

# 12 物質輸送方程式とフィルタリング手法によるモニタリングネットワークシステムの計画

九州大学工学部

神野 健二  
河村 明

## 1. はじめに

地下水汚染物質の輸送を予測するためには化学反応過程を考慮した移流分散方程式の適用が考えられるが、汚染物質と土壌との化学反応を規定する土壌の化学特性、汚染物質の移流効果を規定する地下水の流れ、あるいは分散効果を規定する透水係数の空間分布などのように、現実にはかなりの不確定要素が解析精度を左右する。このような確率場における輸送問題の解析の1つとして、まず巨視的な分散係数と透水係数の空間分布の特性値との関連が数多く研究されている。しかしこれらは透水係数の空間分布の特性量が十分に分かっていることを前提として、かなりの調査費用が必要で実際問題への応用は現在のところ容易ではない。一方、化学反応過程のパラメータの同定を行うには、現地を土壌を用いたカラム試験による化学的特性の把握が必要である。ところで、地下水汚染の対応に必要な点は、①地下水汚染の空間的拡がり・時間的変化を早期に把握すること、②汚染源を特定すること、③地下水を水源としている需要者に対して利用の停止を告知すること、④代替水源の確保、⑤汚染した地下水および土壌の除去の可否、⑥さらには原因者への賠償請求の可能性調査などであろう。したがって現実的対応をよりの確に行うためには、例えば現地に応じた数値シミュレーション等を通して現象の理解を深めておくと共に、地下水汚染に関するモニタリングの方法、地下水汚染が発生した場合の解決策などの具体的方法を日頃から検討しておくことも大切である。以上のような観点から、本報告では特に汚染物質の輸送過程を記述する移流分散方程式を通して、モニタリング井戸の空間配置、サンプリング頻度、観測値のフィードバックの手法について検討している。

## 2. 地下水汚染のモニタリングの方法

### (2.1) モニタリングについての基本要件

ここでは上で述べたような観点から、複雑な水文地質構造を入力とする汚染物質の輸送—化学反応現象の確率過程を詳細に検討する方法とは異なった方法で、地下水汚染のモニタリングについて考える。森澤氏<sup>1)</sup>あるいは参考文献2)-6)ではモニタリングを行う際に備えておくべき要件が述べられている。それらは、(1)観測値が背景地下水の物質濃度に対して異常か否かの識別が可能なこと、(2)地下水汚染を想定した時のシミュレーションと実際の観測結果との比較検討が行えること(できればオンラインで)、(3)モニタリングを行って得られる観測値をフィードバックして濃度分布の将来予測に活用できること、に要約されよう。このような機能を持ったモニタリングを行うためには、①モニタリング項目、②モニタリング位置、③モニタリング頻度を合理的かつ経済的に定め、モニターされたデータを客観的に評価して必要な対策を講じる手順を検討しておくことが必要であろう。ここでは以上のような要件を満たす1つの手法として、1および2次元の定係数確率移流分散方程式を用いたモニタリングの数学的手法を検討する。

### (2.2) フィルタリング手法の概要

フィルタリングの手法は今日、時系列解析やシステム同定、さらには不規則過程下でのシステム自動制御に多く用いられている。フィルター理論に関するテキストは既にかかなり市販されているが、ここでは移流分散方程式に含まれているパラメータの同定を行いながら濃度分布の予測を行うことを前提としているので、例えばM. Athans, R.O. Wisher and A. Beroliniの論文<sup>7)</sup>のような非線形フィルターを用いる。本報告では以下のような方法をとっている：①推定すべき状態量として定係数移流分散—1次反応方程式に含まれるパラメータ(流速、分散係数、1次反応係数)および濃度分布を同定する、②観測地点は任意に配置されている、③濃度はある時間毎に観測される、④基礎方程式の不確定な外乱やモデル誤差は独立で正規分布に従い、それらの統計量は既知である、⑤観測値に混入する観測雑音も独立で正規分布に従い、統計的

性質も分かっている、⑥パラメータのうち、既にその大きさが判明しているものについてはこれを利用する、⑦以上のような状況で一定時間毎に得られる観測値を基に、数ステップ先の濃度分布を予測し、実際に観測された値と比較して予測誤差があれば予測誤差にゲインを掛けて、現象を記述するモデルの状態量をフィードバックする。

### 3. フーリエ級数展開による 1次元移流分散-1次反応方程式への フィルタリング手法の適用<sup>8,9)</sup>

用いる基礎式は、流れ方向の分散係数 $D_{XX}$ を一定（時間とともに変わることは可）とし、さらに右辺に1次反応項とシステム雑音項を加えた

$$\frac{\partial c(X,t)}{\partial t} + V_X \frac{\partial c(X,t)}{\partial X} = D_{XX} \frac{\partial^2 c(X,t)}{\partial X^2} - \lambda c(X,t) + \varepsilon(X,t) \quad (1)$$

を考える。ところで、移流分散方程式あるいは地下水流動の解析において初期条件、境界条件および境界位置の設定は1つの不確定要因である。すなわち初期状態を表す分布関数を与えても、いつ何処で汚染が発生したのかは実際には把握できないことが多いし、また少ない観測井戸での測定値を内挿することも精度低下の原因となる。また、境界位置の設定を行うにしても、試行錯誤的に場所を変更するとプログラム作成上あるいは計算経費上不都合である。そこでフィルターの適用にも便利のように濃度 $c(X,t)$ およびシステム雑音項 $\varepsilon(X,t)$ を次式のように変数 $X$ に関してフーリエ級数に展開し、任意の波数のフーリエ係数について解析を行う：

$$c(X,t) = B_0(t) + \sum_{m=1}^M [A_m(t) \sin(2\pi mX/\ell) + B_m(t) \cos(2\pi mX/\ell)] \quad (2)$$

$$\varepsilon(X,t) = \sum_{m=1}^M [E_m(t) \sin(2\pi mx/\ell) + F_m(t) \cos(2\pi mx/\ell)] \quad (3)$$

ここに、

$B_0(t)$ : 濃度 $c(X,t)$ の空間平均値、 $A_m(t), B_m(t)$ : 濃度 $c(X,t)$ の波数 $m$ に関するフーリエ係数  
 $M$ : 取り込むフーリエ級数の項数  $E_m(t), F_m(t)$ :  $\varepsilon(X,t)$ の波数 $m$ に関するフーリエ係数  
 $\ell$ : 基本波長

従って、式(2)、(3)を式(1)に代入すれば、 $B_0(t)$ および波数 $m$ のフーリエ係数に関する連立常微分方程式が次式のように得られる：

$$\begin{bmatrix} dB_0/dt \\ dA_m/dt \\ dB_m/dt \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -R_m & Q_m \\ 0 & -Q_m & -R_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_0(t) \\ A_m(t) \\ B_m(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ E_m(t) \\ F_m(t) \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$R_m = D_{XX} (2\pi m/\ell)^2 + \lambda, \quad Q_m = V_X (2\pi m/\ell)$$

つぎに、フィルタリング手法への適用を考える。上式より、式(1)の物理量 $V_X, D_{XX}, \lambda$ および式(2)のフーリエ係数 $B_0, A_m, B_m (m=1, \dots, M)$ をフィルター理論におけるシステム状態量 $X(t)$ として推定すべき量とする：

$$X(t) = [V_X, D_{XX}, \lambda, B_0(t), A_1(t), B_1(t), \dots, A_M(t), B_M(t)]^T \quad (5)$$

ここで、式(1)の $V_X, D_{XX}, \lambda$ の値は時・空間的に一定の場合を考えているので、これらに対する遷移方程式は次式となる：

$$dV_X/dt=0, \quad dD_{XX}/dt=0, \quad d\lambda/dt=0 \quad (6)$$

よって $X(t)$ のシステム方程式は式(4)と式(6)を一つにして次式となる：

$$dX/dt = f(X(t)) + v(t) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -B_0(t)\lambda \\ -R_1A_1(t) + Q_1B_1(t) \\ -Q_1A_1(t) - R_1B_1(t) \\ \dots\dots\dots \\ -R_M A_M(t) + Q_M B_M(t) \\ -Q_M A_M(t) - R_M B_M(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ E_1(t) \\ F_1(t) \\ \dots \\ E_M(t) \\ F_M(t) \end{bmatrix} \quad (7)$$

次にフィルタリング手法での観測方程式は、X方向に任意に配置された観測点 $X_i$  ( $i=1\sim N$ )から観測雑音 $w(t)$ を含んだ濃度 $c(X, t)$ が、あるサンプリング時間間隔で観測される場合を想定する。このとき観測点Xにおける濃度 $c(X, t)$ は式(2)より次式で表される：

$$c(X, t) = [0, 0, 0, 1, \sin(2\pi X/\ell), \cos(2\pi X/\ell), \dots, \sin(2\pi MX/\ell), \cos(2\pi MX/\ell)] \times [V_X, D_{XX}, \lambda, B_0(t), A_1(t), B_1(t), \dots, A_M(t), B_M(t)]^T + w(X, t) \quad (8)$$

式(8)の右辺第1項のベクトルをすべての観測地点についてまとめてマトリックス表示すると、フィルタ理論の観測行列はこの例の場合、次式のようになる：

$$H(t) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & \sin(2\pi MX_1/\ell) & \cos(2\pi MX_1/\ell) \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & \sin(2\pi MX_N/\ell) & \cos(2\pi MX_N/\ell) \end{bmatrix} \quad (9)$$

また物理量 $V_X, D_{XX}, \lambda$ が観測される場合には、その行を式(9)追加すればよい。例えば、 $V_X$ が観測されるときは  
 $V_X(t) = [1, 0, 0, 0, \dots, 0] \cdot X(t)$   
と表されるから、この行を式(9)の第1行に追加する。

**適用例(1)**

ここでは模擬発生データを次のようにつくる：システム雑音として式(4)の $E_M(t), F_M(t)$ に平均0、標準偏差 $0.005g/m^3$ の正規乱数を与え、 $V_X=1.0(m/day), D_X=0.5(m^2/day), \lambda=0.01(1/day)$ とし、濃度の初期分布は図-1のように実線で与え、式(4)をルンゲ・クッター・ギル法により数値解を求めたものを式(1)に従う模擬発生濃度分布とし、これらの値を以後真値として取り扱う。なお、実際に各地点で観測される濃度は上述の真値に平均0、標準偏差 $0.01g/m^3$ の観測雑音を加わったものとする。また物理パラメータが観測される場合には観測値は真のパラメータの10%の2乗の分散をもつ雑音を加わるとしている。観測点は図中に矢印で示したようにランダムに20地点とした。まず最初は $V_X, D_{XX}, \lambda$ の観測はないとし、観測時間間隔は10ステップ(1day)おきに、またフーリエ級数の項数を $M=20$ とした場合の予測を図-1に100ステップおきに示している。次に、図-2にパラメータが観測される場合の、また図-3には観測時間間隔が異なる場合の濃度予測精度 $J$ を示している。この場合、 $J$ としては次式による予測残差の分散を用いている：

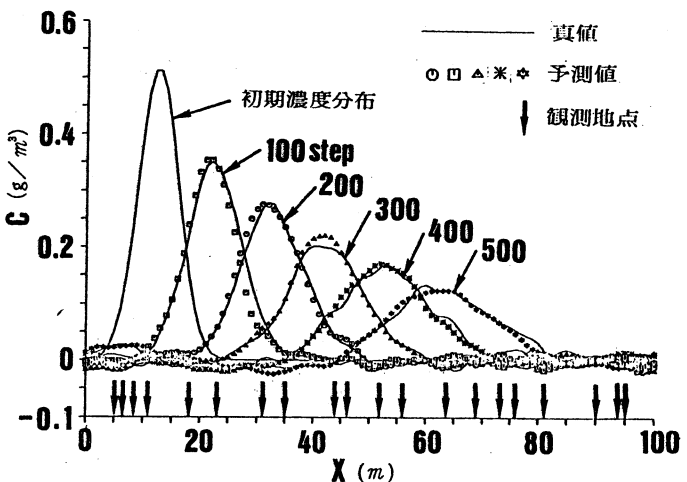


図-1 模擬発生濃度(真値)とその予測値

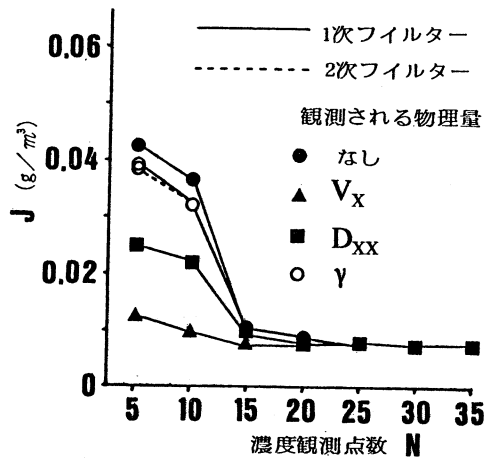


図-2 パラメータの観測の有無と予測精度

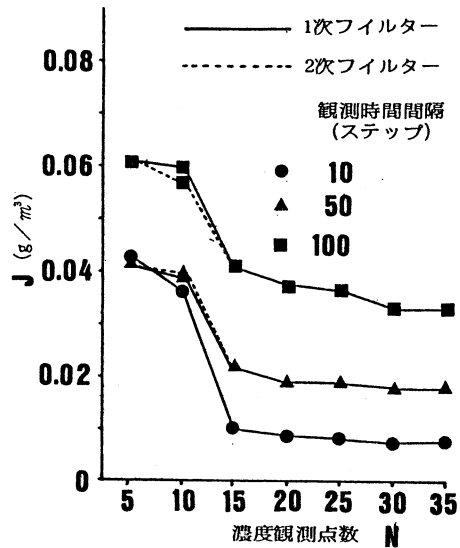


図-3 観測時間間隔が異なる時の予測精度

$$J_t = \left\{ \sum_X [\hat{c}(X, t | t-i) - c(X, t)]^2 \right\}^{1/2} / N_1 \quad (10)$$

$$J = \sum_t J_t / N_2 \quad (11)$$

ここに、 $c(X, t)$ ：濃度の真値、 $\hat{c}(X, t | t-i)$ ： $(t-i)$ 時点までの観測量が得られた場合の濃度 $c(X, t)$ の予測値、 $N_1$ ：予測精度評価地点数で、この場合0mから100mまで1mおきに101地点、 $N_2$ ：予測精度評価時点数で、この場合100時点から500時点までの100時点おきの5時点をとった。

#### 4. フーリエ級数展開による2次元移流分散-1次反応方程式へのフィルタリング手法の適用

基礎式として分散係数 $D_{XX}$ 、 $D_{YY}$ を場所的に一定とし、1反応項さらに前節と同様にシステム雑音項 $\varepsilon(X, Y, t)$ を加えたものを考える。但し簡単のため、流れの方向にX軸をとっている：

$$\frac{\partial c(X, Y, t)}{\partial t} + V_X \frac{\partial c(X, Y, t)}{\partial X} = D_{XX} \frac{\partial^2 c(X, Y, t)}{\partial X^2} + D_{YY} \frac{\partial^2 c(X, Y, t)}{\partial Y^2} - \lambda c + \varepsilon \quad (12)$$

濃度 $c(X, Y, t)$ および $\varepsilon(X, Y, t)$ を次のような2次元フーリエ級数に展開する：

$$c(X, Y, t) = A_{00}(t) + \sum_{m=1}^M \sum_{n=0}^N [A_{mn}(t) \cos F_1(X, Y, m, n) + B_{mn}(t) \sin F_1(X, Y, m, n) + C_{mn}(t) \cos F_2(X, Y, m, n) + D_{mn}(t) \sin F_2(X, Y, m, n)] \quad (13)$$

$$\varepsilon(X, Y, t) = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N [E_{mn}(t) \cos F_1(X, Y, m, n) + F_{mn}(t) \sin F_1(X, Y, m, n) + G_{mn}(t) \cos F_2(X, Y, m, n) + H_{mn}(t) \sin F_2(X, Y, m, n)] \quad (14)$$

$$F_1(X, Y, m, n) = 2\pi mX/\ell_X + 2\pi nY/\ell_Y, \quad F_2(X, Y, m, n) = 2\pi mX/\ell_X - 2\pi nY/\ell_Y \quad (15)$$

ここに、 $A_{mn}, B_{mn}, C_{mn}, D_{mn}, E_{mn}, F_{mn}, G_{mn}, H_{mn}$ ： $c$ および $\varepsilon$ の波数 $m, n$ に関するフーリエ係数、 $\ell_X, \ell_Y$ ：X, Y軸方向の基本波長、 $M, N$ ：組み込むフーリエ級数の項数

式(13)、式(14)を式(12)に代入して、波数 $m, n$ のフーリエ係数に関する連立常微分方程式に変形すると次式を得る：

$$\begin{bmatrix} dA_{mn}(t)/dt \\ dB_{mn}(t)/dt \\ dC_{mn}(t)/dt \\ dD_{mn}(t)/dt \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -P_{mn} & -Q_m & 0 & 0 \\ Q_m & -P_{mn} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -P_{mn} & -Q_m \\ 0 & 0 & Q_m & -P_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{mn}(t) \\ B_{mn}(t) \\ C_{mn}(t) \\ D_{mn}(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} E_{mn}(t) \\ F_{mn}(t) \\ G_{mn}(t) \\ H_{mn}(t) \end{bmatrix} \quad (16)$$

ここに、

$$P_{mn} = D_{xx} \left( \frac{2\pi m}{\ell_x} \right)^2 + D_{yy} \left( \frac{2\pi n}{\ell_y} \right)^2 + \lambda, \quad Q_m = V_x \left( 2\pi m / \ell_x \right) \quad (17)$$

同定すべき状態量は  $V_x, D_{xx}, D_{yy}, \lambda, A_{00}(t)$ 、フーリエ係数  $A(t)_{mn}, B(t)_{mn}, C(t)_{mn}, D_{mn}(t)$  である。したがってシステム状態量  $X(t)$  の次元数は  $(5+4MN+2M+2N)$  となる。観測量として、2次元空間に配置された観測点  $(X, Y)_j, (j=1 \sim M_p)$  から観測雑音  $w(t)$  を含んだ汚染物質濃度  $c(X, Y, t)$  が、あるサンプリング時間間隔で定時的に観測されるとすると、

$$c(X, Y, t) = [0, 0, 0, 0, 1, \dots, \cos F_1(X, Y, M, N), \sin F_1(X, Y, M, N), \cos F_2(X, Y, M, N), \sin F_2(X, Y, M, N)] \times [V_x, D_{xx}, D_{yy}, \lambda, A_{00}(t), \dots, A_{MN}(t), B_{MN}(t), C_{MN}(t), D_{MN}(t)]^T + w(X, Y, t) \quad (18)$$

以後は、式(16)を線形化してフィルタ理論を適用すれば、各時点毎に  $X(t)$  の最適推定値が求められ、これを用いて汚染物質濃度  $c(X, Y, t)$  の予測が行われる。

### 適用例(2)

汚染物質の模擬発生は以下のようにした。まず次の矩形分布を考える：

$$c(X, Y, -10) = \begin{cases} c_0 & (X_1 \leq X \leq X_2, Y_1 \leq Y \leq Y_2) \\ 0 & \left\{ \begin{array}{l} (0 \leq X < X_1, X_2 < X \leq \ell_x, \\ 0 \leq Y < Y_1, Y_2 < Y \leq \ell_y) \end{array} \right. \end{cases} \quad (20)$$

ここで、 $c_0 = 500(\text{g}/\text{m}^3)$ 、 $X_1 = 9.5(\text{m})$ 、 $X_2 = 10.5(\text{m})$ 、 $Y_1 = 24.5(\text{m})$ 、 $Y_2 = 25.5(\text{m})$  とし、また式(1)の  $V_x = 1.0(\text{m}/\text{day})$ 、 $D_{xx} = 3.0(\text{m}^2/\text{day})$ 、 $D_{yy} = 1.0(\text{m}^2/\text{day})$ 、 $\lambda = 0(/\text{day})$ 、離散時間間隔  $\Delta t = 0.1(\text{day})$ 、 $\ell_x = 150(\text{m})$ 、 $\ell_y = 100(\text{m})$ 、フーリエ級数の項数  $M = N = 10$  を与え、システム雑音項  $\epsilon(X, Y, t)$  を除いて、フーリエ係数の数値積分により求めた100ステップ(10日)後の濃度分布を改めて模擬発生濃度の初期分布とした。この初期分布をもとにシステム雑音を表す式(15)の係数  $E_{mn}(t)$ 、 $F_{mn}(t)$ 、 $G_{mn}(t)$ 、 $H_{mn}(t)$  に平均値0、標準偏差  $\sigma_v = 5 \times 10^{-4} \text{g}/(\text{m}^3 \cdot \text{day})$  を与えて濃度を数百時点ほど模擬発

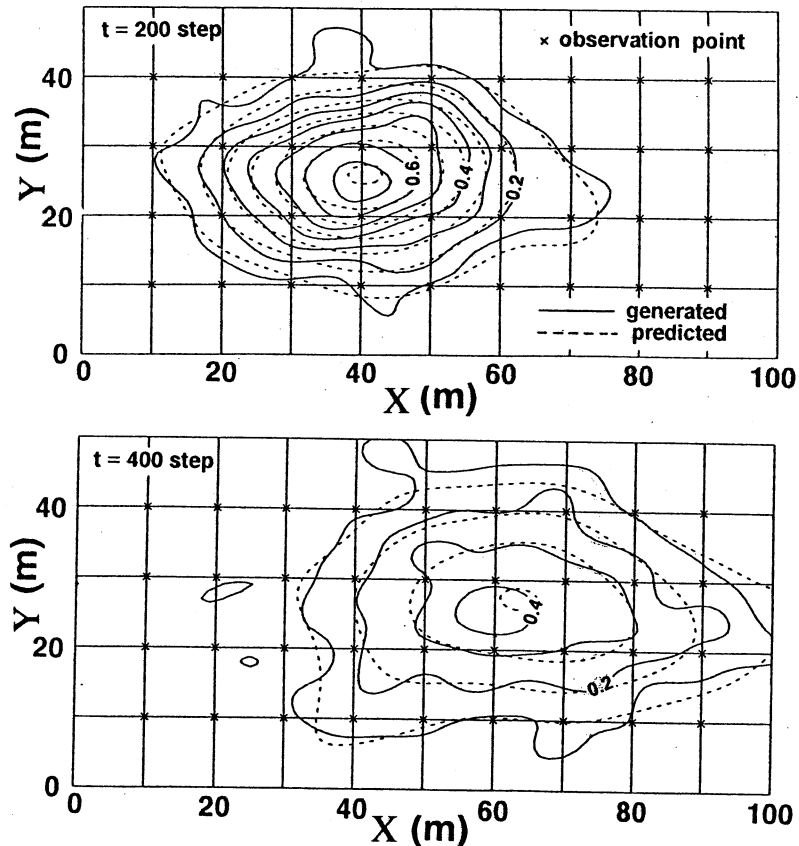


図-4 2次元移流分散-1次反応過程への適用例 ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

生させたものを真値とする。この模擬発生濃度分布の200ステップ（20日）後と400ステップ（40日）後の形状を図-4の実線に示している。なお、実際に各観測点で観測される濃度は上述の真値に更に観測雑音を加わったものであるとするのが一般的であるが、この例では観測雑音は考えていない。以上の模擬発生濃度分布に対して、上で述べた手法により濃度分布の予測を行う。この場合、状態量 $X(t)$ の初期値には真値の50%の値を与え、観測点は図-4の様に36地点、サンプリング時間間隔は10ステップ（1日）おき、組み込むべきフーリエ級数の項数を $M=N=10$ とした。本手法による10ステップ先の予測値の分布を図-4の破線で示している。適用結果を見ると、実線で示す真値はシステム雑音 $\varepsilon(X, Y, t)$ の影響を受けて、時点の進行とともに分布の乱れが大きくなっているが、破線で示す本手法による10ステップ先の予測値を見ると、高周波成分の小さな変動成分の予測は困難なものの、時点の進行とともに濃度分布が乱れても濃度分布の形状の予測は良好である。

## 5. むすび

本報告では、地下水汚染のモニタリングの目的は「まず、最終的に何が欲しいのかを明らかにすることであり、ついでこの最終目的を達成するために、得られる情報を有効にフィードバックすること」であるという観点から、地下水汚染のモニタリングに対するアプローチを述べた。現実の現象はより複雑であるから、本報で示した手法をより精度の高いものにするには、例えば①流れの確率場の発生、②汚染物質の輸送—化学反応過程のシミュレーション、③観測項目、観測位置、サンプリング時間間隔の設定、④シミュレーション結果を真値として、計画の観測体制で予測した場合の精度評価、⑤精度が不十分な場合には再度観測体制の検討を行うことが必要である。このとき地質学や地球化学の専門家とともに、得られた結果に対する解釈を行う上で有効な討議を行うことが出来れば計算上得られる情報がより現象に裏付けされ、信頼性の高いフィードバックが可能となろう。

## 謝辞:

本研究は平成2年度石原藤次郎研究奨学基金の助成（研究者：河村明、研究課題：「地下水モニタリングシステムを用いた地下水汚染源の同定および汚染物質濃度の実時間予測に関する研究」）を受けたもので、ここに記して深く感謝致します。

## 参考文献

- 1) 森澤真輔:放射性廃棄物地中処分場の立地選定に関する工学的研究（京都大学学位論文）、第5章、pp.202-239、1977
- 2) 藤原正弘、小柳秀明、佐々木一郎:水質モニタリングの現状と課題、水質汚濁研究、vol.10、No.5、pp.276-281、1987
- 3) 松本幸雄:水質環境モニタリングデータの処理、蓄積と利用の現状、水質汚濁研究、vol.10、No.5、pp.282-286、1987
- 4) 宗宮功、津野洋:水質モニタリングのあり方—水域環境資源の保全と創造のために—、水質汚濁研究、vol.10、No.5、pp.287-290、1987
- 5) 古田正次:水質モニタリングの実際—愛知県における連続測定による環境水質モニタリングについて、水質汚濁研究、vol.10、No.5、pp.291-294、1987
- 6) 小林悦夫:水質モニタリングの実際—地下水環境モニタリングの実際、水質汚濁研究、vol.10、No.5、pp.297-300、1987
- 7) M. Athans, R.O. Wishner and A. Berolini: Suboptimal state estimation for continuous-time nonlinear systems from discrete noisy measurements, IEEE Transactions on Automatic Control, VOL. AG-13, NO.5, pp.504-514、1968
- 8) 吉永宙司、河村明、神野健二、上田年比古:2次フィルターによる定係数一次元確率移流分散方程式の濃度予測について、第33回水理講演会論文集、1983
- 9) K. Jinno, A. Kawamura, T. Ueda and H. Yoshinaga: Prediction of the concentration distribution of groundwater pollutants, IAHS Publication, No.188, pp.131-142, 1989