

金沢大学 工学部 学生会員 宍戸 丈暢

金沢大学 工学部 正会員 関 平和

1. はじめに

土壌内物質移動現象を解析する際に従来用いられる決定論的モデルでは、厳密な解析を試みようとすると、必然的にそのモデルは複雑となり実際への適用範囲も狭まる。また、土壌での物理的性質の不均一性を考慮することができず予測値と現実との間に差異が生じる。そこで視点を変えて、現象を確率的に考え、そのランダム性を考慮することが可能なモデルを作成すれば予測値の精度も向上するものと思われる。

本稿では、土壌内溶質移動の基礎となる拡散現象について、確率過程論に基づくモデルの作成とその数値解析を行った結果について述べる。

2. 確率論的モデル化

2-1 マスター方程式

着目物質の拡散領域を Fig.1 のように $N+2$ 個のセル(0, $N+1$ は境界に相当)に分割して考えると、一次元拡散現象のマスター方程式は次のような形で表される。

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} = & d[(x_0 + 1)P(x_0 + 1, x_1 - 1) + (x_{N+1} + 1)P(x_N - 1, x_{N+1} + 1) - (x_0 + x_{N+1})P \\ & + \sum_{i=1}^N (x_i + 1)\{P(x_i + 1, x_{i+1} - 1) + P(x_{i-1} - 1, x_i + 1)\} - 2 \sum_{i=1}^N x_i P] \quad \dots\dots\dots(1) \end{aligned}$$

式(1)中の P は、任意の時間 t において、各セルの粒子が、 $(x_0, x_1, \dots, x_{N+1})$ 個である確率を表し、 d は 任意のセル内において、1 粒子の発生(隣接セル内での 1 粒子の消滅を伴う)が単位時間内に 1 回起こる確率を表す。式(1)を直接的に解くことは、非常に困難である。そこで、ここでは離散型方程式であるマスター方程式より連続型である Fokker-Planck 方程式に変換する。

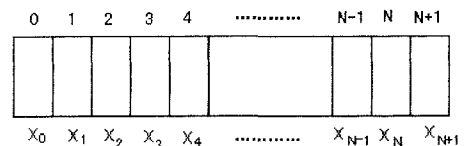


Fig.1 拡散領域のセル分割

2-2 Fokker-Planck 方程式

一次元拡散現象の Fokker-Planck 方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \int_0^t dx \left\{ -\frac{\delta}{\delta C} \left(D \frac{d^2 C}{dx^2} f \right) + \frac{\varepsilon}{2} \frac{\delta^2}{\delta C^2} \left(D \frac{d^2 C}{dx^2} f \right) \right\} \quad \dots\dots\dots(2)$$

式(2)を数値的に解くために変形していくと次式のようになる。

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial C} \{U(t)f_n\} = \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial^2}{\partial C^2} \{E(t)f_n\} \quad \dots\dots\dots(3)$$

確率論的モデル、溶質拡散、土壌

連絡先(〒920-8667 金沢市小立野 2-40-20・tel.076-234-4640・fax076-234-4644)

(3)式は各セルごとの確率の時間的変化を表したものであり、一次元の移流、拡散方程式と同形であることが分かる。また、 $U(t)$ 、 $E(t)$ は、各セルごとで決定論より求められる平均濃度の時間的変化の形で表され、 ε は確率過程の起こる単位、濃度幅を表し実験的に決められる定数である。

3. 数値解析結果

(3)式を数値的に解くに際し、次のような境界条件、初期条件を用いた。

$$f = \frac{1}{2\Delta C} \quad t=0, C=0$$

$$f=0 \quad t=0, C>0$$

$$U(t)f_n - E(t)\frac{\partial f_n}{\partial C} = 0 \quad t>0, C=0$$

$C \rightarrow \infty$ における境界条件については、適当な濃度 C において $f_n = 0$ とし、ここでは、 $C=0.5$ で $f=0$ とした。また、初期濃度 $C_0 = 0.1[\text{kg}/\text{m}^3]$ 、溶質拡散係数 $\nu = 10^{-3}[\text{m}^2/\text{s}]$ 、 $\Delta C = 0.0025[\text{kg}/\text{m}^3]$ 濃度幅 $\varepsilon = 0.01[\text{kg}/\text{m}^3]$ とした。

Fig.2 は無限長さを持つ拡散領域内で、 $t=0$ で濃度 C_0 の物質が $t>0$ においても $x=0$ の地点で連続的に投与されたと考えたとき、一時間後の確率密度の場所的分布を表している。Fig.3 では密度分布より求めた期待値 $E(C)$ と標準偏差 σ についてその場所的変化を示す。

両方の図より、 $x=0$ に近い点では、濃度が期待値である確率が低く $x=0$ から遠い点では期待値への集中度が高いということが分かる。これは、拡散が進行した点では、確率の拡散も進行し、濃度が期待値の値をとる確率が非常に低くなるということの意味

する。例えば $x=0.02\text{m}$ の地点を見ると、期待値は $0.070[\text{kg}/\text{m}^3]$ であるが、その $\pm 0.01[\text{kg}/\text{m}^3]$ の間の濃度になる確率は、35.6%程度である。つまりその範囲以外の濃度となる確率が 64.4%あるということである。また、 $x=0.08\text{m}$ の地点を見ると期待値は、 $0.011[\text{kg}/\text{m}^3]$ であるが、その $\pm 0.01[\text{kg}/\text{m}^3]$ の範囲の濃度になる確率は、98.1%と高い値となる。

4. まとめ

本稿では、一次元拡散現象の確率論的モデルを作成し、その解析結果の一例を示した。この結果より、拡散現象は進行するに伴い現象に作用する確率的な要素が大きくなるということが分かった。従って、決定論的なモデルでは、現象進行とともに予測精度が下がるのではないかとと思われる。しかし、確率論的にモデル化することにより、現象が持つランダム性について考慮し解析することが可能である。

実際の土壌内溶質移動に関与する現象は拡散だけではなく、移流、反応等も関わることから、移流-拡散系モデル、移流-拡散-反応系モデルについても同様なモデル化を行い、更に二次元、三次元モデルに拡張していけば、本方法は土壌汚染等の予測に役立つものと思われる。

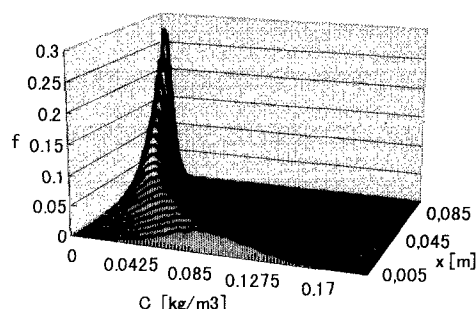


Fig.2 確率密度分布の場所的変化 (t=1hr)

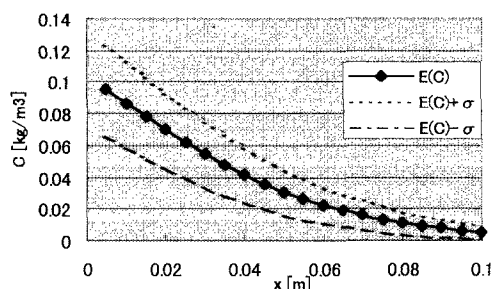


Fig.3 期待値、期待値±標準偏差の場所的変化 (t=1hr)