

6-2-2020

Data Driven Simulation of Polluted Gas Dispersion Using Source Estimation and Particle Filter

Rongxiao Wang

College of Information System and Management, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China;

Bin Chen

College of Information System and Management, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China;

Sihang Qiu

College of Information System and Management, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China;

Zhengqiu Zhu

College of Information System and Management, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China;

See next page for additional authors

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the [Artificial Intelligence and Robotics Commons](#), [Computer Engineering Commons](#), [Numerical Analysis and Scientific Computing Commons](#), [Operations Research](#), [Systems Engineering and Industrial Engineering Commons](#), and the [Systems Science Commons](#)

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

Data Driven Simulation of Polluted Gas Dispersion Using Source Estimation and Particle Filter

Abstract

Abstract: The real-time prediction of the air contaminant dispersion in chemical industry park is important to the emergency management of air pollution accident. Due to the unknown source terms and the error of input parameters in the atmospheric dispersion model, the accuracy of traditional simulation is limited. *A data driven atmospheric dispersion simulation based on source estimation and particle filter was proposed.* Based on the results of the source estimation, particle filter was applied to assimilate the UAV observation into the dispersion model in real time to calibrate the system state and obtain more accurate prediction results. Experiments show that the proposed data driven atmospheric dispersion simulation method can predict the concentration distribution more precisely and provide strong support for emergency treatment.

Keywords

air contaminant dispersion, data driven simulation, source estimation, data assimilation, particle filter, UAV

Authors

Rongxiao Wang, Bin Chen, Sihang Qiu, Zhengqiu Zhu, and Xiaogang Qiu

Recommended Citation

Wang Rongxiao, Chen Bin, Qiu Sihang, Zhu Zhengqiu, Qiu Xiaogang. Data Driven Simulation of Polluted Gas Dispersion Using Source Estimation and Particle Filter[J]. Journal of System Simulation, 2017, 29(9): 2100-2108.

基于源项估计的污染气体扩散数据驱动仿真

王戎骁, 陈彬, 邱思航, 朱正秋, 邱晓刚

(国防科技大学信息系统与管理学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 化工园区污染气体扩散的实时预测对于大气污染事故的应急管理具有重要意义。由于大气扩散模型中源项参数的未知以及输入参数的误差, 传统的大气扩散仿真精度有限。因此提出了一种基于源项估计与粒子滤波的污染气体扩散数据驱动仿真方法。基于源项估计获取的源项参数, 利用粒子滤波将无人机观测气体浓度数据实时注入扩散模型中以校正系统状态, 获取更为准确的预测结果。实验表明, 相比传统仿真方法更准确地预测了气体浓度分布, 为应急处置提供有力的数据支撑。

关键词: 污染气体扩散; 数据驱动仿真; 源项估计; 数据同化; 粒子滤波; 无人机

中图分类号: TP391.9

文献标识码: A

文章编号: 1004-731X (2017) 09-2100-09

DOI: 10.16182/j.issn1004731x.joss.201709030

Data Driven Simulation of Polluted Gas Dispersion Using Source Estimation and Particle Filter

Wang Rongxiao, Chen Bin, Qiu Sihang, Zhu Zhengqiu, Qiu Xiaogang

(College of Information System and Management, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The real-time prediction of the air contaminant dispersion in chemical industry park is important to the emergency management of air pollution accident. Due to the unknown source terms and the error of input parameters in the atmospheric dispersion model, the accuracy of traditional simulation is limited. A data driven atmospheric dispersion simulation based on source estimation and particle filter was proposed. Based on the results of the source estimation, particle filter was applied to assimilate the UAV observation into the dispersion model in real time to calibrate the system state and obtain more accurate prediction results. Experiments show that the proposed data driven atmospheric dispersion simulation method can predict the concentration distribution more precisely and provide strong support for emergency treatment.

Keywords: air contaminant dispersion; data driven simulation; source estimation; data assimilation; particle filter; UAV

引言

近年来, 化工园区的气体泄漏事故时有发生, 对人民生命财产安全造成重大损失。在气体泄漏事

故的应急管理中, 对大气扩散的实时仿真是一项重要课题。传统的大气扩散仿真依赖于大气扩散模型, 具有一定的有效性。典型的大气扩散模型包括高斯扩散模型及拉格朗日粒子模型等。然而, 在假设模型基本准确的情况下, 大气扩散仿真的准确性依赖于模型输入参数, 包括源项(源位置和释放速率), 风场, 其他气象条件等。由于大气扩散的动态性和随机性, 准确地获取各参数值在实际中非常



收稿日期: 2017-05-05 修回日期: 2017-07-13;
基金项目: 国家自然科学基金(71673292, 61503402),
国家重点研发计划重点专项资金(2017YFC0803300),
上海市软件和集成电路产业发展专项资金(150312);
作者简介: 王戎骁(1994-), 男, 江西吉安, 硕士生,
研究方向为系统仿真。

<http://www.china-simulation.com>

• 2100 •

困难。一方面, 气体扩散仿真依赖的源项参数在实际场景中通常是未知的; 另一方面, 气体扩散模型的其他输入参数无法实时准确测得, 如风场数据。因此如何实时准确地获取上述参数成为提高大气扩散仿真准确度的关键。

源项估计^[1]是基于气体浓度观测数据对排放源源项参数进行估计的方法, 可分为前向估计和后向估计方法。贝叶斯推理是典型的前向估计方法。在贝叶斯推理中, 源项估计的目的是获得使后验概率最大的源项参数值。此外, 一些滤波技术也可用于源项估计, 如卡尔曼滤波^[2]和粒子滤波^[3]。Ma 等^[4]使用最小相对熵和粒子群优化(MRE-PSO)方法基于高斯模型来定位和量化排放源。然而, 这些方法仅适用于释放速率恒定的排放源估计。此外, 神经网络可用于无扩散模型的源项估计^[5]。Wang 等^[6]提出了一种通过神经网络估计气体扩散分布的方法, 并将其应用于危害评估。

数据同化方法可应用于大气扩散模型其他输入参数的实时校正。数据同化方法将模型和观测数据相结合, 基于观测数据实时更新模型参数, 从而改善模型的预测效果。该方法已广泛应用于各个领域的数据驱动仿真, 特别是在对精度要求较高的数值天气预报中。Hu^[7-8]提出了使用粒子滤波的动态数据驱动仿真框架并将其应用于野火蔓延仿真。数据同化的常用方法包括变分法, 卡尔曼滤波及其变体(如扩展卡尔曼滤波(EKF^[9])和集合卡尔曼滤波(EnKF^[10])), 粒子滤波等。Krysta 等^[11]使用变分法将风洞数据注入放射性核素的短距扩散模型中实现数据驱动仿真。Zheng 等^[12]将基于 EnKF 的数据同化引入蒙特卡罗大气模型(MCADM)来预测放射性核素的扩散。Reddy^[13]提出了一个状态向量维数可变的数据同化方法, 并比较了粒子滤波和扩展卡尔曼滤波的同化效果。与其他方法相比, 粒子滤波更适用于非线性和非高斯模型。其核心思想是使用一系列加权随机抽样粒子来近似系统状态的后验概率密度函数, 因此它能够估计任意概率密度, 并且对模型的假设约束较少。这使得粒子滤波成为对

复杂系统(如大气扩散)进行数据同化的有效方法。

源项估计与数据驱动的大气扩散仿真均需要实时观测数据的支撑。在化工园区, 传统的气体监测方式主要依靠地面固定监测站。然而由于有限的数量和固定的位置, 监测站获得的有效数据比较有限。无人机(unmanned aerial vehicle (UAV))的出现改变了数据采集方式, 它灵活的移动特性使其广泛应用于大气环境监测中。例如 Yang^[14]利用无人直升机监测系统监测化学工业园区的 SO₂ 和 NO。Hirst^[15]等人提出了一种基于无人机遥感浓度数据定位和量化排放源的方法。

本文提出了一种基于源项估计和粒子滤波的大气扩散数据驱动仿真方法。大气扩散模型选择基于高斯烟团的扩散模型, 其基本思想是用一系列高斯烟团的释放和扩散来模拟污染气体扩散过程。基于该扩散模型及气体浓度观测数据, 利用贝叶斯推理进行源项估计。接着进行污染气体扩散的数据驱动仿真。建立大气扩散的状态空间模型, 选取合适的状态变量作为待校正的参数。基于源项估计值, 利用粒子滤波将观测数据实时注入扩散模型实现系统状态的实时校正。此外, 为了更有效地获取观测数据, 设计了一种基于无人机的污染气体监测系统。为了验证源项估计及数据驱动仿真的有效性, 设计和进行了一系列实验。

1 污染气体扩散模型与源项估计

本节介绍基于高斯烟团的扩散模型, 并基于该模型利用贝叶斯推理进行源项估计。

1.1 基于高斯烟团的扩散模型

本研究中的大气扩散模型选定为基于高斯烟团的扩散模型。在此模型中, 空气污染物的释放和扩散是通过一系列烟团来建模的。单个烟团的扩散符合典型的高斯烟团扩散模型:

$$f(x, y, z, t) = \frac{q}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}} (e^{-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}} + e^{-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}}) \quad (1)$$

式中： x, y, z 分别是三维空间中的坐标，其中 x 轴的正方向为风向； t 代表该烟团的扩散时间； H 代表源高度； q 是烟团释放时包含空气污染物的总量； u, v 分别是风速与风向。该模型使用高斯烟团模拟点源的瞬时释放。烟团在大气中随风传播，其中的污染气体服从高斯分布。 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 分别是 x, y 和 z 轴的高斯分布标准差，可用经验公式描述：

$$\sigma_x = \sigma_y \quad (2)$$

$$\sigma_y = ax^b \quad (3)$$

$$\sigma_z = cx^d \quad (4)$$

式中： x 表示烟团移动的总距离； a, b, c, d 为扩散系数，与当地环境条件如大气稳定性和地形密切相关。在基于高斯烟团的模型中，排放源以一定的时间间隔释放烟团。因此， t 时刻给定点 (x, y, z) 处的污染气体浓度来源于所有已释放烟团的叠加：

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n f(x, y, z, t - (i-1)\delta) \quad (5)$$

其中源位置假设为 $(0, 0, 0)$ ，首个烟团的释放时间为 0。 q_i 表示第 i 个烟团的释放量； n 为释放烟团的数量； δ 是相邻两烟团释放的时间间隔，第 i 个烟团的扩散时间为 $t - (i-1)\delta$ 。

1.2 基于贝叶斯推理的源项估计

贝叶斯推理是不确定条件下的一种统计决策方法。它的显著特征是使用先验信息和观测样本信息来获得统计结论。在大气扩散中，源项参数表示为 $\theta = \{l, q(t)\}$ 。根据 2.1 节，空间中一点 x, y, z 的理论浓度值可以通过式(1)~(5)计算。基于贝叶斯推理的源项估计使用观测气体浓度数据 $D = \{\omega_i\}_{i=1}^m$ 来估计排放源的位置 l 和释放速率 $q(t)$ 。 D 由无人机监测系统在风场 W (包含风速和风向) 下测得，其包含 m 条数据，第 i 条数据包括采集时刻 t_i ，采集坐标 $\{x_i, y_i, z_i\}$ 以及气体浓度值 c_i 。基于贝叶斯推理的源项估计是在已知气体浓度观测数据的前提下对排放源的二维坐标与释放速率进行估计的过程，其实质是获取二维空间中具有最大后验概率的源位置坐标以及释放速率。利用贝叶斯推理方程得到源项 θ 的后验概率函数如下：

$$p(\theta|D) = p(\theta)p(D|\theta) \quad (6)$$

式中： $p(\theta|D)$ 表示后验概率密度函数； $p(\theta)$ 是先验概率函数； $p(D|\theta)$ 表示似然函数。似然函数计算如式(7)所示：

$$p(D|\theta) = \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_e^2} \sum_{i=1}^m [C(x_i, y_i, z_i, t_i) - c_i]^2\right\} \quad (7)$$

计算后验概率密度的关键是确定先验概率密度和似然函数。先验概率密度可以从历史数据或理论评估中获得。在本研究中有关排放源的先验信息较少，故采用均匀分布作为先验概率分布。对于似然函数，由于释放速率难以估计，因此首先假设释放速率为某一定值 q ，利用极大似然准则对源位置 l 进行估计得到其极大似然估计值 (Maximum Likelihood Estimation (MLE)) l' 。基于得到的 l' ，得到使似然函数 $p(D|(l', q(t)))$ 取最大值的源释放速率极大似然估计值 $q'(t)$ 。至此，得到所有源项参数的估计值。为提高求解极大似然估计时的搜索效率，采用粒子群算法 (Particle Swarm Optimization, PSO) 进行寻优搜索。

2 基于无人机的污染气体监测系统

源项估计和数据同化均需要气体浓度观测数据的支持，传统的数据采集方式主要依靠化工园区内的固定监测站。固定监测站采集数据的精度较高，但由于位置固定且数量有限，其采集到的有效数据较为有限。本文提出了一种基于无人机的污染气体监测系统以弥补固定监测站的不足，如图 1 所示。该系统由飞行平台，传感设备和数据管理系统组成。飞行平台选取小型四旋翼无人机 DJI M100，可提供灵活的移动能力以及传感设备的搭载平台。系统工作流程如图 2 所示。集成在无人机上的传感设备由微控制单元，气体传感器，GPS 和网络连接模块组成。传感设备的任务包括实时数据采集与数据传输，采集的数据包括污染物浓度，地理定位和采集时间。构建在云服务器上的数据管理系统实时接收数据，并实现数据存储和网页上的数据可视化。研究人员可以通过访问网页来获取无人机的飞行轨迹和对应浓度数据。

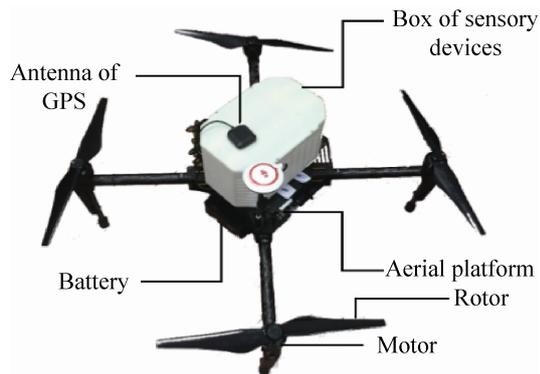


图 1 基于无人机的污染气体监测系统
Fig. 1 UAV-based air contaminant sensory system

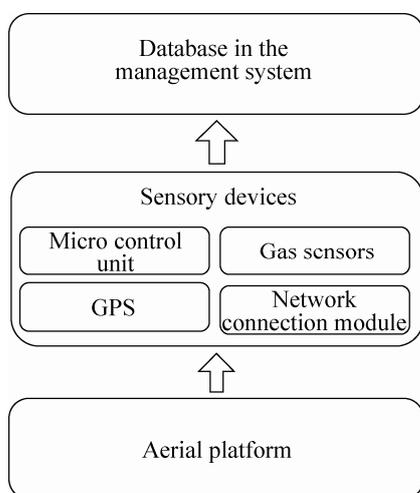


图 2 无人机监测系统工作流程
Fig. 2 Workflow of UAV sensory system

3 基于粒子滤波的气体扩散数据驱动仿真

高斯烟团模型的输入参数(如风场, 扩散系数)无法准确测量, 在传统的仿真中通常使用这些参数的估计值带入计算, 这样不可避免地带来误差。采用数据同化方法, 将无人机监测系统的观测数据实时注入扩散模型以校正模型参数可以较好地提高模型的预测准确度。

3.1 粒子滤波

粒子滤波广泛应用于数据同化中, 它基于观测数据, 利用贝叶斯推理和随机采样技术对动态系统状态进行估计。其核心思想是用一组带权重的粒子来近似表示系统状态的后验概率分布。相较于卡尔

曼滤波及其衍生方法, 粒子滤波更适用于非线性系统。典型的粒子滤波算法包含初始化, 重要性采样, 权重更新和重采样 4 个步骤。

3.2 基于粒子滤波的数据同化

为了将粒子滤波应用于高斯烟团模型的数据同化, 需要建立大气扩散的状态空间模型。一个动态系统可用状态空间模型表示为:

$$s_{t+1} = f(s_t, t) + \gamma_t \quad (8)$$

$$m_t = g(s_t, t) + \omega_t \quad (9)$$

式(8)为系统状态转移方程, $f(s_t, t)$ 为状态转移函数, 描述系统状态 随时间的变化规律, γ_t 代表过程误差。式(9)为系统观测方程, 代表系统状态 s_t 到观测量 m_t 之间的映射关系, ω_t 代表观测误差。建立状态转移方程的关键是确定合适的系统状态变量。在大气扩散中, 通常可先将扩散区域网格化, 选取网格上的浓度分布作为系统状态变量。将网格浓度分布作为状态向量, 维数过高, 计算代价大, 不适合实时仿真, 因此需选取更为简易的状态变量。在高斯烟团模型中, 式(3), (4)中的 4 个扩散系数 a, b, c, d 是影响扩散的重要因素。一方面, 由扩散系数推导而来的高斯分布标准差 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 直接影响气体浓度在 3 个方向上的分布; 另一方面, 扩散系数与当地大气稳定性和地形条件紧密相关, 实际场景中难以确定。因此, 选择扩散系数 a, b, c, d 作为系统状态变量能够充分描述系统, 且状态向量维数仅为 4, 大大降低了计算代价。选取扩散系数为状态变量, 系统的状态向量和状态转移方程可表示为:

$$s_t = (a_t, b_t, c_t, d_t) \quad (10)$$

$$s_{t+1} = s_t + \gamma_t \quad (11)$$

式(11)中, 由于化工园区有限地域内的扩散系数在短时间内变化不大, 因此状态转移函数 $f(s_t, t)$ 为恒等函数。状态限量的变化可由过程误差向量 γ_t 提供。 γ_t 高斯白噪声, 分量均服从 $(0, \sigma_1^2)$ 的高斯分布。

系统的观测方程可表示为:

$$m_t = g(s_t, t) + \omega_t \quad (12)$$

$$g(s_i, t) = C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n f(x, y, z, t - (i - 1)\delta) \quad (13)$$

观测方程描述了系统状态变量与观测量的映射关系，因此函数 $g(s_i, t)$ 为 2.1 节中的高斯烟团方程。观测误差 ω_i 为服从 $(0, \sigma_2^2)$ 高斯分布的白噪声。建立大气扩散的状态空间模型后，利用粒子滤波结合无人机观测数据可实现高斯烟团模型数据同化。

4 实验

本节分别就之前提出的源项估计和大气扩散数据驱动仿真进行实验。源项估计实验以某化工园区为例，以无人机监测系统实际采集数据为基础进行。而大气扩散驱动仿真基于仿真观测数据进行。

4.1 源项估计

在某化工园区选取一个占地约 200 hm² 的监测区域，区域内主要包括一个大型石油化工厂。利用无人机监测系统对该区域的污染气体浓度进行监测，采集其浓度分布数据。出于安全考虑，无人机不允许飞入厂区，因此飞行路线为环绕该区域外围。无人机在距地面 50 m 高度上以 1 Hz 的采集频率飞行约 20 min 后完成采集过程。观测到的数据显示：除二氧化硫外其余各类气体浓度在整个实验过程中保持在低水平。沿飞行轨迹的二氧化硫浓度分布如图 3 所示。从图中可以发现，监测区域的西南角二氧化硫浓度较高，其中浓度峰值约为 10 mg/m³。需要说明的是，在实验过程中，发现该区域的二氧化硫浓度偏高之后，无人机在该区域上空盘旋了一段时间以采集更多的数据，因此图中该区域出现了大量采集点。

基于无人机监测系统采集到的二氧化硫浓度数据，首先使用 PSO 求解具有最大后验概率的源位置。图 4 显示了算法运行过程中 $t=1, 5, 10$ 和 15 的粒子分布。 $t=1$ 时，525 个粒子在 2 500 m×2 500 m 的搜索区域被均匀地初始化。从 $t=1$ 到 $t=15$ ，粒子逐渐收敛到该区域的左下方，这对应于监测区域的西南部。估计源位置为各粒子坐标的加权平均和，

计算结果为(-305.6, -1 244.4)。获取源位置后，根据 MLE 原理，估计释放速率为 0.391 5 kg/s。在现场观察中发现，在估计的源位置附近的确存在一处硫酸回收烟囱，可初步验证源项估计的结果。

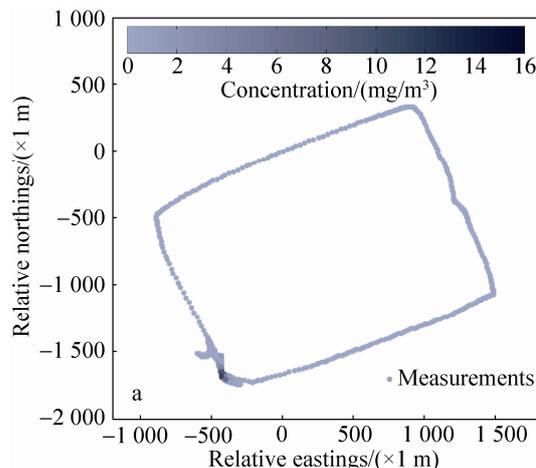
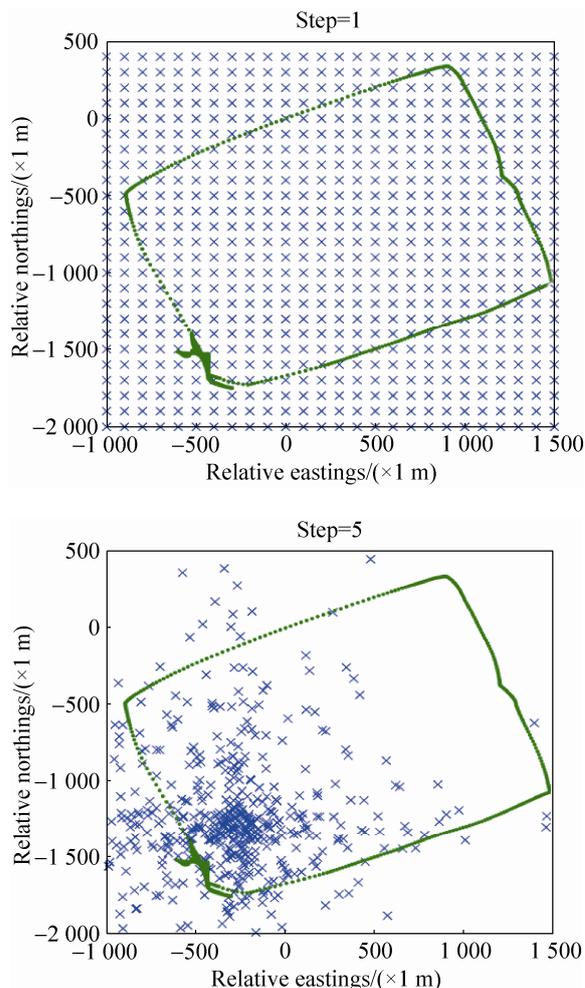


图 3 沿飞行轨迹的二氧化硫浓度分布
Fig. 3 Concentration of SO₂ along flight path



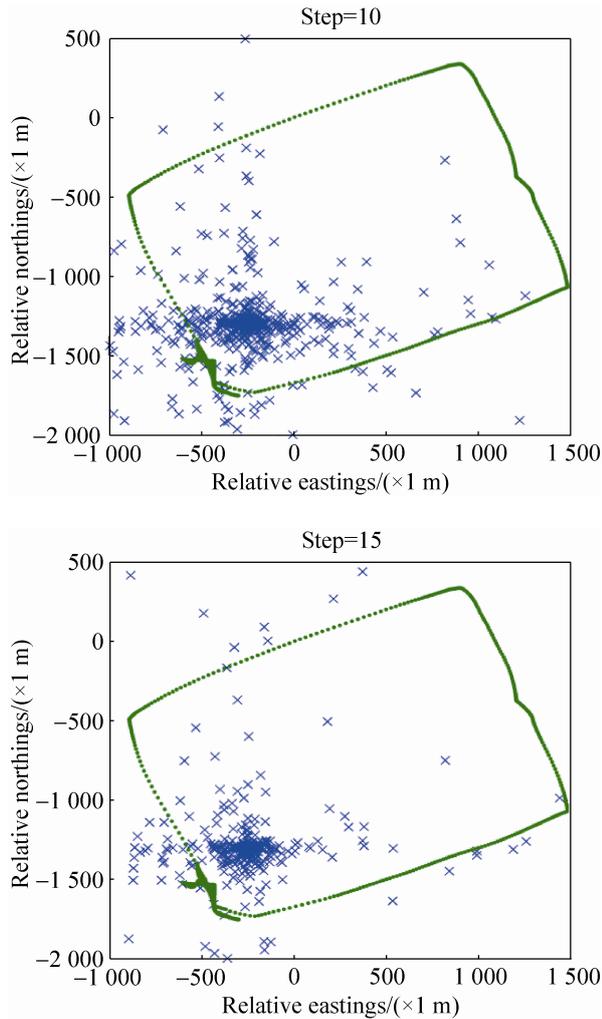
图 4 $t=1, 5, 10, 15$ 时的粒子分布

Fig. 4 Distribution of particles at Steps 1, 5, 10 and 15

4.2 基于数据同化的气体扩散仿真

按照最初的设想, 基于粒子滤波的大气扩散数据驱动仿真中的观测数据由无人机在现地观测得到。但由于本实验中仅采用一架无人机, 在同一时刻只能获取一组有效数据, 难以支撑数据同化的进行。因此, 在计算机上构建了污染气体扩散的仿真实验, 实验中的源项参数、风场与观测数据均由人为设计。该仿真实验共 A, B 两组实验, 如表 1 所示。

表 1 数据驱动仿真实验设置
Tab. 1 Design of experiment

实验名称	方法	作用
实验 A	高斯烟团模型	对照组: 与实验 B 进行对照
实验 B	数据驱动的高斯烟团模型	实验组: 测试数据驱动仿真的预测效果

实验 B 为实验组, 用以测试数据驱动的大气扩散仿真的预测效果; 实验 A 为对照组, 代表无数据同化情形下的传统大气扩散仿真。一组“真实”扩散被用来生成气体浓度观测数据, “真实”扩散中采用了带扰动的风场数据和时变的扩散系数作为高斯模型的输入参数来模拟真实的大气扩散情形。实验 A 使用固定的源项和风场参数, 代表无数据同化下的大气扩散仿真。由于许多输入参数难以精确观测, 在传统仿真中通常采用参数的估计值, 这与实验 A 的设计思路一致。实验 B 是基于与实验 A 相同初始参数的数据驱动仿真。在实验 B 中, 从“真实”扩散中获得的观测数据被注入到扩散模型中以实时校正系统状态。在实验中, 通过比较有无数据同化下的模型预测结果来验证数据驱动仿真方法的效果。实验模拟 1000×1000 (m^2) 区域上的 20 min 内 30 m 高度上污染气体浓度的变化。源位于 (0, 0), 高度为距地面 70 m, 排放源在整个仿真过程内每隔 10 s 释放一个烟团。

4.2.1 无人机轨迹

实验中的观测数据假设由第 2 节中无人机监测系统采集。为了有效地获取数据, 无人机的轨迹根据风向设计。参考 Indianapolis 实验^[16]中的传感器分布, 轨迹被设计为可以充分覆盖烟羽的弧形。例如, 当风向为 220° 时, 无人机轨迹如图 5 所示。

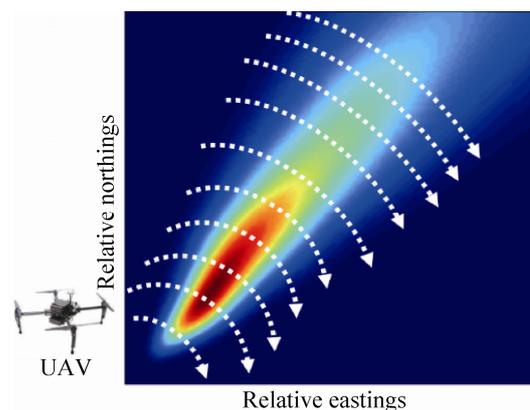
图 5 风向为 220° 时的无人机轨迹

Fig. 5 Sketch of UAVs' trajectories in 220 deg wind direction

为了收集足够的的数据, 采用 10 架无人机同时进行数据采集, 对应于距离间隔约 100 m 的 10 条

轨迹。每个无人机沿其轨迹移动，并在每个时间步长(10 s)内收集浓度数据。

4.2.2 风场参数

风场参数对大气扩散影响显著，但在实际情况下难以准确观测，变化规律难以刻画。为简单起见，在“真实”扩散的风场建模中加入扰动因子以模拟其在真实场景下的变化。风速被建模为均值 4 m/s，标准差 10%的高斯白噪声。影响烟羽方向的风向被建模为均值为 220°，标准差为 10°的随机变量。实验 A 和实验 B 中的风场无法准确获得，因此均采用固定估计值，分别为 4 m/s 和 220°。

4.2.3 扩散系数

扩散系数与大气稳定性和地形等环境条件密切相关。Pasquill-Gifford-Turner(以下称 PGT^[17-18])方法被广泛应用于大气稳定度的定级。基于该方法的 PGT 曲线可以根据大气稳定度等级来确定扩散系数。但是，PGT 方法未完全考虑地形条件。除 PGT 方法外还有一些研究人员给出了不同大气稳定性和地形条件下的扩散系统值，如 Brigg^[19]和 Vogt^[20]。Carrascal^[21]在相同的大气条件下比较了一系列扩散系数取值的准确性。在“真实”扩散中，我们采用 Vogt 的实验值。根据 Vogt 的 4 个系数的值如表 2 所示。

表 2 不同大气稳定度下 a, b, c, d 取值
Tab. 2 Values of a, b, c, d under different atmospheric conditions according to Vogt

大气稳定度等级	a	b	c	d
A	0.23	1.00	0.10	1.16
B	0.23	0.97	0.16	1.02
C	0.22	0.94	0.25	0.89
D	0.22	0.91	0.40	0.76
E	1.69	0.62	0.16	0.81
F	5.38	0.58	0.40	0.62

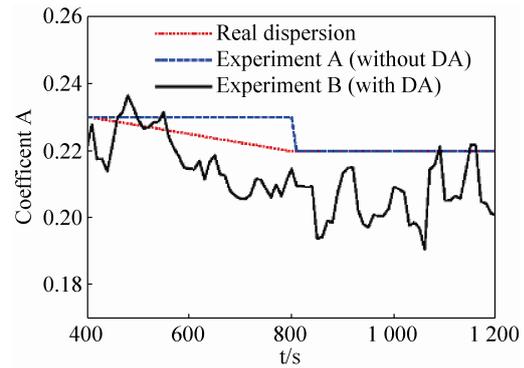
该表给出了在开阔乡村地形下不同大气稳定度下的 a, b, c, d 取值。从 A~F，大气条件趋于稳定。化工园区的地形与开阔乡村类似，均无大型障碍物。因此，该实验值基本适用于化工园区场景。在“真实”扩散中，假设大气稳定度在 20 min 内从

A 均匀变化至 B, C，最终到达 D。因此扩散系数呈线性变化，如图 6 中红色点线所示。而在实验 A 中，扩散系数每隔 400 s 按照此时“真实”扩散中的大气稳定度进行更新。

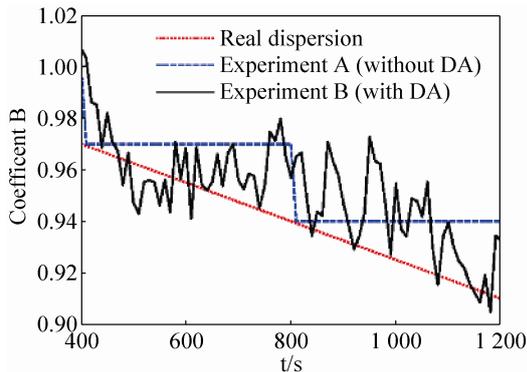
首先运行使用扰动风场和变化扩散系数的“真实”扩散以产生“真实”浓度分布。之后，无人机沿着设计的轨迹采集数据。在实验 B 中，将观测数据同化进高斯烟团模型以实时更新扩散系数 a, b, c, d，并生成数据同化后的预测浓度分布。此外，进行实验 A 以产生无数据同化下的浓度分布预测作为对照。图 6 显示了有无数据同化(Data Assimilation (DA))下 4 个系数的变化情况。由于前 400 s 时仿真仍处于“预热”期，预测结果不稳定，因此选取了 400 s 之后的时间段。在无数据同化时，扩散系数每隔 400 s 更新一次。相比之下，实验 B 中的系数通过将观测数据的实时同化得以校准和更新，不断趋近与“真实”值。同时可以发现 4 个扩散系数特别是 a, b 与真实值仍有一定误差。其中扩散系数 c, d 的同化效果较 a, b 更为显著，这是由于在式(3), (4)中，c, d 对高斯分布标准差 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的影响远大于 a, b，因此在数据同化过程中更容易被校正。此外，由于生成观测数据模型中的输入参数(风场，释放速率)误差与扩散系数无关，数据同化算法通过校正扩散系数来削减这类误差时也会导致扩散系数与“真实”值之间的差异。

4.2.4 实验结果

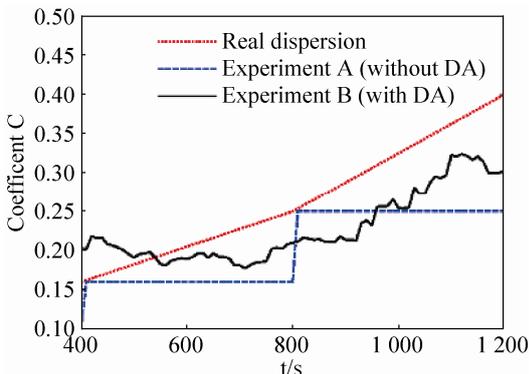
为了观察数据同化对浓度预测的影响，对两组实验中每个时刻无人机轨迹点上的浓度均方根误差(root mean square error (RMSE))进行计算，如图 7(a)所示。从图中可以看出，实验 B 中的 RMSE 在大部分时间段低于实验 A 中的 RMSE。无数据同化时四个系数在每次更新之前保持恒定，而在“真实”扩散中是时变的，因此四个系数的误差在更新时间间隔内逐渐累积。而在观测数据实时注入之后，RMSE 减小到相对较低的水平。图 7(b)显示了模型预测浓度值与“真实”扩散中浓度值的对比情况，两者的相关系数 $R=0.9796$ ， $RMSE=0.02001$ ，显示出高度一致性。



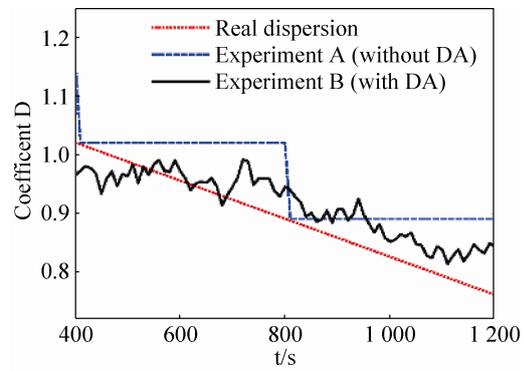
(a) Coefficient a



(b) Coefficient b



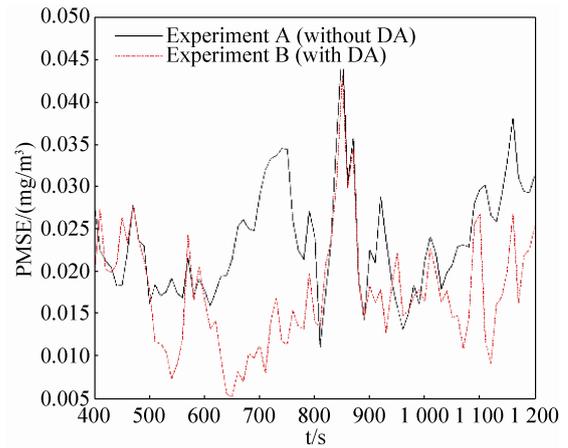
(c) Coefficient c



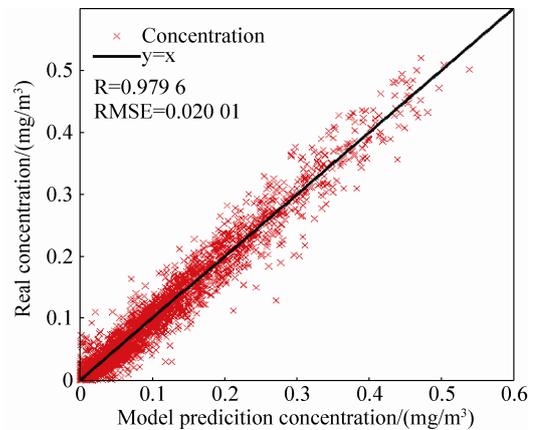
(d) Coefficient d

图 6 2 组实验中的扩散系数变化趋势

Fig. 6 Variation trend of four dispersion coefficients in two experiments



(a) 采集点浓度值 RMSE 对比



(b) 数据同化下浓度预测值与观测值对比

图 7 无人机轨迹点上的数据同化结果

Fig. 7 Data assimilation results at UAVs' trajectory points

两组实验中模型对整个区域上浓度预测分布的 RMSE 如图 8 所示。从图中可看出, 实验 A 中由于无数据同化的支持, 误差在扩散系数更新之前逐渐累积。而数据同化下 RMSE 稳定在低水平。

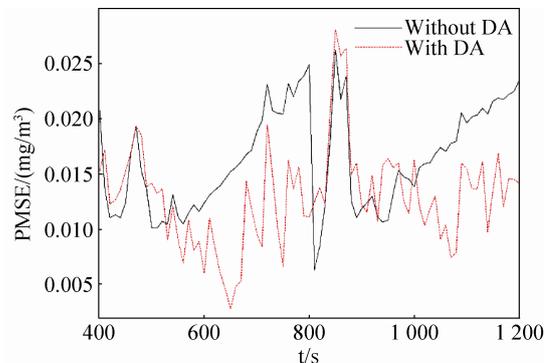


图 8 整个区域上浓度预测 RMSE 对比

Fig. 8 RMSE of forecast concentration distribution of whole region

5 结论

本文针对化工园区污染气体扩散的实时预测,提出了基于源项估计与数据同化的大气扩散数据驱动仿真。在该方法中,首先基于气体浓度观测数据,利用贝叶斯推理对排放源进行源项估计确定其位置与释放速率。将获得的源项参数作为高斯扩散模型的输入参数。为了提高大气扩散仿真的准确性,采用数据同化方法,利用粒子滤波将无人机气体监测系统获得的观测数据实时注入模型中实时校正系统状态。通过在某化工园区的源项估计实验以及基于数据同化的大气扩散仿真实验,初步验证了该方法的有效性。实验表明,基于本文提出的方法能够有效提高大气扩散仿真的预测准确度,为后续的应急管理提供有力的数据支撑。

参考文献:

- [1] Rao S K. Source estimation methods for atmospheric dispersion [J]. *Atmospheric Environment* (S1352-2310), 2007, 41(33): 6964-6973.
- [2] Kalman R E. A new approach to linear filtering and prediction problem [J]. *Journal of Basic Engineering Transactions* (S0098-2202), 1960, 82(1): 34-45.
- [3] Gordon N J, Salmond D J, Smith A F M. Novel approach to nonlinear/non-Gaussian Bayesian state estimation [J]. *IEE Proceedings F - Radar and Signal Processing* (S0956-375X), 1993, 140(2): 107-113.
- [4] Ma D, Wang S, Zhang Z. Hybrid algorithm of minimum relative entropy-particle swarm optimization with adjustment parameters for gas source term identification in atmosphere [J]. *Atmospheric Environment* (S1352-2310), 2014, 94(13): 637-646.
- [5] So W, Koo J, Shin D, et al. The Estimation of Hazardous Gas Release Rate Using Optical Sensor and Neural Network [J]. *Computer Aided Chemical Engineering* (S1570-7946), 2010, 28(1): 199-204.
- [6] Wang B, Chen B, Zhao J. The real-time estimation of hazardous gas dispersion by the integration of gas detectors, neural network and gas dispersion models [J]. *Journal of Hazardous Materials* (S0304-3894), 2015, 300(20): 433-442.
- [7] Xue H, Gu F, Hu X. Data assimilation using sequential Monte Carlo methods in wildfire spread simulation [J]. *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* (S1049-3301), 2012, 22(4): 1-25.
- [8] Long Y, Hu X. Dynamic data driven simulation with soft data [C]// *Proceedings of the Symposium on Theory of Modeling & Simulation - DEVS Integrative*. San Diego, USA: Society for Computer Simulation International, 2014: 1-8.
- [9] Jazwinski A. *Stochastic Processes and Filtering Theory* [M]. USA: Academic Press, 1970.
- [10] Evensen G. The Ensemble Kalman Filter: theoretical formulation and practical implementation [J]. *Ocean Dynamics* (S1616-7228), 2003, 53(4): 343-367.
- [11] Krysta M, Bocquet M, Sportisse B, et al. Data assimilation for short-range dispersion of radionuclides: An application to wind tunnel data [J]. *Atmospheric Environment* (S1352-2310), 2006, 40(38): 7267-7279.
- [12] Zheng D Q, Leung J K C, Lee B Y, et al. Data assimilation in the atmospheric dispersion model for nuclear accident assessments [J]. *Atmospheric Environment* (S1352-2310), 2007, 41(11): 2438-2446.
- [13] Reddy K V U, Cheng Y, Singh T, et al. Data assimilation in variable dimension dispersion models using particle filters [C]// *International Conference on Information Fusion*. USA: IEEE, 2007: 1-8.
- [14] Yang H, Huang Y, Center S E. Evaluating Atmospheric Pollution of Chemical Plant Based on Unmanned Aircraft Vehicle (UAV) [J]. *Journal of Geo-Information Science* (S1560-8999), 2015, 17(10): 1269-1274.
- [15] Hirst B, Jonathan P, González Del Cueto F, et al. Locating and quantifying gas emission sources using remotely obtained concentration data [J]. *Atmospheric Environment* (S1352-2310), 2013, 74(11): 141-158.
- [16] Steven Hanna J C, Helge R Olesen. *Inianapolis Tracer Data and Meteorological Data* [M]. USA: National Environmental Research Institute, 2005.
- [17] Pasquill F. The Estimation of the Dispersion of Windborne Material [J]. *Australian Meteorological Magazine* (S0004-9743), 1961, 90(1): 33-49.
- [18] Turner D B. A Diffusion Model for an Urban Area [J]. *J. Appl. Meteor* (S0021-8952), 1964, 3(1): 83-91.
- [19] Briggs G A. *Diffusion estimation for small emissions. Preliminary report* [R]. USA: Environmentalences, 1973.
- [20] Vogt K J. Empirical investigations of the diffusion of waste air plumes in the atmosphere [J]. *Nucl. Technol* (S7800-4355), 1977, 34(1): 43-57.
- [21] Carrascal M D, Puigcerver M, Puig P. Sensitivity of Gaussian plume model to dispersion specifications [J]. *Theoretical and Applied Climatology* (S1434-4483), 1993, 48(2): 147-157.