

基于贝叶斯推断的时变流场下污染源反演

朱建杰, 周暄毅, 顾明

(同济大学 土木工程防灾国家重点实验室, 上海 200092)

摘要: 对 5 个不同位置的污染源分别做污染物扩散数值模拟, 将其计算结果作为测量浓度; 利用伴随方程计算时变流场下传感器的模拟浓度。通过测量浓度和模拟浓度构造似然函数, 基于贝叶斯推断计算了时变流场下污染源参数的后验概率。结果表明: 污染源参数反演的误差取决于测量浓度与模拟浓度之间的误差。当污染源与传感器的距离较远时, 污染源参数的后验概率呈较宽的分布, 反演结果具有较大的不确定性; 当污染源与传感器距离较近时, 反演结果的不确定性得到了显著的降低。此外, 还讨论了反演污染源参数时, 利用污染物扩散不同阶段的测量数据对反演效果的影响。发现利用扩散初始阶段的测量浓度反演源位置, 可以得到比利用稳定阶段数据时更小的反演误差和后验概率标准差, 但效果没有得到显著提升。

关键词: 污染物扩散; 污染源反演; 伴随方程; 贝叶斯推断

中图分类号: X506

文献标志码: A

Source Inversion in Time-Variant Flow Field Based on Bayesian Inference

ZHU Jianjie, ZHOU Xuanyi, GU Ming

(State Key Laboratory of Disaster Reduction in Civil Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: In this paper, a numerical simulation of pollutant diffusion was conducted at five different locations and the results were taken as the measurement. The adjoint equation was used to calculate the simulated concentration of the sensors in time-variant flow field. The likelihood function was constructed by measurement and simulated concentration and the posterior probability of source parameters in time-varying flow field was calculated based on Bayesian inference. The results show that the errors of inversion of source parameters depend on the error between the measurement and the simulated concentration. When the distance between the source and the sensors is greater, the posterior probability of source

parameters shows a wider distribution, indicating the larger uncertainty of the inversion result. When the source is closer to the sensors, the uncertainty of the inversion result is significantly reduced. In addition, the influence of measured data at different stages of pollutant diffusion in the process of inversion was also discussed. The inversion errors and the standard deviation of posterior probability are found to be smaller by using the measurement in the initial stage of diffusion than by using the data in the stable stage, but the improvement is not obvious.

Key words: pollutant dispersion; pollution source inversion; adjoint equation; Bayesian inference

当公共场所发生毒气袭击或者化工厂发生危化品泄漏时, 需要快速对泄漏源进行定位和强度评估, 从而给疏散民众和制定应急措施提供指导。由于事故发生时, 流场和浓度场往往具有随时间变化的特性, 因此在时变流场下进行污染源参数反演具有重要的应用价值。

污染源参数反演的主要方法有直接求解法^[1-2]、优化方法^[3-4]和概率方法^[5-6]。直接求解法通过构造控制方程的反问题, 直接求解源参数。Zhang 等^[1]利用 Tikhonov 正则化法^[7]反演了污染源强度, 得到了污染物释放速率的变化曲线。Wei 等^[2]将 Tikhonov 正则化法和贝叶斯方法相结合, 得到了多个污染源的污染物释放速率和污染源位置的概率分布。优化方法通过构造目标函数, 求解使目标函数最小的源参数。江思珉等^[3]利用模拟退火算法反演了地下水污染源的源强度。曾令杰和高军^[4]通过遗传算法对空调系统引发的污染进行了快速溯源。贝叶斯概率方法考虑了测量浓度和模拟浓度之间的误差, 将误差量化为似然概率, 通过贝叶斯公式计算相应源参

收稿日期: 2021-10-15

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(52078380)

第一作者: 朱建杰(1994—), 男, 博士生, 主要研究方向为污染源参数反演。E-mail: 602123354@qq.com

通信作者: 周暄毅(1975—), 男, 教授, 工学博士, 主要研究方向为风环境、污染物扩散及结构雪荷载。

E-mail: zhouxtyt@tongji.edu.cn



论文
拓展
介绍

数的概率分布。Keats等^[5]利用伴随方程求解传感器的伴随浓度场,使模拟浓度的计算量大大降低,得到了非时变浓度场下污染源位置和强度的概率分布。Guo等^[6]考虑了污染物浓度场从零浓度状态到稳定状态的变化过程,利用MCMC(Markov chain Monte Carlo)抽样算法直接对符合后验概率的样本参数进行抽样,获得了污染源的位置和强度信息,然而该研究的污染源所在的流场仍然是不随时间变化的。

本文在Keats^[5]、Guo^[6]的研究基础上,将基于贝叶斯推断的污染源参数反演方法扩展至时变流场的场景。考虑了流场变化对浓度场的影响,求解伴随方程得到了不同污染源参数下传感器位置处的模拟浓度,再通过贝叶斯公式计算相应污染源参数的后验概率。比较了不同位置污染源的参数反演效果,还讨论了利用污染物扩散不同阶段的测量浓度数据时,不同测量数据对反演效果的影响。

1 贝叶斯推断

1.1 贝叶斯公式

贝叶斯公式可表示为

$$P(m|d) = \frac{P(m)P(d|m)}{P(d)} \quad (1)$$

式中: $P(m|d)$ 为后验概率,是已知测量浓度为 d 条件下,污染源参数的概率分布; $P(m)$ 为先验概率,是未知测量信息情况下的污染源参数概率分布; $P(d|m)$ 为似然概率,表示在污染源参数为 m 的条件下,模拟浓度 c 与测量浓度 d 之间的相似程度。测量浓度 d 为传感器测量得到的浓度,模拟浓度 c 通过污染物扩散数值模拟获得。

对于本文的污染源参数反演问题,污染源参数为 $m = \{x_s, y_s, z_s, q_s\}$,其中 x_s, y_s, z_s 为污染源的空间坐标, q_s 为污染物的释放速率;测量浓度 $d = \{d_{1,1}, d_{1,2}, \dots, d_{i,j}, \dots, d_{N,M}\}$,其中 $d_{i,j}$ 表示第 i 个传感器第 j 个测量浓度值, M 为每个传感器记录数据的总数, N 为传感器的数量。

1.2 先验概率

先验概率是在未得到任何测量信息情况下污染源参数的概率。这里认为先验概率服从均匀分布,即:

$$P(m) = C \quad (2)$$

式中: C 为常数。

1.3 似然概率

似然概率表示污染源参数为 m 的情况下,模拟浓度 c 与测量浓度 d 之间的相似程度,通常用它们之间误差的概率来表达。许多学者^[5-6,8-13]认为模拟浓度 c 与测量浓度 d 之间的误差符合高斯分布,也有一部分学者^[14-16]考虑到不同传感器之间的浓度值存在量级差,认为利用对数高斯分布描述误差可以降低量级差对反演准确性的影响。考虑到高斯分布在污染源反演研究领域应用更加广泛,并且具有良好的反演效果,故本文采用高斯分布描述模拟浓度与测量浓度之间的误差,似然概率为

$$P(d_{i,j}|m) \propto \exp \left\{ -\frac{[d_{i,j} - c_{i,j}(m)]^2}{2(\sigma_{i,j})^2} \right\} \quad (3)$$

式中: $c_{i,j}(m)$ 表示污染源参数为 m 的情况下第 i 个传感器第 j 个模拟浓度值; $\sigma_{i,j}$ 为模拟浓度 $c_{i,j}(m)$ 和测量浓度 $d_{i,j}$ 之间误差的标准差。假设误差与测量浓度处于同一量级^[11-13],可以将误差标准差 $\sigma_{i,j}$ 设为与测量浓度 $d_{i,j}$ 相同的值,即:

$$\sigma_{i,j} = d_{i,j} \quad (4)$$

由于反演需要利用不同时刻多个传感器的浓度信息,假设不同测量值之间相互独立,可以将所有测量浓度对应的似然概率相乘。于是,式(1)中的似然概率 $P(d|m)$ 表示为

$$P(d|m) = \prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^M P(d_{i,j}|m) \quad (5)$$

2 模拟浓度计算方法

利用贝叶斯推断解决污染源参数反演问题,往往要计算特定源参数条件下的模拟浓度 $c_{i,j}$,传统的模拟浓度计算方法需要解对流扩散方程。为了获得完整的污染源参数后验概率分布,须求解所有可能污染源参数条件下的对流扩散方程。这种方法的计算量十分庞大,反演的效率非常低。Keats等^[5]提出利用伴随方程计算模拟浓度,使得模拟浓度计算问题变得高效且结果精确。下面将对时变流场中的伴随方程进行推导。

2.1 对流扩散方程

对流扩散方程为

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} + U \cdot \nabla C_m - \nabla \cdot (K \nabla C_m) = S(m) \quad (6a)$$

$$\nabla C_m(x, t) \cdot n = 0, \quad x \in \partial \Omega \quad (6b)$$

$$C_m(x, 0) = 0 \quad (6c)$$

式中: C_m 为源参数为 m 条件下的模拟浓度场; U 为污染

源所在的流场; K 为扩散系数; $S(\mathbf{m})$ 为源项。当污染物释放速率恒定且污染源为点源时, $S(\mathbf{m})=q_s h(x-x_s, y-y_s, z-z_s)$, 其中 $h(\cdot)$ 为delta函数, 表示仅在坐标为 x_s, y_s, z_s 的位置存在释放速率为 q_s 的污染源。式(6b)和式(6c)分别为对流扩散方程的边界条件和初始条件。模拟浓度场 C_m 与传感器模拟浓度 $c_{i,j}(\mathbf{m})$ 的关系为

$$c_{i,j}^t(\mathbf{m}) = \int_0^{t_j} \int_{\Omega} C_m(\mathbf{x}, t) h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, t - t_j) d\Omega dt = C_m(\mathbf{x}_i, t_j) \quad (7)$$

式中: $\mathbf{x}_i = \{x_i, y_i, z_i\}$ 表示第 i 个传感器的空间坐标; t_j 表示第 j 个测量数据的测量时刻。

由于污染物扩散对流场的影响较小, 故对流扩散方程(6a)的流场 U 不会受到源项变化的影响。在这种情况下, 浓度场 C_m 与污染物释放速率 q_s 呈线性关系; 而浓度场 C_m 与污染源位置 x_s, y_s, z_s 呈非线性关系。当污染源位置发生变化时, 需要求解新的对

$$\int_0^{t_j} \int_{\Omega} C^* S(\mathbf{m}) d\Omega dt = \int_0^{t_j} \int_{\Omega} \left\{ C_m \left[-\frac{\partial C^*}{\partial t} - U \cdot \nabla C^* - \nabla \cdot (K \nabla C^*) \right] + \frac{\partial C_m C^*}{\partial t} \right\} d\Omega dt + \int_0^{t_j} \int_{\partial\Omega} C_m [C^* U + K \nabla C^*] \cdot \mathbf{n} dS dt - \int_0^{t_j} \int_{\partial\Omega} C^* K \nabla C_m \cdot \mathbf{n} dS dt \quad (9)$$

令式(9)等号右边第一项的括号中 $-\frac{\partial C^*}{\partial t} - U \cdot \nabla C^* - \nabla \cdot (K \nabla C^*)$ 与式(7)中的 $h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, t - t_j)$ 相等, 即可得到伴随方程(10):

$$-\frac{\partial C^*}{\partial t} - U \cdot \nabla C^* - \nabla \cdot (K \nabla C^*) = h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, t - t_j) \quad (10a)$$

$$(C^* U + K \nabla C^*) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (10b)$$

$$C^*(\mathbf{x}, t_j) = 0 \quad (10c)$$

伴随方程(10a)可以理解成以传感器为源项, 在 t_j 时刻存在脉冲的污染物释放, 同时将时间推进方向和流场速度方向进行反向处理后得到的对流扩散方程。当对流扩散方程(6a)满足边界条件(6b)和初始条件(6c)并且伴随方程(10a)满足边界条件(10b)和初始条件(10c)时, 式(9)中 $\int_0^{t_j} \int_{\Omega} \frac{\partial C_m C^*}{\partial t} d\Omega dt = 0$, $\int_0^{t_j} \int_{\partial\Omega} C_m [C^* U + K \nabla C^*] \cdot \mathbf{n} dS dt = 0$, $\int_0^{t_j} \int_{\partial\Omega} C^* K \nabla C_m \cdot \mathbf{n} dS dt = 0$, 可得到伴随浓度场 C^* 与传感器模拟浓度 $c_{i,j}(\mathbf{m})$ 的关系式:

$$\int_0^{t_j} \int_{\Omega} C^* S(\mathbf{m}) d\Omega dt = \int_0^{t_j} \int_{\Omega} \{ C_m h(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, t - t_j) \} d\Omega dt = c_{i,j}(\mathbf{m}) \quad (11)$$

以上为利用伴随方程计算模拟浓度的推导过程。由伴随方程(10a)可知, 伴随浓度场 C^* 跟源参数 \mathbf{m} 无关, 它仅跟第 i 个传感器的坐标和测量时刻 t_j

流扩散方程, 再通过式(7)计算传感器位置处的模拟浓度。对流扩散方程的求解是非常耗时的, 由于在一次反演中污染源往往存在非常多的潜在位置, 若对每一个潜在位置都求解对流扩散方程, 反演计算的效率将变得非常低。

2.2 伴随浓度

为了快速计算任意参数条件下传感器位置处的模拟浓度, 引入了伴随浓度 C^* 这一变量。将伴随浓度 C^* 与源项 $S(\mathbf{m})$ 相乘, 将其乘积在时间和空间上积分得到:

$$\int_0^{t_j} \int_{\Omega} C^* S(\mathbf{m}) d\Omega dt = \int_0^{t_j} \int_{\Omega} C^* \left[\frac{\partial C_m}{\partial t} + U \cdot \nabla C_m - \nabla \cdot (K \nabla C_m) \right] d\Omega dt \quad (8)$$

利用分部积分法和高斯公式, 可以将式(8)转化为

相关。当传感器位置 \mathbf{x}_i 和测量时刻 t_j 不变时, 计算不同源参数条件下的模拟浓度只需将相应源项 $S(\mathbf{m})$ 代入式(11)即可, 式(11)只涉及积分运算, 而利用对流扩散方程时需要求解偏微分方程, 前者的计算量远远小于后者, 这样就可以极大地加快反演效率。设每个传感器测量的次数为 M , 传感器的数量为 N , 则所需求解伴随方程的总数为 $M \times N$ 。

3 算例分析

3.1 污染物扩散数值模拟

3.1.1 模拟工况

如图1所示, 建筑模型尺寸为 $0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m} \times 0.2 \text{ m}$ ($L \cdot B \cdot H$), 其周围存在A、B、C、D、E 5个不同位置的污染源, 均位于地面, 用空心方块表示, 对5个污染源分别做污染物扩散数值模拟。来流剖面遵循指数律, 建筑顶部高度处风速为 $u_{H1} = 4.2 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 指数 $\alpha = 0.25$ 。10个传感器位于建筑背风侧, 用实心黑点表示, 编号为1~10, 位于距地面 $0.0625 H$ 高度处。

3.1.2 计算域与模拟设置

根据日本建筑学会的计算流体动力学 (computational fluid dynamics, CFD) 指南^[17], 计算域(图2)尺寸设为 $3.4 \text{ m} \times 2.0 \text{ m} \times 0.8 \text{ m}$ ($17 H \cdot 10 H \cdot 4 H$); 计算域入口与建筑模型的距离为 $4.5 H$; 计

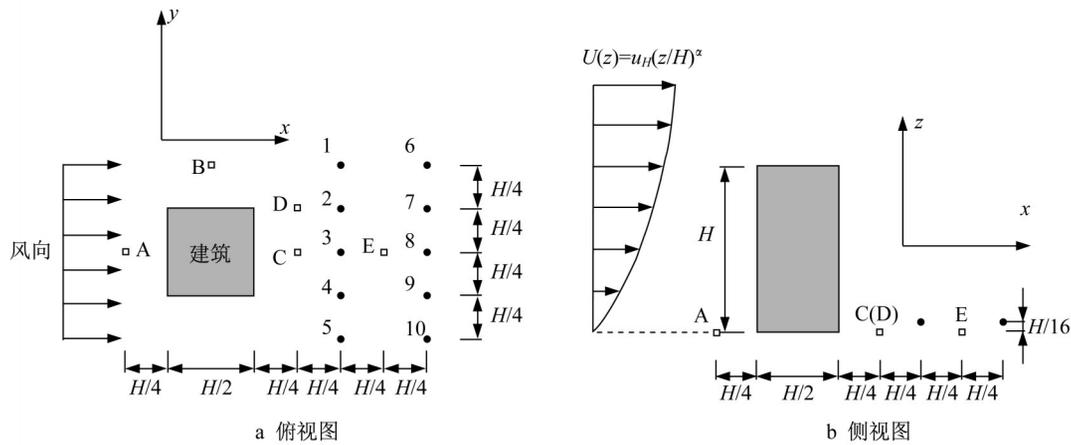


图 1 污染源与传感器布置方式

Fig. 1 Layout of sources and sensors

算域的侧面和出口与建筑模型的距离分别为 $4.75H$ 和 $12H$ 。

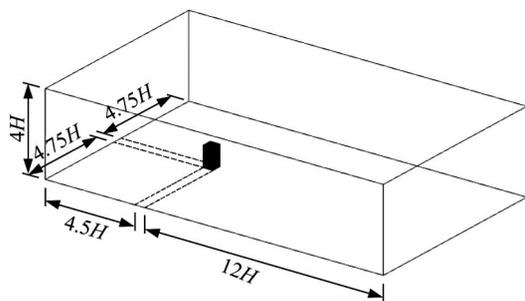


图 2 计算域

Fig. 2 Computational domain

流场模拟以及污染物扩散模拟参数设置如表 1 所示, 湍流模型采用剪切应力输运 (shear stress transfer, SST) $k-\omega$; 流场的计算时间为 50 s ($1.050 H/u_H$)。当流场已经达到稳定 ($t=630 H/u_H$) 时, 污染物开始释放。由于该模拟工况与日本东京工艺大

学于 2006 年做的污染物扩散风洞试验工况类似, 故来流平均速度 u 和湍动能 k 根据试验数据确定, 释放速率为 $q_s=5.83\times 10^{-6}\text{ m}^3\cdot\text{s}^{-1}$ 。

3.1.3 网格无关性检验

为了确保模拟结果不受网格划分方案影响, 需要进行网格无关性检验 (表 2)。计算域采用结构化网格划分, 建筑模型周围以及传感器附近区域进行了网格加密, 粗、中、细三种网格的最小单元尺寸分别为 $H/20$ 、 $H/30$ 和 $H/40$, 网格的伸缩比设置为 1.05, 总网格数分别为 571 400、1 254 123 和 2 105 408。

图 3 为污染源 C 处释放的污染气体在建筑模型下风向 $0.5H$ 和 H 位置且 $y=0$ 处的模拟浓度剖面, 可见仅在建筑下风向 $0.5H$ 且高度大于 $1.2H$ 的位置处, 粗网格条件下模拟得到的气体浓度小于中网格和细网格条件下的模拟结果, 其他位置处三种网格的模拟浓度曲线重合度较高, 故本文选取中网格对污染物扩散进行数值模拟。

表 1 边界条件与数值模拟设置

Tab. 1 Boundary conditions and solver settings for simulation case

项目		设置
边界条件	入口	平均速度 u 和湍动能 k 根据实验数据拟合
	地面及建筑表面	无滑移壁面
	出口	零梯度边界
	顶部及侧面	对称边界 (Symmetry)
求解设置	湍流模型	SST $k-\omega$
	求解算法	算子分裂隐式压力法 (pressure-implicit with splitting of operators, PISO)
	对流项离散	二阶迎风
	瞬态项离散	一阶隐式
	收敛残差	10^{-6}
时间参数	时间步长	$\Delta t=0.021 H/u_H$
	计算时间	流场计算时间: $0 \sim 1.050 H/u_H$ 浓度场计算时间: $630 H/u_H \sim 693 H/u_H$

表2 网格无关性检验参数设置

Tab. 2 Parameter settings of grid independent analysis test

	最小单元尺寸	总网格数
粗网格	$H/20$	571 400
中网格	$H/30$	1 254 123
细网格	$H/40$	2 105 480

3.1.4 自保持性验证

为了保证计算域入口至建筑模型处的来流剖面不会发生显著变化,需要进行自保持性验证。图4a为空风场条件下,数值模拟和风洞试验中的 x 向平

均风速剖面从计算域入口至建筑位置处的变化情况。在数值模拟结果中, x 向平均风速从计算域入口至建筑位置处的变化较小,与风洞试验的测量结果也较为吻合。图4b为空风场条件下,数值模拟和风洞试验中的湍动能剖面从计算域入口至建筑位置处的变化情况。数值模拟和风洞试验得到的湍动能均出现了一定的衰减,相比风洞试验结果,数值模拟的湍动能衰减程度更大。Kim和Baik^[18]研究了数值模拟中湍动能对污染物浓度的影响,根据研究结果可知本文数值模拟中的湍动能衰减对污染物浓度场的影响不大。

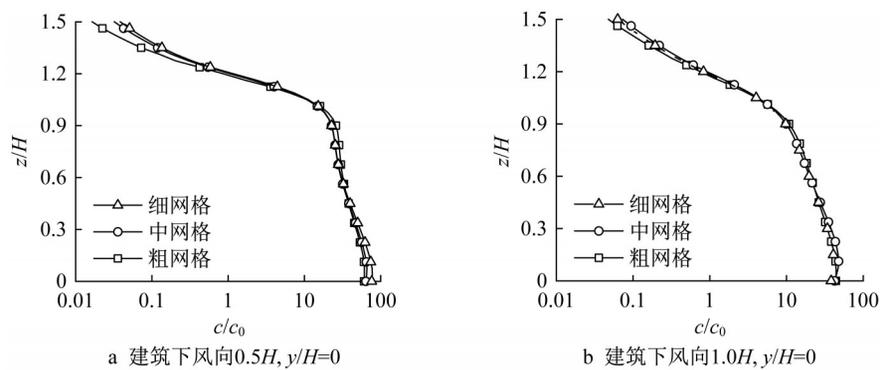
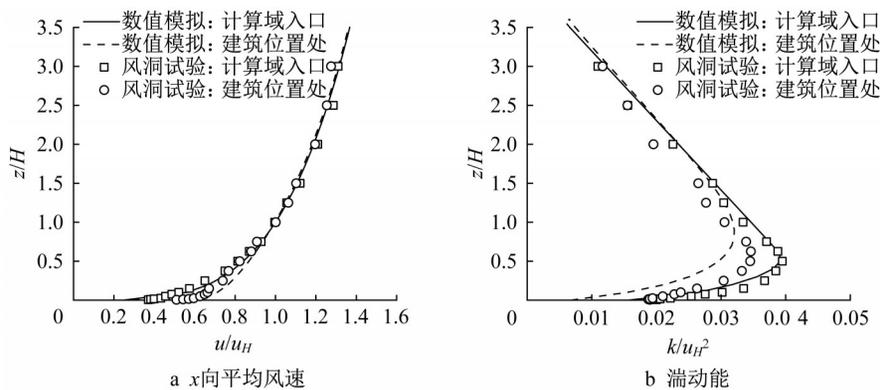


图3 不同网格划分方案的平均浓度剖面

Fig. 3 Profile of mean concentration for different meshing schemes

图4 空风场条件下的 x 向平均风速与湍动能剖面($y/H=0$)Fig. 4 Profile of mean velocity in x direction and turbulent kinetic energy in empty wind field ($y/H=0$)

3.1.5 流场

图5为3号传感器位置处的 x 向的风速(u)时程,流场稳定后的风速存在有规律的周期性波动。

3.1.6 对流扩散方程计算测量浓度

当流场已达稳定状态($t=630 H/u_H$)时,释放污染物气体。图6给出了分别由污染源A~E释放的污染气体,扩散至3号传感器位置处随时间变化的浓度,图中的浓度值经过了量纲一处理,其中 $c_0=q_s/(u_H H^2)=34.7 \times 10^{-6}$ 。从污染物释放初期($t=630$

H/u_H)开始,浓度由零逐渐发展至稳定,受到周期脉动的流场影响,污染物的浓度在发展过程中和稳定后均表现出有规律的周期波动特性。这里通过对流扩散方程(6a)对浓度场进行求解,将式(7)的计算结果作为传感器的测量浓度 d 。

为了在后续研究中探究利用污染物扩散不同阶段的测量数据反演源参数时不同测量数据对反演结果的影响,以 $t=660 H/u_H$ 为分界将污染物扩散过程划分成两个阶段。在 $t=660 H/u_H$ 之前为发展阶段,

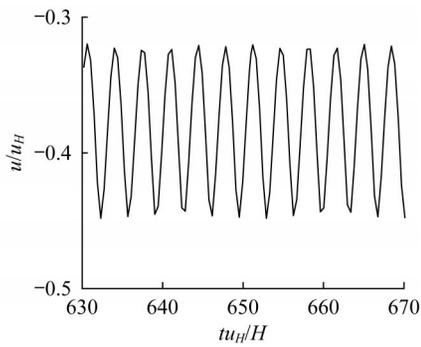


图5 3号传感器处x向瞬时风速时程

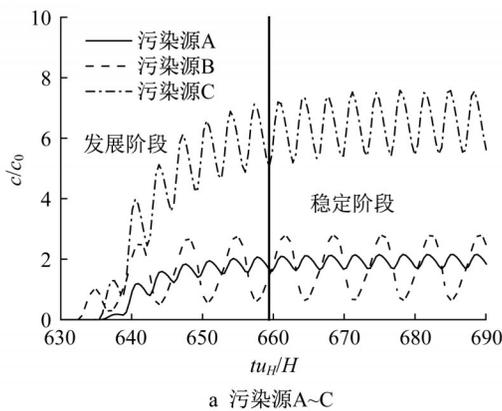
Fig. 5 Temporal velocity in x direction for Sensor 3

在 $t=660 H/u_H$ 之后为稳定阶段。由于3号传感器的浓度时程最具有代表性,其他传感器的浓度变化与之类似,故不再画出其他传感器的浓度时程图。

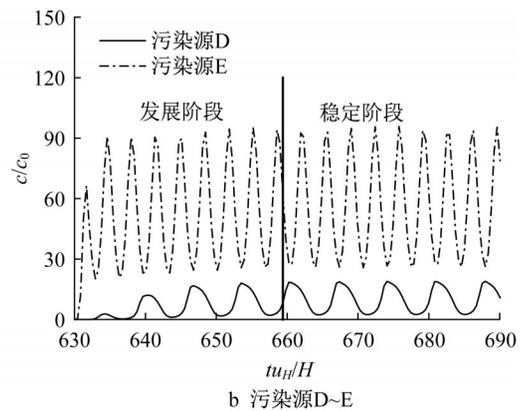
3.1.7 伴随方程计算模拟浓度

2.2节介绍了在计算任意源参数条件下某一传感器位置处某一时刻的模拟浓度时,基于伴随方程的计算方法在节省计算量方面具有优势,故本文通过求解伴随方程(10a),再利用式(11)计算模拟浓

度。图7对比了污染源分别为A~E时,3号传感器位置处的测量浓度和模拟浓度的计算结果。当污染源为A时,模拟浓度与测量浓度相比偏小;当污染源为B时,模拟浓度与测量浓度相比偏大;对于其他位置的污染源,两种浓度的计算结果基本保持一致。虽然污染源分别为A和B时,测量浓度和模拟浓度在3号传感器位置的结算结果存在差异,但是两者均表现出了一致的周期性波动趋势,数值上的误差可能是由网格划分、微分方程离散和四舍五入等因素导致的,这表明基于伴随方程的模拟浓度方法可以在忽略数值误差的情况下达到与基于对流扩散方程时相同的效果。在反演的过程中,这里的误差可以作为数值模拟与实际测量的差异。值得注意的是,在基于对流扩散方程计算5个不同位置污染源产生的污染物扩散至3号传感器位置处在某一时刻的模拟浓度时,须求解5种源参数条件下的对流扩散方程;而基于伴随方程的方法只需针对3号传感器在同一测量时刻求解一次,即可达到相同效果,大大节省了计算量。



a 污染源A~C



b 污染源D~E

图6 3号传感器浓度时程

Fig. 6 Concentration history for Sensor 3

3.2 污染源参数的后验概率

假设污染源位于地面,即污染源的竖向坐标 $z_s=0$,因此仅对污染源的 x_s, y_s 坐标和污染源的污染物释放速率 q_s 进行反演。

3.2.1 污染源参数的传感器与污染源相对位置的影响

图8、图9给出了当污染源分别位于A~E时通过贝叶斯推断得到的污染源位置和强度的后验概率。在污染源位置的后验概率云图中,星号处为污染源的真正位置,空心圆为传感器;在污染源强度的后验概率柱状图中,虚线表示污染源的真正强度。

污染源A位置的后验概率分布在x方向呈较宽的分布,后验概率均值为 $-1.29 H$,与真实值之间的误差为 $0.54 H$,后验概率极值点为 $-0.75 H$,与真实值一致,但其后验概率标准差高达 $0.40 H$,表明污染源位置x坐标的反演结果具有较大的不确定性;污染源A的强度后验概率均值和极值点分别为 $0.72 q_s$ 和 $0.62 q_s$,反演结果与真实值相比偏小。虽然污染源B位置的反演误差和不确定性与污染源A相比有所减少,但是在其强度反演结果中,后验概率分布较为平坦,后验概率均值为 $1.87 q_s$,与真实值之间的误差高达87%,后验概率标准差为 $0.80 q_s$,表明污染源

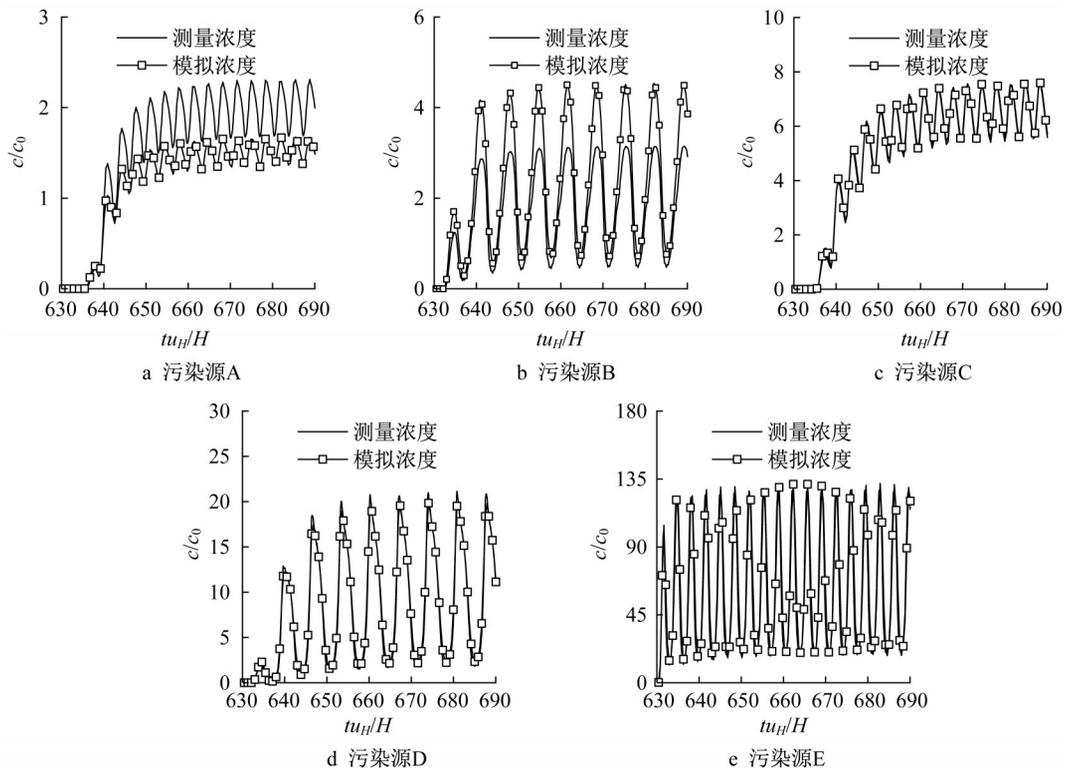


图7 3号传感器位置处测量浓度与模拟浓度比较

Fig. 7 Comparison of measurements and simulated concentrations at location of Sensor 3

B强度的预测可靠性较低。

污染源A和污染源B的反演误差较大,是因为以A和B为污染源做污染物扩散数值模拟时,传感器位置处的测量浓度和模拟浓度之间存在较大的误差,所以当数值模拟不能准确反映真实的测量结果时,会导致反演出现较大的偏差。同时,在反演结果中可以发现,污染源A和污染源B的源参数后验概率标准差也大于其他位置的污染源。这是因为这两个污染源与传感器之间的距离较远。由似然概率式(3)可知,当污染源参数 x_s 、 y_s 和 q_s 能正确描述真实污染源时,似然概率达到最大值,即概率极值。在计算距传感器较远的污染源所产生的污染物在传感器位置的模拟浓度 $c(x_s, y_s, q_s)$ 时,模拟浓度值对于源参数的变化不敏感,即 $\frac{\partial c(x_s, y_s, q_s)}{\partial x_s}$ 、 $\frac{\partial c(x_s, y_s, q_s)}{\partial y_s}$ 和 $\frac{\partial c(x_s, y_s, q_s)}{\partial q_s}$ 较小,后验概率在概率极值点附近的变化不明显,导致后验概率标准差较大,因此污染源A和污染源B的反演结果具有较大的不确定性。为了减少反演结果的不确定性,可以根据历史信息(曾经发生过泄露的位置)和经验设计传感器布置方式。

在计算污染源C~E产生的污染物扩散至传感器位置的浓度值时,测量浓度和模拟浓度的计算结果吻合较好,因此源参数反演的误差较小。同时,传感器的浓度值对于污染源C、污染源D和污染源E的参数变化灵敏度较高,导致了源参数的后验概率标准差较低,反演的不确定性较小。

3.2.2 利用不同扩散阶段测量数据对反演结果的影响

如图6所示,以 $t=660 H/u_H$ 为分界线将污染物扩散过程分为两个阶段。第一个阶段为发展阶段,包含了污染物浓度从零浓度达到稳定状态的发展过程;第二个阶段为稳定阶段,完全由周期性波动的测量数据构成。下面分别利用污染源在C处时传感器位置处发展阶段、稳定阶段和所有时刻的测量数据对污染源参数进行反演,反演结果分别如图10、图11所示。相比利用稳定阶段的测量数据的污染源位置反演结果,利用发展阶段的测量数据可以降低位置误差和减小后验概率标准差,但稳定阶段数据提升的效果并不显著。图表中的结果也反映出利用所有时刻的测量数据时,其反演结果的精确程度提高非常有限。

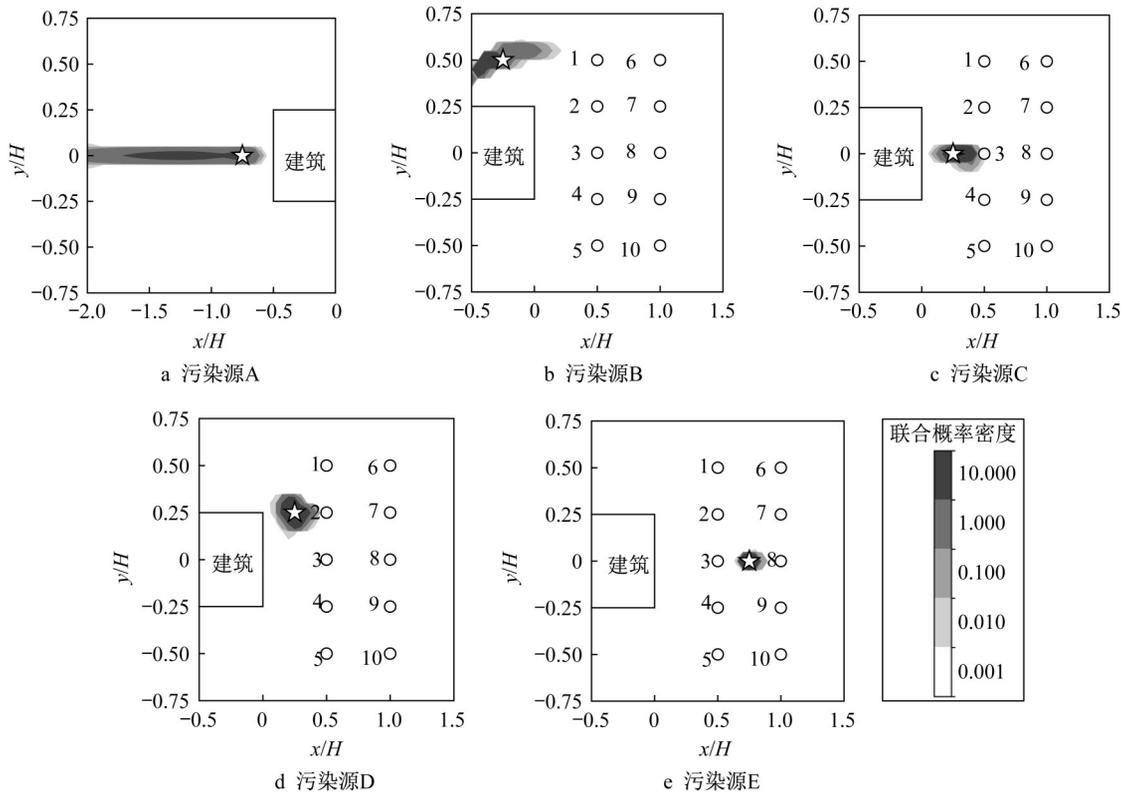


图 8 污染源 A~E 的位置概率云图

Fig. 8 Probability contour of location for pollution source A - E

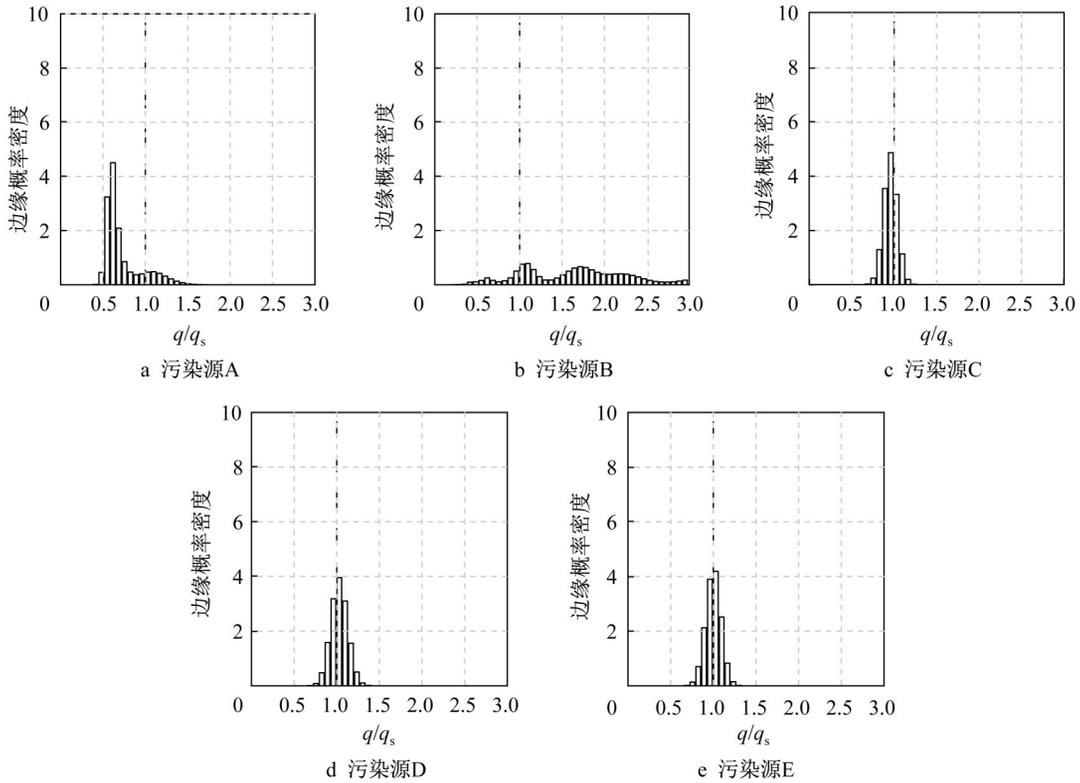


图 9 污染源 A~E 的强度概率密度

Fig. 9 Probability density of strength for pollution source A - E

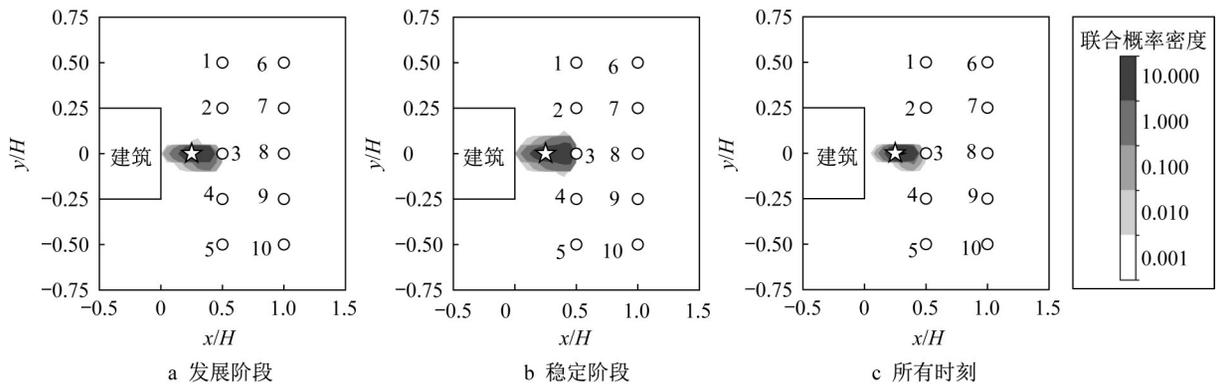


图 10 利用不同阶段测量数据的污染源 A~E 的位置概率云图

Fig. 10 Probability contour of location for pollution source A - E by using measurement from different stages

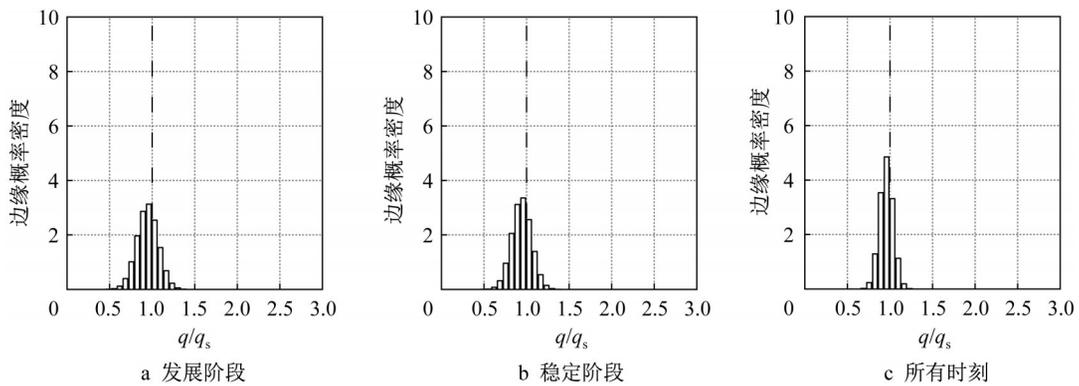


图 11 利用稳定阶段测量数据的污染源 A~E 的强度概率密度

Fig. 11 Probability density of strength for pollution source A - E by using measurement from different stages

4 结论

本文基于贝叶斯推断对时变流场下的污染源参数进行了反演,比较了不同位置污染源的参数反演结果,利用不同扩散阶段的测量数据探讨了其对反演结果的影响,得到了以下结论:

(1)模拟浓度与测量浓度之间的误差是影响反演精确性的主要因素,当数值模拟能准确地反映污染物扩散时,污染源反演的准确性能够得到极大的提高。

(2)当污染源与传感器距离较近时,污染源参数的后验概率分布比较集中,反演结果的不确定性较小,真实的污染源参数可能出现在较窄的区间,污染源所需搜索的范围较小;当污染源与传感器距离较远时,污染源参数的后验概率分布较宽,反演结果的不确定性较大,真实的污染源参数可能出现在较宽的区间,需要较大范围搜索污染源。

(3)不同阶段的污染物扩散测量数据对反演结果不会造成显著的影响。

本研究的不足之处在于污染源参数反演是在已

知流场的前提下进行的,流场的未知性会影响模拟浓度的计算,从而可能造成反演不准确。如何减少流场未知性对反演的影响,需要进一步深入研究。

作者贡献声明:

朱建杰:数值计算,处理数据,论文整体构思与撰写。

周昶毅:研究选题,提供研究思路和技术指导,论文审定。

顾明:论文审定。

参考文献:

- [1] ZHANG T, YIN S, WANG S. An inverse method based on CFD to quantify the temporal release rate of a continuously released pollutant source[J]. Atmospheric Environment, 2013, 77(10): 62.
 - [2] WEI Y, ZHOU H, ZHANG T, *et al.* Inverse identification of multiple temporal sources releasing the same tracer gaseous pollutant[J]. Building and Environment, 2017, 118(1): 184.
 - [3] 江思珉, 张亚力, 蔡奕, 等. 单纯形模拟退火算法反演地下水污染源强度[J]. 同济大学学报(自然科学版), 2013, 41(2): 253.
- JIANG Simin, ZHANG Yali, CAI Yi, *et al.* Groundwater

- contaminant identification by hybrid simplex method of simulated annealing [J]. *Journal of Tongji University (Natural Science)*, 2013, 41(2): 253.
- [4] 曾令杰, 高军. 基于遗传算法的空调风系统突发污染快速溯源[J]. *同济大学学报(自然科学版)*, 2017, 45(8): 1198.
ZENG Lingjie, GAO Jun. Genetic algorithm for sudden contaminant source identification in ventilation system [J]. *Journal of Tongji University (Natural Science)*, 2017, 45(8): 1198.
- [5] KEATS A, YEE A, LIEN F S. Bayesian inference for source determination with applications to a complex urban environment [J]. *Atmospheric Environment*, 2007, 41(3): 465.
- [6] GUO S, YANG R, ZHANG H, *et al.* Source identification for unsteady atmospheric dispersion of hazardous materials using Markov chain Monte Carlo method [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2009, 52(3): 3955
- [7] TIKHONOV A N, ARSEININ V Y, Solution of Ill-posed problem[M]. New York: John Wiley and Sons, 1977.
- [8] 郭少冬, 杨锐, 翁文国. 基于MCMC方法的城区有毒气体扩散源反演[J]. *清华大学学报(自然科学版)*, 2009, 49(5): 629.
GUO Shaodong, YANG Rui, WEN Wenguo. Source inversion of toxic gas dispersion in urban areas based on the MCMC method [J]. *Journal of Tsinghua University (Science and Technology)*, 2009, 49(5): 629.
- [9] 郭少冬, 杨锐, 苏国锋, 等. 基于伴随方程和MCMC方法的室内污染源反演模型研究[J]. *应用基础与工程科学学报*, 2010, 18(4): 695.
GUO Shaodong, YANG Rui, SU Guofeng, *et al.* Investigation of the inversion modeling for indoor contaminant source based on the adjoint equation and MCMC method [J]. *Journal of Basic Science and Engineering*, 2010, 18(4): 695.
- [10] RAJAONA H, SEPTIER F, ARMAND P, *et al.* An adaptive Bayesian inference algorithm to estimate the parameters of a hazardous atmospheric release [J]. *Atmospheric Environment*, 2015, 122(10): 748
- [11] XUE F, LI X, ZHANG W. Bayesian identification of a single tracer source in an urban-like environment using a deterministic approach [J]. *Atmospheric Environment*, 2017, 164(5): 128.
- [12] XUE F, LI X, OOKA R. Turbulent Schmidt number for source term estimation using Bayesian inference [J]. *Building and Environment*, 2017, 125(9): 414.
- [13] XUE F, KIKUMOTO H, LI X, *et al.* Bayesian source term estimation of atmospheric releases in urban areas using LES approach [J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2018, 349(1): 68.
- [14] CHOW F K. Bayesian inference and Markov chain Monte Carlo sampling to reconstruct a contaminant source on a continental scale [J]. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 2007, 47(1): 2600
- [15] SENOCAK I, HENGARTNER N W, SHORT M B, *et al.* Stochastic event reconstruction of atmospheric contaminant dispersion using Bayesian inference [J]. *Atmospheric Environment*, 2008, 42(5): 7718.
- [16] WADE D, SENOCAK I. Stochastic reconstruction of multiple source atmospheric contaminant dispersion events [J]. *Atmospheric Environment*, 2013, 74(2): 45.
- [17] TOMINAGA Y, MOCHIDA A, YOSHIE R, *et al.* AIJ guidelines for practical applications of CFD to pedestrian wind environment around buildings [J]. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 2008, 96(2): 1749.
- [18] KIM J J, BAIK J J. Effects of inflow turbulence intensity on flow and pollutant dispersion in an urban street canyon [J]. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 2003, 91(1): 309.