf{x}_1, t_3) \quad (3)$$

$P_V(\mathbf{x}_1, t_3)$ は、 $t_3 = 0$ で1、 $t_3 \rightarrow \infty$ で0となるような関数であり、 $\mathbf{x}_1$ から放出された粒子がその後この検査空間内に留まっている平均的時間を T とすれば(4)式を満たす。

$$\int_0^\infty P_V(\mathbf{x}_1, t_3) dt_3 = T \quad (4)$$

定常的に単位時間あたり q の割合で $\mathbf{x}_1$ から粒子を放出し続ける。この場合、検査空間内に平均的に見出す粒子の数は、(5)式で与えられる。ただし、 C は検査空間内の平均粒子濃度である。

$$\begin{aligned} \int_0^\infty q \int_V p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_2 - t_3) d\mathbf{x}_2 dt_3 \\ = q \int_0^\infty P_V(\mathbf{x}_1, t_3) dt_3 = qT = CV \end{aligned} \quad (5)$$

またここで、 $\mathbf{x}_1$ から放出された粒子が $\mathbf{x}_2$ 周りの微小体積内に滞在する時間の単位体積あたりの期待値を $s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1)$ と表記すれば、ひとつの粒子挙動の確率密度と次の関係がある。

$$s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) = \int_0^\infty p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_2 - t_3) dt_3 \quad (6)$$

これを用いれば、 $s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_2$ によって粒子が $\mathbf{x}_2$ 周りの微小体積 $d\mathbf{x}_2$ の中に滞在する時間の期待値が表される。

積分順序の可換性に注意すれば、(5)式より、

$$\int_V \int_0^\infty p(\mathbf{x}_2, t_2 | \mathbf{x}_1, t_2 - t_3) dt_3 d\mathbf{x}_2 = \int_V s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_2 = T \quad (7)$$

これもまた $\mathbf{x}_1$ から放出されたひとつの粒子の検査空間内に留まる平均的時間が T であるという設定と対応している。

検査空間内の平均濃度は $s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1)$ を用いて(5)式、(7)式から次のように書ける。

$$C = \frac{q}{V} \int_V s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) d\mathbf{x}_2 \quad (8)$$

また、 C は定常状態における各点の平均濃度 $c(\mathbf{x}_2)$ を用いて次のように表現できる。

$$C = \frac{1}{V} \int_V c(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_2 \quad (9)$$

(8)式と(9)式を見比べれば、(10)式の関係が得られる。

$$c(\mathbf{x}_2) = q s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) \quad (10)$$

つまり、定常状態におけるある位置の濃度とは、粒子の発生強度と、その粒子が対象位置周辺の微小空間に滞在する時間の単位体積あたりの期待値とを掛け合わせたものに等しい。したがって、ある発生強度 q における濃度分布 $c(\mathbf{x}_2)$ が得られれば、(10)式から $s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1)$ を評価できる。

3.2. 反転流れ場における粒子挙動

検査空間内において $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ ($\mathbf{U}$: 平均速度ベクトル; $\mathbf{u}$: 乱れ速度ベクトル) の流れ場が存在し、その中で汚染物質の拡散が生じたとする。その際、各位置の速度と時間方向を反転した流れ場 $\tilde{\mathbf{u}}^*(\mathbf{x}, t^*) = -\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ ($\mathbf{U}^*(\mathbf{x}) = -\mathbf{U}(\mathbf{x})$, $\mathbf{u}^*(\mathbf{x}, t^*) = -\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, $t^* = -t$) を人為的に作成し、これを本研究では反転流れ場 (Reversed flow field) と呼ぶ。また、元の流れ場 $\tilde{\mathbf{u}}$ を順流れ場 (Forward flow field) と呼ぶ。反転流れ場での変数であることを明記する場合には変数の右肩に* (アスタリスク) を付す。

定常な乱流拡散場においては、粒子は平均的にその場の平均流に従って移動するとともに、それと独立して、乱流拡散あるいは分子拡散などによって、ランダムな方向に、統計的にはその位置の拡散能力に応じた距離を移動する。例えば、順流れ場においてひとつの粒子が Fig. 1(1) に示すような経路に沿って、時刻 t から $t + \Delta t$ の間に $\mathbf{x}_1$ から $\mathbf{x}_2$ まで移動したとする。ここで、これに対応する反転流れ場を用意し、 $\mathbf{x}_2$ からひとつの粒子が放出されたとすれば、Fig. 1(2) のよう

Fig. 1 Conceptual paths of the particle behavior in the forward flow field and its corresponding reversed flow field.

に時刻 t^* から $t^* + \Delta t$ の間に、ちょうど Fig. 1(1) の経路を逆にたどる形で $\mathbf{x}_1$ に到達する経路があり得る。

位置 $\mathbf{x}$ 、時刻 t における瞬時速度 $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ を用いて、流れ場に対してパッシブで完全に追従する粒子の位置の時間変化は(11)式のように書ける。

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) \quad (11)$$

順流れ場における粒子の $\mathbf{x}_1$ から $\mathbf{x}_2$ までの移動を記述すれば、

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1 + \int_{t(\mathbf{x}_1)}^{t+\Delta t(\mathbf{x}_2)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t'), t') dt' \quad (12)$$

のように書けるが、(12)式はまた次のように変形できる。

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2 - \int_{t(\mathbf{x}_1)}^{t+\Delta t(\mathbf{x}_2)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t'), t') dt' \quad \cdots (A)$$

$$= \mathbf{x}_2 + \int_{t+\Delta t(\mathbf{x}_2)}^{t(\mathbf{x}_1)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t'), t') dt' \quad \cdots (B)$$

$$= \mathbf{x}_2 - \int_{t^*(\mathbf{x}_2)}^{t^*+\Delta t^*(\mathbf{x}_1)} \tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}(t''), t'') dt'' \quad (dt'' = -dt') \quad \cdots (C)$$

$$= \mathbf{x}_2 + \int_{t^*(\mathbf{x}_2)}^{t^*+\Delta t^*(\mathbf{x}_1)} \tilde{\mathbf{u}}^*(\mathbf{x}(t''), t'') dt'' \quad \cdots (D)$$

ここで、上式(A)では、(12)式の右辺の積分項を移動したが、時間積分に対応する空間経路は $\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_2$ のままである。(B)では、順流れ場で時間の積分方向を逆にし、対応する空間経路を $\mathbf{x}_2 \rightarrow \mathbf{x}_1$ に変化した。(C)では、順流れ場で時間の進行方向を反転させ、(D)において順流れ場を反転流れ場で置き換えた。

(12)式と(13)式より、順流れ場と反転流れ場での $\mathbf{x}_1$ と $\mathbf{x}_2$ の間の移動には対称性が存在する。また、各位置での順流れ場および反転流れ場における乱流変動ベクトルの確率密度関数 $p(\mathbf{u}(\mathbf{x}))$, $p(\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))$ には、 $p(\mathbf{u}(\mathbf{x})) = p(-\mathbf{u}^*(\mathbf{x}))$ の関係がある。つまり、平均流の対称性と併せ、順流れ場と反転流れ場の同位置では、粒子は同確率で正反対の方向に進む。よって、粒子が反転流れ場において Fig. 1(2) のような経路をとる確率は、順流れ場において Fig. 1(1) のような経路をとる確率と同じである。

順流れ場において $\mathbf{x}_1$ から出発した粒子は、Fig. 1(1) に示した以外にも無数の粒子経路をとって移動する可能性があり、あるものは $\mathbf{x}_2$ を通過し、他方で当然 $\mathbf{x}_2$ を通過しないものもある。しかし、順流れ場において $\mathbf{x}_1$ から放たれた粒子が $\mathbf{x}_2$ を通過するような経路をとったとするならば、必ずそれに対応して $\mathbf{x}_2$ から放たれた粒子が $\mathbf{x}_1$ を通過する経路が時空間的に反転流れ場においても発生しており、順流れ場と反転流れ場において $\mathbf{x}_1$ と $\mathbf{x}_2$ との間を粒子が移動する各経路の発生確率は等しい値をとる。

以上の議論より、順流れ場において時刻 t に $\mathbf{x}_1$ にいた粒子が時刻 $t + \Delta t$ に $\mathbf{x}_2$ にいる確率の密度関数 $p(\mathbf{x}_2, t + \Delta t | \mathbf{x}_1, t)$ と、反転流れ場において時刻 t^* に $\mathbf{x}_2$ にいた粒子が時刻 $t^* + \Delta t$ に $\mathbf{x}_1$ にいる確率の密度関数 $p^*(\mathbf{x}_1, t^* + \Delta t | \mathbf{x}_2, t^*)$ は互いに等しい ((14)式)。

$$p(\mathbf{x}_2, t + \Delta t | \mathbf{x}_1, t) = p^*(\mathbf{x}_1, t^* + \Delta t | \mathbf{x}_2, t^*) \quad (14)$$

(14)式と(6)式から、定常状態の順流れ場において $\mathbf{x}_1$ から放出された粒子が $\mathbf{x}_2$ に滞在する時間の期待値 $s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1)$ と、反転流れ場において $\mathbf{x}_2$ から放出された粒子が $\mathbf{x}_1$ に滞在する時間の期待値 $s^*(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2)$ との間には(15)式の関係が導かれる。

$$s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) = s^*(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2) \quad (15)$$

つまり、 $s(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1)$ を知りたければ、反転流れ場を用意し、粒子を観測

した $\mathbf{x}_2$ から仮想的なトレーサーを放出することで、その濃度分布と (10) 式の関係から $s^*(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2)$ を調べれば良い。

3.3. スカラー場の双対関係

位置 $\mathbf{x}_s$ から発生強度 q_s で環境汚染物質が放出され、観測点 $\mathbf{x}_o$ にて同物質の濃度 $c(\mathbf{x}_o)$ が計測されたとする。また、対応する反転流れ場において、観測点 $\mathbf{x}_o$ から発生強度 q^* で仮想的なトレーサーを放出し、発生源位置 $\mathbf{x}_s$ において同トレーサーの濃度は $c^*(\mathbf{x}_s)$ であったとする。いま、仮想的なトレーサーを単位強度で放出した場合 ($q^*=1$) には、(10) 式より $c^*(\mathbf{x}_s)=s^*(\mathbf{x}_s | \mathbf{x}_o)$ である。したがって、(10) 式、(15) 式を用いれば、これらの量の間には次のような関係が存在する。

$$c(\mathbf{x}_o) = q_s s^*(\mathbf{x}_s | \mathbf{x}_o) = q_s c^*(\mathbf{x}_s) \quad (16)$$

これは、随伴法におけるスカラー場の双対関係 ((1) 式) に他ならない¹⁶⁾。また、 $c_a(\mathbf{x}_s) = s^*(\mathbf{x}_s | \mathbf{x}_o)$ であるから随伴濃度とは、反転流れ場において観測点から放出された仮想粒子が汚染物質発生源周囲の微小体積に滞在する時間の単位体積あたりの期待値である。

3.4. 発生源の同定方法

対象とする環境汚染物質の点源が未知の位置 $\mathbf{x}_s$ に存在し、順流れ場 $\tilde{\mathbf{u}}$ の中で未知の発生強度 q_s でその物質を定常的に発生しているとする。その環境汚染物質の濃度を複数の観測点 $\mathbf{x}_{o,i}$ ($i=1, 2, \dots, N$; N は観測点数) で計測し、それぞれ観測した濃度が $c_{o,i}$ だったとする。

そこで反転流れ場 $\tilde{\mathbf{u}}^* = -\tilde{\mathbf{u}}$ を用意し、その中で観測点 $\mathbf{x}_{o,i}$ それぞれの位置に仮想的なトレーサーの発生源を設定し、それぞれ q_i^* の発生強度で定常的にトレーサーを発生する。 $\mathbf{x}_{o,i}$ に設置したトレーサー発生源により $\mathbf{x}$ に生じる濃度を $c_i^*(\mathbf{x})$ とすれば、(10) 式の関係から次式のように $s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i})$ が求まる。

$$s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i}) = \frac{c_i^*(\mathbf{x})}{q_i^*} \quad (17)$$

$s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i})$ を用いれば、次式のように環境汚染物質の発生源が $\mathbf{x}$ にあると仮定した場合の発生強度の推定値 $q_{s,i}(\mathbf{x})$ が求まる。

$$q_{s,i}(\mathbf{x}) = \frac{c_{o,i}}{s(\mathbf{x}_{o,i} | \mathbf{x})} = \frac{c_{o,i}}{s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i})} \quad (18)$$

この手続きを N 個の観測点それぞれに対して実施すれば、発生源の候補となる位置 $\mathbf{x}$ に対して N 個の発生強度の推定値 $q_{s,i}$ が算出できる。しかし、物理的に発生強度は唯一の値でなければならない。したがって、次式を満たす $\mathbf{x}_s$ が環境汚染物質の発生源位置と定まり、同時に $q_{s,i}(\mathbf{x}_s)$ が環境汚染物質の発生強度である。

$$q_{s,1}(\mathbf{x}_s) = q_{s,2}(\mathbf{x}_s) = \dots = q_{s,N}(\mathbf{x}_s) \quad (19)$$

ただし、 $q_{s,i}(\mathbf{x})$ の計算において (18) 式を用いるが、 $s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i})$ は極めて小さい値をもつ可能性があり、 $s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i})$ が分母にあると $q_{s,i}(\mathbf{x})$ の計算が数値的に不安定となりうる。そこで、実際の計算においては、(18) 式あるいは (19) 式の各項の逆数を取り、(20) 式を満たす $\mathbf{x}_s$ を求めるのがよい。

$$\frac{1}{q_{s,1}(\mathbf{x}_s)} = \frac{1}{q_{s,2}(\mathbf{x}_s)} = \dots = \frac{1}{q_{s,N}(\mathbf{x}_s)} \quad (20)$$

$$\text{or } \frac{s^*(\mathbf{x}_s | \mathbf{x}_{o,1})}{c_{o,1}} = \frac{s^*(\mathbf{x}_s | \mathbf{x}_{o,2})}{c_{o,2}} = \dots = \frac{s^*(\mathbf{x}_s | \mathbf{x}_{o,N})}{c_{o,N}}$$

発生源同定における未知数は発生源の位置ベクトル $\mathbf{x}_s$ の各成分と発生強度 q_s であり、 n 次元空間での問題では未知数の数は $n+1$ で

ある。したがって、濃度計測や拡散解析などここまでの手続きにおいて誤差が全く混入しない理想的な状況においては、最低限 $n+1$ 個の観測点で濃度が計測できれば発生源の同定が可能となる。

4. 発生源同定のアルゴリズム

ここまでの議論を踏まえ、本研究が提案する発生源同定のアルゴリズムを以下にまとめる。

- ① N 個の観測点において対象とする環境汚染物質の濃度 $c_{o,i}$ ($i=1, 2, \dots, N$) を計測する。
- ② 検査空間中の順流れ場 $\tilde{\mathbf{u}}$ を解析的または数値的に得る。
- ③ 反転流れ場 $\tilde{\mathbf{u}}^* = -\tilde{\mathbf{u}}$ を作成する。ただし、平均場を解析するモデルにおいては、平均流れ場を反転すれば良い ($\mathbf{U}^* = -\mathbf{U}$)。
- ④ 反転流れ場においてひとつの観測点 $\mathbf{x}_{o,i}$ から仮想的なトレーサーを発生強度 q_i^* で放出し、解析的または数値的にその濃度分布 $c_i^*(\mathbf{x})$ を得る。
- ⑤ $c_i^*(\mathbf{x})$ から $s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i}) = c_i^*(\mathbf{x})/q_i^*$ を計算し、さらに $1/q_{s,i}(\mathbf{x}) = s^*(\mathbf{x} | \mathbf{x}_{o,i})/c_{o,i}$ の分布を求める。
- ⑥ ④と⑤の手続きを N 個の観測点すべてに関して実施する。
- ⑦ $1/q_{s,1}(\mathbf{x}_s) = 1/q_{s,2}(\mathbf{x}_s) = \dots = 1/q_{s,N}(\mathbf{x}_s)$ となる $\mathbf{x}_s$ を求める。
- ⑧ $\mathbf{x}_s$ が環境汚染物質の発生源位置であり、 $q_{s,i}(\mathbf{x}_s)$ が環境汚染物質の発生強度 q_s である。

5. 発生源同定の例 (2次元一様流れ場での環境汚染物質拡散)

本手法を用いた発生源同定の具体例を示す。本手法は、原理的には3次元空間における一般乱流場での拡散問題においても有効である。しかし、問題を簡単にし、かつ数値解析における誤差の混入などを避けるため、本論文では2次元一様流れ場での環境汚染物質の拡散という単純な状況を設定することにした。

5.1. 問題設定

2次元空間 (x - y 平面) 内での拡散現象を考え、検査空間中において一様に $\mathbf{U}=(u, v)=(5, 0)$ の平均流れ場が存在する。環境汚染物質の拡散係数 γ は検査空間中で一様に $\gamma=4$ とする。実際に発生源同定が必要とされる状況では未知のものであるが、この例題においては、環境汚染物質の発生源が $\mathbf{x}_s = (x_s, y_s) = (3, 2)$ にあり、発生強度は $q_s = 10$ であるとし、これらが同定対象のパラメータとなる。対象物質の観測点は3点 (Obs1, Obs2, Obs3) あり、それぞれの位置は $\mathbf{x}_{o,1}=(12, 6)$, $\mathbf{x}_{o,2}=(21, 3)$, $\mathbf{x}_{o,3}=(15, -2)$ であるとする。ただし、ここに挙げた以

Fig. 2 Concentration distribution of the environmental pollutant in a two-dimensional uniform flow field. Circle shows the position of the pollutant source; Square shows positions of three observation sites.

上の数値は、問題の設定上便宜的に与えたものであり、特に物理的根拠があるものではない。

5.2. 順流れ場での濃度分布

前節に記したような単純な拡散場の状況においては、順流れ場での濃度 $c(\mathbf{x})$ ($x > x_s$) はガウス・ブルームモデル³⁾に従って(21)式のように分布する。ただし、ここで σ は拡散幅である。

$$c(\mathbf{x}) = \frac{q_s}{u\sqrt{2\pi}\sigma^2} \exp\left[-\frac{(y-y_s)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (21)$$

$$\sigma = (2\gamma t)^{1/2} = \left[2\gamma \frac{x-x_s}{u}\right]^{1/2}$$

したがって、観測点 $\mathbf{x}_{o,i} = (x_{o,i}, y_{o,i})$ では濃度は(22)式ようになる。

$$c_{o,i} = c(\mathbf{x}_{o,i}) = \frac{q_s}{\sqrt{4\pi\gamma u}(x_{o,i}-x_s)} \exp\left[-\frac{u(y_{o,i}-y_s)^2}{4\gamma(x_{o,i}-x_s)}\right] \quad (22)$$

具体的な濃度の値は Obs1, Obs2, Obs3 で順に $c_{o,1}=0.121$, $c_{o,2}=0.146$, $c_{o,3}=0.120$ のように計測される。Fig. 2 に環境汚染物質の濃度分布を示す。ただし、発生源同定を行うにあたっては当然このような濃度分布の全体像は把握できておらず、流れ場 $\mathbf{U}$ と観測濃度 $c_{o,i}$ ($i=1, 2, 3$) のみの情報しか与えられない。

5.3. 反転流れ場でのトレーサー拡散

反転流れ場 $\mathbf{U}^* = (-u, 0)$ において観測点 $\mathbf{x}_{o,i}$ から仮想的なトレーサーを発生強度 q_i^* で放出する。この場合もブルームモデルによってトレーサーの濃度 $c_i^*(\mathbf{x})$ ($x < x_{o,i}$) の分布は次式より予測される。

$$c_i^*(\mathbf{x}) = \frac{q_i^*}{\sqrt{4\pi\gamma(-u)(x-x_{o,i})}} \exp\left[\frac{u(y-y_{o,i})^2}{4\gamma(x-x_{o,i})}\right] \quad (23)$$

これを用いて $s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,i}) = c_i^*(\mathbf{x})/q_i^*$ を求めると(24)式のようになり、その分布を図示すると Fig. 3 のようになる。

$$s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,i}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\gamma(-u)(x-x_{o,i})}} \exp\left[\frac{u(y-y_{o,i})^2}{4\gamma(x-x_{o,i})}\right] \quad (24)$$

ところで(24)式は、次式のようにも変形できる。

$$s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,i}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\gamma u(x_{o,i}-x)}} \exp\left[-\frac{u(y_{o,i}-y)^2}{4\gamma(x_{o,i}-x)}\right] \quad (25)$$

(25)式の右辺は、順流れ場において $\mathbf{x}$ から粒子を放出した場合の $\mathbf{x}_{o,i}$ における滞在時間の期待値 $s(\mathbf{x}_{o,i}|\mathbf{x})$ とみなせる。つまり、ブルームモデルの観点からも(15)式の関係の存在が示された。

5.4. 発生源の同定

(20)式の関係を満たす $\mathbf{x}_s$ を探査するため、観測点の組み合わせから $1/q_{s,i}(\mathbf{x}) - 1/q_{s,j}(\mathbf{x}) = s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,i})/c_{o,i} - s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,j})/c_{o,j}$ ($i, j=1, 2, 3; i \neq j$) の分布を求め Fig. 4 に示す。Fig. 4 の各図において正值と負値領域の境界の実線、つまり $1/q_{s,i}(\mathbf{x}) - 1/q_{s,j}(\mathbf{x}) = 0$ となる曲線の上の各点が、選択された2つの観測点からのトレーサー拡散解析に基づいた環境汚染物質発生源位置の候補となる。

そして、Fig. 5 において Fig. 4(1) と Fig. 4(2) を重ねて図示すれば、曲線 $1/q_{s,1}(\mathbf{x}) - 1/q_{s,2}(\mathbf{x}) = 0$ と $1/q_{s,2}(\mathbf{x}) - 1/q_{s,3}(\mathbf{x}) = 0$ の交点がひとつ定まる。この交点が同定された環境汚染物質の発生源であり、Fig. 2 の設定した発生源位置と一致している。発生強度は(18)式の関係から

(1) Tracer release from Obs1 and $s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,1})$

(2) Tracer release from Obs2 and $s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,2})$

(3) Tracer release from Obs3 and $s^*(\mathbf{x}|\mathbf{x}_{o,3})$

Fig. 3 Distributions of the expected staying time per unit volume of the tracer particles in the reversed flow field. Square shows positions of three observation sites.

求まることが明らかなのでここでは割愛する。以上より、対象とする環境汚染物質の発生源同定が完了する。

6. まとめと今後の課題

一般の乱流拡散場における点源から定常的に発生する環境汚染物質の拡散問題に関して、反転流れ場でのトレーサー粒子挙動を確率的な観点から考察し、その拡散性状に基づく発生源同定手法を提案した。ここで反転流れ場とは、環境汚染物質が拡散した流れ場（順流れ場）に対して、時間の進行方向と各点の速度ベクトルを反転した仮想的流れ場である。

乱流拡散場の統計的定常状態においては、物質のある位置の濃度は、物質の発生強度とその物質粒子が対象位置に滞在する時間の期待値と関係づけられる。その滞在時間の期待値はまた、順流れ場と反転流れ場とで粒子の放出源と観測点の関係を入れ替えれば互いに等しい値を示す。その結果、反転流れ場において、環境汚染物質の観測点から仮想的なトレーサーを放出しその拡散解析を実施すれば、

Fig. 4 Distributions of the difference between inverse estimated source strengths obtained from the tracer dispersion analysis release from two different observation sites.

Fig. 5 Overlapped distributions of the difference between inverse estimated source strengths obtained from the tracer dispersion analysis release from two different observation sites. Distributions in Fig. 4(1) and (2) are replotted in the same frame. Black line shows $1/q_{s,1}(x) - 1/q_{s,2}(x)$; Gray line shows $1/q_{s,2}(x) - 1/q_{s,3}(x)$; Circle is the intersection point of $1/q_{s,1}(x) - 1/q_{s,2}(x) = 0$ and $1/q_{s,2}(x) - 1/q_{s,3}(x) = 0$, which means the estimated source point.

そのトレーサの濃度分布と汚染物質の観測濃度を用いて、環境汚染物質の発生源位置をある位置に仮定した場合の発生強度の推定値が得られる。これは、随伴法におけるスカラー場の双対関係と等しく、随伴濃度とは、反転流れ場において観測点から放出されたトレーサ粒子が汚染物質発生源位置周囲の微小体積に滞在する時間の単位体積あたりの期待値であることが考察された。

複数の観測点が存在すれば、それぞれの観測点をトレーサ放出源とした解析を実施し、各発生源位置候補に対して観測点数に等しい数だけ発生強度の推定値が得られる。しかし、物理的に発生強度は唯一の値をとる必要があるため、この条件から発生源位置の候補が絞られる。同定すべきパラメータは n 次元空間において空間座標と発生強度の $n+1$ 個存在するため、最低限 $n+1$ 個の観測点があれば発生源位置をひとつの点に決定できる。

本手法は、厳密には無限小の大きさをもつひとつの点源からの汚染物質の放出において有効である。発生源が有限の大きさをもつ場合や発生源が複数点存在する場合には、発生源の重心のようなものが同定結果として得られてしまうと予想される。特に、複数の発生源の影響を受ける観測点の濃度からは個々の発生源の影響を分離できない。複数発生源の問題への拡張は今後の課題としたい。

本手法はまた、検査空間中の流れ場が完全に解析的あるいは数値的に再現可能であり、かつ濃度計測や拡散解析においても誤差が全く混入しない状況を前提とする。しかし、実問題においてはこのような理想的状況は発生しえず、逆問題としての発生源同定の性質から、これらの誤差に対して解が鋭敏に反応し不安定となる可能性がある。また、使用する観測点の組み合わせによって、異なる複数の発生源候補が生じてしまう可能性もある。しかし、多数の観測点があれば真の発生源の周辺に発生源候補点が集中することが期待できる。あるいは、複数の候補点においてもそれぞれの発生源としての信頼度は異なるものと考えられる。これらの観点から、より確からしい発生源候補点を探索し、誤差の混入に対してロバストな解を与える追加的手法を本論文に続く研究で検討する予定である。

以上のような課題が残されているが、本論文では本手法の基本原則を説明するとともに、2次元一様流れ場で物質やトレーサの濃度分布も解析的に与えられるような理想的状況における適用事例を示した。

謝辞

本研究の一部は、JSPS 科研費 26709041 (研究代表者：菊本英紀) の助成を受け行われた。また、本手法の理論的考察に関して、東京大学生産技術研究所の長谷川洋介准教授から貴重なご意見を頂いた。記してここに謝意を表する。

変数表記一覧

*	反転流れ場での変数であることを示す
c	濃度
c_a	随伴濃度
c_i^*	i 番目の観測点から放出したトレーサの濃度
$c_{o,i}$	i 番目の観測点で計測された環境汚染物質濃度
C	検査体積中の粒子の平均濃度
i, j	整数変数
n	空間の次元数
N	観測点数

Obs1/2/3	観測点名
$p(\cdot), p^*(\cdot)$	確率密度関数
P_V	粒子が検査空間内に存在する確率
q	粒子の発生強度
q_i^*	i 番目の観測点から放出したトレーサの発生強度
q_s	環境汚染物質の発生強度
$q_{s,i}$	i 番目の観測点からのトレーサ拡散に基づく推定発生強度
$s(\cdot), s^*(\cdot)$	単位体積あたりの粒子の滞在時間期待値
t, t', t_1, t_2, t_3	時刻あるいは時間差
T	粒子が検査空間内に留まる平均的時間
V	検査空間の体積
u, v	平均速度ベクトルの x, y 方向成分
x_s, y_s	環境汚染物質の発生源位置ベクトルの x, y 方向成分
$x_{o,i}, y_{o,i}$	i 番目の観測点の位置ベクトルの x, y 方向成分
γ	環境汚染物質の拡散係数
σ	ブルームモデルにおける濃度の拡散幅
$\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{\mathbf{u}}^*$	瞬時速度ベクトル
$\mathbf{u}, \mathbf{u}^*$	乱れ速度ベクトル
$\mathbf{U}, \mathbf{U}^*$	平均速度ベクトル
$\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$	位置ベクトル
$\mathbf{x}_o, \mathbf{x}_{o,i}$	(i 番目の) 観測点の位置ベクトル
$\mathbf{x}_s$	環境汚染物質の発生源位置ベクトル

参考文献

- 1) M. N. Ozisik, H. R. B. Orlande: Inverse heat transfer, Taylor and Francis, 2000
- 2) T. F. Zhang, Q. Chen: Identification of contaminant sources in enclosed environments by inverse CFD modeling, Indoor Air, vol. 17, no. 3, pp. 167–77, 2007.6
- 3) G. T. Csanady: Turbulent diffusion in the environment, Springer, 1973
- 4) M. A. Islam: Application of a Gaussian plume model to determine the location of an unknown emission source, Water. Air. Soil Pollut., vol. 112, no. 3/4, pp. 241–245, 1999
- 5) N. K. Ala, P. A. Domenico: Inverse analytical techniques applied to coincident contaminant distributions at Otis Air Force Base, Massachusetts, Ground Water, vol. 30, no. 2, pp. 212–218, 1992.3
- 6) S. Alapati, Z. J. Kabala: Recovering the release history of a groundwater contaminant using a non-linear least-squares method, Hydrol. Process., vol. 14, no. 6, pp. 1003–1016, 2000.4
- 7) S. M. Gorelick, B. Evans, I. Remson: Identifying sources of groundwater pollution: An optimization approach, Water Resour. Res., vol. 19, no. 3, pp. 779–790, 1983.6
- 8) 石田義洋, 加藤信介, 樋山恭助: 定常流れ場における非定常濃度応答計算法: 第 3 報-センシング情報を用いた応答係数法に基づく環境影響物質の発生源同定法, 空気調和・衛生工学会論文集, no. 158, pp. 1–14, 2010.5
- 9) 半場藤弘, 安部諭, 北澤大輔, 加藤信介: 点源放出の 1 次元拡散方程式の逆問題, 生産研究, vol. 63, no. 1, pp. 69–73, 2011
- 10) 安部諭, 加藤信介: リバースシミュレーションにおける数値安定性確保についての研究, 日本建築学会環境系論文集, vol. 75, no. 656, pp. 891–897, 2010.10
- 11) 小林光, 加藤信介, 村上周三: 不完全混合室内における換気効率・温熱環境形成効率評価指標に関する研究: 第 1 報-CFD に基づく局所領域の換気効率評価指標の開発, 空気調和・衛生工学会論文集, no. 68, pp. 29–36, 1998
- 12) G. W. Clark, S. F. Oppenheimer: Quasireversibility methods for non-well-posed problems, Electron. J. Differ. Equations, vol. 1994, no. 8, pp. 1–9, 1994
- 13) M. Bady, 加藤信介, 黄弘: Identification of pollution sources locations in outdoor environments using reverse simulation (part 1) Basics of reversed time marching method, 生産研究, vol. 61, no. 1, pp. 45–54, 2009
- 14) 安部諭, 加藤信介: 拡散源特定を目指したリバースシミュレーション実現のためのフラックスへのフィルター操作による数値安定性確保についての研究, 日本建築学会環境系論文集, vol. 76, no. 662, pp. 431–438, 2011.4
- 15) S. Abe, S. Kato, F. Hamba, D. Kitazawa: Study on the dependence of reverse simulation for identifying a pollutant source on grid resolution and filter width in cavity flow, J. Appl. Math., vol. 2012, pp. 1–16, 2012
- 16) A. Keats, E. Yee, F.-S. Lien: Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment, Atmos. Environ., vol. 41, no. 3, pp. 465–479, 2007.1
- 17) R. M. Neupauer, J. L. Wilson: Adjoint method for obtaining backward-in-time location and travel time probabilities of a conservative groundwater contaminant, Water Resour. Res., vol. 35, no. 11, pp. 3389–3398, 1999.11
- 18) J. A. Pudykiewicz: Application of adjoint tracer transport equations for evaluating source parameters, Atmos. Environ., vol. 32, no. 17, pp. 3039–3050, 1998.9
- 19) F. Hourdin, O. Talagrand: Eulerian backtracking of atmospheric tracers. I: Adjoint derivation and parametrization of subgrid-scale transport, Q. J. R. Meteorol. Soc., vol. 132, no. 615, pp. 567–583, 2006.1
- 20) T. Kaminski, M. Heimann, R. Giering: A coarse grid three-dimensional global inverse model of the atmospheric transport: 1. Adjoint model and Jacobian matrix, J. Geophys. Res., vol. 104, no. D15, p. 18535, 1999.8
- 21) S. Houweling, T. Kaminski, F. Dentener, J. Lelieveld, M. Heimann: Inverse modeling of methane sources and sinks using the adjoint of a global transport model, J. Geophys. Res., vol. 104, no. D21, p. 26137, 1999.11

SOURCE IDENTIFICATION OF ENVIRONMENTAL POLLUTANTS BASED ON TRACER DISPERSION IN REVERSED FLOW FIELD

Hideki KIKUMOTO *, *Ryozo OOKA* ** and *Shinsuke KATO* ***

* Research Assoc., Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Ph.D.(Eng.)

** Prof., Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Ph.D.(Eng.)

*** Prof., Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, Dr.Eng.

When the concentration of an aerial pollutant is detected at some observation points in an urban or built environment, immediate source identification allows for application of effective measures to decrease the concentration of the pollutant and its adverse effects. In this case, source identification involves determination of the source position and source strength from measured concentrations.

We propose a novel method for identifying the source of an environmental pollutant continuously released from a point source in a turbulent flow field at a statistically steady state. The method employs the analysis of tracer dispersion released from observation points of the pollutant in a reversed flow field (RFF). The RFF is artificially produced from the forward flow field (FFF) in which the pollutant is transported. The direction of temporal progress and velocity vectors in the RFF are created opposite to those in the FFF.

In a statistically steady turbulent flow and concentration field, the concentration of matter at a position can be expressed as a product of its source strength and expected staying time (EST) per unit volume at the position of a particle of the matter. From the discussion on the probabilistic behavior of a virtual particle in the flow fields, we found that the EST between two related points has an identical value when the release and monitoring points are interchanged in the FFF and RFF. Using the relationship of the EST and the tracer dispersion from the observation points in the RFF, the measured concentration of the pollutant and the EST give the estimated source strength as a function of the position. This property coincides with the duality of the scalar fields analytically derived in the adjoint method.

When they have multiple observation points, each tracer dispersion analysis gives different distributions of the estimated source strength. However, the source strength has to have a unique point value for physical realizability. This condition reduces candidate positions of the pollutant source. When the dispersion of the pollutant occurs in the n -th dimensional space, the number of parameters is $n + 1$, which contains n space coordinates of the source position and the source strength. Consequently, $n + 1$ observation points allow the determination of all parameters in the source identification.

This paper presents the basic idea of the source identification method based on physical consideration of the particle behavior in the RFF. An example of the source identification procedure is also presented for pollutant dispersion in a two-dimensional uniform flow field. However, the solution of source identification obtained with the present method can be very sensitive to the errors that are assumed to occur in the measurement or analysis of flow and concentration fields. For practical applications, an additional method to provide robust solutions against these errors are needed and will be considered in future studies.

(2016 年 2 月 10 日原稿受理, 2016 年 4 月 7 日採用決定)