

化学物質の運命予測モデルのパラメータの評価

岐阜大学大学院	学生員	○堀 博
岐阜県庁	正 員	大坪和裕
岐阜大学工学部	正 員	東海明宏
岐阜大学流域環境研究センター	正 員	湯浅 晶

1. はじめに

農業に起因する水質汚染の対策評価には、実測やモデルによる環境運命の予測が行われている。しかし、観測値は特定の場所での限られた個数の値であり、モデルの検証という観点からの測定は少ない。従ってモデルの評価という面では問題を残している。本研究ではボックスモデルに基づいた農業流出モデルを取り上げ、分解、吸着等のパラメータの評価を行う。過去の研究に報告されているパラメータ値は実環境とは異なる条件で求められており、それらを集計すると広い範囲に分布する。そこで本研究では、パラメータ値の最小値から最大値を一樣な確率分布としてモデルに入力し、ベイズ確率理論を用い、パラメータの確率分布を更新することで得られる不確実性逓減の効果を評価する。

2. 方法

2.1 研究の流れ

以下のフローチャート(図1)に従って解析する。

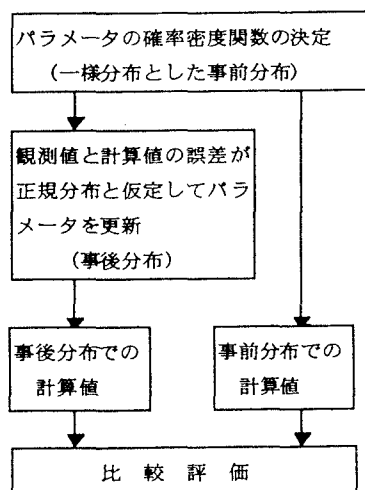


図1 研究の流れ

2.2 ベイズの定理によるパラメータ更新¹⁾

各パラメータの文献値を整理し、最小値から最大値を一樣確率分布と仮定し、事前分布とする。各々のパラメータを用いて得られる計算値とそれに対応する観測値から、ベイズの定理によってパラメータの更新をする。

ベイズの定理は(2.1)式で示される。

$$P(\theta|X) = \frac{P(X|\theta) \cdot P(\theta)}{P(X)} \quad (2.1)$$

θ : モデルのパラメータ

X : 観測値

$P(\theta | X)$: 観測値 X が与えられたときの θ の事後確率

$P(\theta)$: θ の事前確率

$P(X | \theta)$: パラメータを θ としたときの特定の結果が得られる条件付き確率

$P(X)$: 観測値 X の生じる確率

次に、(2.1)式を全確率の定理で展開すると(2.2)式で示される。

$$P(\theta|X) = \frac{L(X|\theta) \cdot P(X)}{\sum_{j=1}^m L(X|\theta_j) \cdot P(X)} \quad (2.2)$$

θ_j : θ の範囲を m 個に分割した時の j 番目の値

ここで、尤度関数 $L(\theta_j | X)$ は、観測値とモデルの計算値の誤差が正規分布と仮定すると、(2.3)式で示される。(2.2)式、(2.3)式を用いて、パラメータの事後分布を求める。

$$L(X|\theta) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^n \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{X_i - u}{\sigma} \right)^2 \right\} \quad (2.3)$$

X_i : i 番目の観測値

u : 計算値

σ : 観測値と計算値の誤差の分散

2.3 農薬流出モデル²⁾

水田を水田水と水田土壌とにわけ、水コンパートメント、土壌コンパートメントとして、水田に散布された農薬の物質収支式を立てる(図2)。

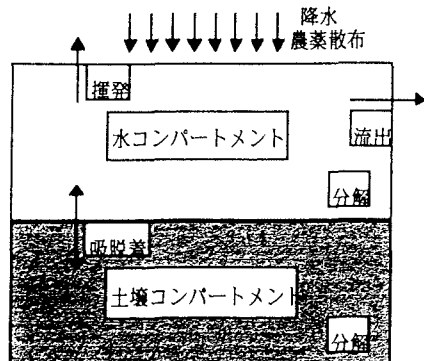


図2 モデルの概念図

(水コンパートメント)

$$Aw \cdot hw \frac{dCw}{dt} = P(t) \cdot Aw - q(t) \cdot Aw \cdot Cw - Kw \cdot Aw \cdot hw \cdot Cw - Kwa \cdot Aw \cdot hw \cdot Cw + Ksw \cdot Aw \cdot hs \cdot \gamma s \cdot Cs - Kws \cdot Aw \cdot hw \cdot Cw \quad (3.1)$$

(土壌コンパートメント)

$$Aw \cdot hs \cdot \gamma s \frac{dCs}{dt} = -Ks \cdot Aw \cdot hs \cdot Cs - Ksw \cdot Aw \cdot \gamma s \cdot hs \cdot Cs + Kws \cdot Aw \cdot hw \cdot Cw \quad (3.2)$$

(水収支)

$$\frac{dAw \cdot hw}{dt} = Aw \{ r(t) - q(t-1) \} \quad (3.3)$$

Cw : 水コンパートメント中の農薬濃度 (mg/m³)

Ca : 土壌コンパートメント中の農薬濃度 (mg/m³)

Aw : 対象流域の水田面積(m²)

hw : 湛水深(m)

hs : 水田土壌有効吸着厚さ(m)

t : 時間(day)

$r(t)$: 降水量(m/day)

$P(t)$: 水田面積当りの農薬散布速度(mg/m²·day)

$q(t)$: 単位面積当りの流出流量(m/day)

Kw : 水中総括分解速度定数(1/day)

Ks : 土壌中総括分解速度定数(1/day)

Kwa : 水から大気への揮発速度定数(1/day)

Kws : 水から土壌への吸着速度定数(1/day)

Ksw : 土壌から水への吸着速度定数(1/day)

γs : 土壌密度(t/m³)

3. 事例適用

3.1 対象流域

農薬濃度の流出観測データとしては、1979年の神奈川県渋田川流域で測定された値を用いた。当時の流域面積は約27.6km²、水田面積は約7.0km²であった。対象物質としてCNP、ベンチオカーブ、シメトリンを取り上げる。観測値は6月8日から50日間にわたって約2週間に1度の頻度で観測された値を用いた。

3.2 計算方法

各々のパラメータを最小値から最大値まで5分割し、それぞれの組み合わせの場合で農薬水中濃度を求めた。その後、計算値と対応する観測値から、パラメータの更新をした。また、パラメータの組み合わせによって、現実には起こり得ない場合もあるため、その組み合わせによる計算値は棄却した。図-3は計算結果の1例である。

3物質についてパラメータの更新結果と、それを用いた長期間の流出解析結果について考察する。

詳細は講演時に述べる。

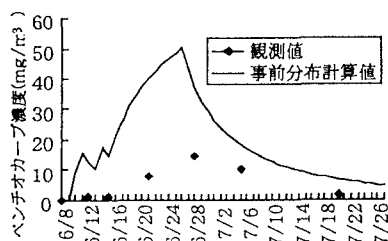


図3 事前分布を用いた場合の計算値と観測値

4. 参考文献

- David W. Dilks, Raymond P. Canale and Peter G. meier: Development of Bayesian Monte Calro techniques for water quality model uncertainty, Ecological Modeling. 62 pp.149-162 (1992)
- 大坪和裕: 化学物質の環境運命モデルにおけるパラメータの不確実性分析～水田施用農薬を例にして～, 岐阜大学大学院修士論文 (1994)
- 飯塚宏栄, 岩無才次郎: 水田除草剤の河川への流出, 用水と廃水(24), 6, pp.13-19 (1982)