II-249　水質予測モデルの検討

国立公害研究所　正員　福島武彦
正員　村岡浩爾

1．はじめに

最近、海域・湖沼・貯水池などを対象に、生物量などの項目を含めた水質予測モデルの適用及び解析が盛んに行なわれようとしている。この時、日野ら[※1]が行なっているような解の特性の明白化及びモデル全体としての精度を考慮に入れてのモデル化手法の検討といったことが重要な問題と考えられる。ここでは植物プランクトン，栄養塩を変数とした基本方程式を選び、解の定常時・非定常時の特性を明らかにするとともに、時間ステップ、諸係数の変化に対する各種計算スキームの安定性及び累積誤差の評価方法について論じる。

2．解の特性

対象領域全体を一つのボックスと考える完全混合槽モデルにおける生物・栄養塩濃度の変化を考える。増殖項には一般によく用いられるモノー型の式を用いると、水中栄養塩濃度 C (ppm)，植物プランクトン量 P (ppm) に対して次のような方程式が得られる。

$$dP/dt = \alpha_1 CP/(C+C_m) - \alpha_2 P + \beta(P_0 - P) \qquad (1)$$

$$dC/dt = \alpha_2(1-\alpha_4)\alpha_3 P - \alpha_1\alpha_3 CP/(C+C_m) + \beta(C_0 - C) + \gamma \qquad (2)$$

α_1；増殖速度係数 (day^{-1})，α_2；減衰速度係数 (day^{-1})，β；水塊の交換率 (day^{-1})，α_4；回帰係数，C_m；ミカエル定数 (ppm)，C_0；流入栄養塩濃度 (ppm)，P_0；流入プランクトン濃度，γ；流入以外の栄養塩供給量 (ppm/day)，α_3；栄養塩・プランクトンの換算率

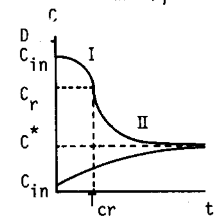
ここで湖沼などを対象に考えると $P_0 \ll P$，$0 \leq \alpha_4 \leq 1$，$\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, C_m > 0$ が条件となる。定常解又は非定常時の変化については代表的な係数の条件に対して、次のような特性を有することがわかる。(C_{in}，D_{in} は $t=0$ での初期濃度)

(i) $\beta \neq 0$；　$C_{sat} = (\alpha_2+\beta)C_m/(\alpha_1-\alpha_2-\beta)$ として $t\to\infty$ の定常濃度は．

$C_0 \geq C_{sat}$ (かつ $\alpha_1-\alpha_2-\beta \geq 0$) のとき　$C_{sat} = C_{sat}$，$P_{sat} = (\beta(C_0 - C_{sat}) + \gamma)/\alpha_3(\beta + \alpha_2\alpha_4)$　(3)

$C_0 < C_{sat}$ (or $\alpha_1-\alpha_2-\beta < 0$) のとき　$C_{sat} = (\beta C_0 + \gamma)/\beta$，$P_{sat} = 0$　(4)

図1．(Ⅱ)の解



(ii) $\beta=0$，$\alpha_4=0$，$\gamma=0$；($\alpha_1>\alpha_2$)

$D=\alpha_3 P + C$ (ボックス中の全栄養塩量) を用いて $D=$Const. より $dC/dt = (\alpha_1-\alpha_2)(D-C)(C^*-C)/(C+C_m)$　(5)

よって　$C_{in} \geq C^*$

$$\frac{(C-C^*)^{C_m+C^*}}{(D-C)^{C_m+D}} = \frac{(C_{in}-C^*)^{C_m+C^*}}{(D-C_{in})^{C_m+D}} e^{-(\alpha_1-\alpha_2)(D-C^*)t} \qquad (6)$$

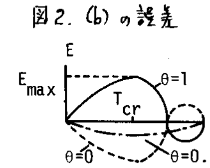
$C^* = C'_{sat} = \alpha_2 C_m/(\alpha_1-\alpha_2)$　($C_{in} < C^*$ の時も同様に、図1に)

(5) 式の変曲点は $d^2C/dt^2=0$ より．$C_{cr} = -C_m + \sqrt{C_m^2 + C_m(C^*+D) + C^*D}$　(7)

(iii) $\beta=0$，$\gamma=0$，$0<\alpha_4\leq 1$

$\alpha_1 \geq \alpha_2$ かつ $C_{in} \geq C^*_{sat}$ のとき $C''_{sat} = \alpha_2 C_m(1-\alpha_4)/(\alpha_1-(1-\alpha_4)\alpha_2) < C^*$ (8)，$dP/dt = -\alpha_2\alpha_4 P$ (過渡状態で $dC/dt=0$)

図2．(6)の誤差



(iv) $\beta=0$，$\alpha_4=0$，$\gamma>0$；

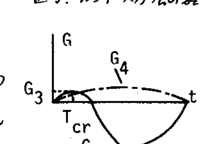
$dC/dt = (\gamma t + D_{in} - C)(\alpha_2 - \alpha_1 C/(C+C_m)) + \gamma$　(9) となり

$\alpha_1>\alpha_2$ のとき　$dC/dt=0$ の小さいほうの根に漸近する。

(v) $\alpha_1=\alpha_2=0$　($\beta\neq 0$)；

$C_{(t)} = C_0 + \gamma/\beta + (C_{in} - (C_0+\gamma/\beta))e^{-\beta t}$　(10)

図3．ルンゲ-クッタ法の誤差



以上の特解より、式(1),(2)の解の特性は $\alpha_1, \alpha_2(1-\alpha_4), \beta, \gamma/C_0$ の比率に支配されていることがわかる。このため実際のシミュレーション時の．諸係数に対する入力データの精度及び与え方も、解の特性に適合した形にすることが必要となる。

3．数値解の諸問題

生物反応を支配する(1)の解($C_{in} \geq C^*$)を対象に、①恒量の保存,②収束安定性,③累積誤差について、以下の差分方式を比較した。(a)ルンゲクッタ法　3次・4次（(1),(2)連立及び(5)に対して）,(b) $(C_{(t+\Delta t)}-C_{(t)})/\Delta t=(\alpha_1-\alpha_2)\theta(D-C_{(t)})(C^*-C_{(t)})/(C_{(t)}+C_m)+(1-\theta)(\alpha_1-\alpha_2)(D-C_{(t+\Delta t)})(C^*-C_{(t+\Delta t)})/(C_{(t+\Delta t)}+C_m)$,(c) $(C_{(t+\Delta t)}-C_{(t)})/\Delta t=(\alpha_1-\alpha_2)\theta(D-C_{(t)})(C^*-C_{(t)})/(C_{(t)}+C_m)+(1-\theta)(\alpha_1-\alpha_2)(D-C_{(t)})(C^*-C_{(t+\Delta t)})\times(C_{(t)}+C_m)^{-1}$,(d)(1),(2)式に対して(c)と同じく、増殖項分子のCについてのみθにより$t, t+\Delta t$に分配差分した方法。(以上 $0 \leq \theta \leq 1$)

①(a)～(d)すべて恒量を保存するスキームである。

②収束安定性； (b)－ $C_{(t+\Delta t)}=(T+S)C^*/(1+S)+(1-T)C_{(t)}/(1+S)$ (11), $T=\Delta t(\alpha_1-\alpha_2)\theta(D-C_{(t)})/(C_{(t)}+C_m)$, $S=\Delta t(\alpha_1-\alpha_2)(1-\theta)(D-C_{(t+\Delta t)})/(C_{(t+\Delta t)}+C_m)$ と変形でき、絶対収束の条件は $T<1.0$ (12) となり、$\theta=0$ の implicit法ではΔt任意で収束。 (c)－ $C_{(t+\Delta t)}=TC^*(1+(1-\theta)T)+(1-\theta T)C/(1+(1-\theta)T)$ (13) (b)と同様に $T<1.0$ (12)′ が条件となる。 (a)－伝播誤差の評価より、収束性を検討する。この議論は(b),(c)の$\theta=1$の場合に対しても成り立つ。一回のタイムステップによる誤差をε_i,$(i+1)$ステップでのトータルの誤差をE_{i+1}とすると $E_{i+1}=(1+f_c(c,t)\Delta t)E_i+\varepsilon_{i+1}$, $f=dc/dt$ (14)が得られる。この問題の場合にはf_cは $0<f_c<1$ $(C>C_{cr})$, $f_c \leq 0$ $(C \leq C_{cr})$ であるが、収束・発散が問題となるのは $C<C_{cr}$ の領域であることがわかる。この結果収束の条件は $|1+f_c\Delta t|<1$ となり $C \to C^*$ で $f_c=-(\alpha_1-\alpha_2)D/(C^*+C_m)$ より $\Delta t_2<2(C^*+C_m)/D(\alpha_1-\alpha_2)$ (15)となり、(12)を$C \to C^*$としたときの $\Delta t_1<(C^*+C_m)/D(\alpha_1-\alpha_2)$ に比べ係数が2倍異なるだけである。つまり $\Delta t_1<\Delta t<\Delta t_2$ の範囲では $C<C^*$ となりながらも $C \to C^*$ に収束することがわかる。 (d)－(c)と同じ。 以上の収束の条件を実際の数値計算結果と比較したものが表1.2である。(数値計算では0.05,0.1,0.2,0.5,1.0,2.0,5.0,10.0,20.0 dayと離散的にΔtを与えた。表2より1ランク大きいΔtでは発散したことを示す。)

③誤差の推定； 図1のI,IIの領域で(5)はそれぞれ $C_1(t) \approx D-(D-C_{in})e^{\gamma_1 t}$, $C_2(t) \approx C^*+(C_{cr}-C^*)e^{-\gamma_2(t-t_{cr})}$ $\gamma_1=(\alpha_1-\alpha_2)(D-C^*)/(C_m+D)$, $\gamma_2=(\alpha_1-\alpha_2)(D-C^*)/(C^*+C_m)$ (15)で近似される。 (b)－この誤差は一般的に考えられる $\gamma_1:\gamma_2=\mathrm{Order}(0.1)$程度では$C_{in} \gg C_{cr}$の時、領域Iでの誤差が領域IIでの誤差に比べ大きく、$t=t_{cr}$のときに累積誤差は最大となる。(図2) Δtが小さく累積誤差が各ステップの誤差の和で表現されるときには、nを$t=t_{cr}$までのステップ数として、$E_{\theta=0}=-E_{\theta=1}=\sum^{n} C_1''(t)\Delta t^2/2 \approx \gamma_1^2\Delta t^2 \times (2D-C_{in}-C_{cr})n/4 \propto \gamma_1^2\Delta t$ (16), $E_{\theta=0.5} \approx \sum^{n} C_1'''(t)\Delta t^3/12 \approx \gamma_1^3\Delta t^3(2D-C_{in}-C_{cr}) \times n/24$ (17) となる。 (a)－ルンゲクッタ法では累積誤差Gは図3のようになる。$G_3(t=t_{cr})=-\sum^{n} C_1^{(4)}(t)\Delta t^4/24 \approx \gamma_1^4\Delta t^4(2D-C_{in}-C_{cr})n/48 \propto \gamma_1^4\Delta t^3$ (18) , $G_3'=-\sum^{n'} C_2^{(4)}\Delta t^4/24 \approx -\gamma_2^4\Delta t^4\cdot \mathrm{Const}/(\Delta t\cdot\gamma_2) \propto -\gamma_2^3\Delta t^3$ (19), $G_4=-\sum^{n''} C_2^{(5)}(t)\Delta t^5/120 \approx \gamma_2^5\Delta t^5\,\mathrm{Const}/(\Delta t\cdot\gamma_2) \propto \gamma_2^4\Delta t^4$ (20) で表現される。Constの値は、γ_1,γ_2の通常の値に対して、ほぼ2×10^{-3}程度となる。(16)～(20)式(Theo.)と数値計算値(Cal.)を表1のCase1について比較したものが表3である。

①～③の結果を用いれば、シミュレーション時に目的・精度に見合ったスキームの選定及びΔt(場合によってはΔzも)の与え方がわかる。

表1. 係数値

	α_1	α_2	D	C_{in}	C^*	C_{cr}	γ_1	γ_2	Δt_1	Δt_2
Case1.	1.0	0.1	0.2	0.19	2.2×10^{-3}	0.050	0.81	8.0	0.12	0.25
Case2.	1.0	0.1	0.4	0.38	2.2×10^{-3}	0.077	0.85	16.1	0.06	0.12
Case3.	2.0	0.1	0.2	0.19	1.1×10^{-3}	0.048	1.72	18.0	0.53	0.11
Case4.	1.0	0.8	0.2	0.19	0.08	0.148	0.11	0.24	4.17	5.0

γ_1,γ_2 - day^{-1}　$\Delta t_1,\Delta t_2$ - day　C_m=0.02ppm

表2. 収束限界のΔt (数値計算結果)

	Case.1	Case.2	Case.3	Case.4
(a)	≦ 0.2	0.1	0.1	10.0
(b)θ=0.5	0.5	0.2	0.2	10.0
(b)(c)θ=1	0.2	0.1	0.1	5.0
(c)θ=0.5	0.5	0.2	0.2	10.0

表3. 誤差の比較 (単位 ppm)

	Δt=0.05		Δt=0.10	
Case.1	Cal.	Theo.	Cal.	Theo.
(b) θ=0.0	-5.6×10^{-3}	-4.6×10^{-3}	-1.1×10^{-2}	-9.1×10^{-3}
θ=0.5	-2.5×10^{-5}	-2.8×10^{-5}	-9.9×10^{-5}	-1.1×10^{-5}
θ=1.0	6.0×10^{-3}	4.6×10^{-3}	1.1×10^{-2}	9.1×10^{-3}
(a) G_3	8.0×10^{-7}	6.4×10^{-7}	6.2×10^{-6}	5.2×10^{-6}
G_3'	-5.2×10^{-6}	-5.4×10^{-6}	-4.4×10^{-5}	-4.3×10^{-5}
G_4	4.0×10^{-7}	4.0×10^{-7}	7.1×10^{-6}	6.8×10^{-6}

[参考文献]

*1. 日野幹雄；土木学会論文報告集 No.286号