

(2) フロック形成過程のマルコフモデルの提案

日立製作所 ○馬場 研二
北海道大学工学部 堀田 和之

1. はじめに

上水処理システムにおけるフロック形成池は懸濁質の負荷を後続の沈殿池と炉過池とに配分する役割をもつことが指摘されている。¹⁾ 上水処理システムを積極的に運転、制御しようとする立場に立つならばフロック形成過程の実用的なモデルが重要になる。特に沈殿池と炉過池との処理性を評価する為には、フロック形成池出口でのフロック粒径分布が必要である。しかしフロック形成過程のモデル化は容易ではない。なぜならフロック形成過程は衝突合一によりフロックを成長させると同時にフロッキュレータ内乱流場のせん断力により成長したフロックの破壊をも伴う複雑な動的過程だからである。

フロック形成過程のモデルは従来微視的考察に基づいて定式化されてきた。特にフロック成長過程については多くの研究の蓄積がありまた多くの成果を上げてきた。しかしフロックの破壊過程については最近フロックの物性に関する研究が進んできたものの理論的にはまだ確立していないのが現状であろう。

さて、破壊を考慮しない場合のフロック形成過程の一般式は次式で表せる。

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} n_j n_{i-j} - \sum_{j=1}^{\infty} K_{ij} n_i n_j \quad (1)$$

ここで n_i : 個数濃度, K_{ij} : 反応速度係数

上式は i) 次元数の極めて高い非線形連立常微分方程式になり数値計算は容易ではない。ii) フロックの破壊を考慮していない為自平衡分布を保証できない。(自平衡分布とは初期分布に依存しない定常分布のことをいう。) 以上2点の困難がある。そこで本論文ではモデルの精度は多少犠牲にしても巨視的かつ実用的にみればフロック形成過程を充分表現しうる簡単なモデルを提案する。さらにある水質条件の下で攪拌強度を変えて回分実験を行いモデルの妥当性を検討し、加えて変数の物理的意味について考察する。

2. フロック形成過程のマルコフモデル

2-1. 定義 マルコフモデルで用いる主な記号を定義する。

1) S_i : 「状態 i 」といい i 番目の粒径の幅 $[d_i, d_{i+1})$ にあるフロックの集合。また S_i の全体の集合 $S = [S_1, S_2, \dots, S_n]$ を状態空間という。

2) $f_i(t)$: 時刻 t での S_i の生起確率(状態確率ともいう)。生起確率として重量分率が対応する。ここで次式が成り立つ。

$$0 \leq f_i(t) \leq 1, \quad i = 1 \sim n \quad (2)$$

3) $f(t) = [f_1(t), f_2(t), \dots, f_n(t)]$: 粒径分布ベクトル(確率分布ベクトルともいう)。ここで次式が成り立つ。

$$\sum_{i=1}^n f_i(t) = 1 \quad (3)$$

4) P_{ij} : 遷移確率。つまり S_i に属するブロックが S_j に属するブロックになる確率である。ここで次式が成り立つ。

$$0 \leq P_{ij} \leq 1 \quad , \quad i, j = 1 \sim n \quad (4)$$

$$\sum_{j=1}^n P_{ij} = 1 \quad , \quad i = 1 \sim n \quad (5)$$

$$5) \quad P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1n} \\ P_{21} & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ P_{n1} & \cdots & \cdots & P_{nn} \end{bmatrix}$$

: 遷移行列

(6)

ここで P_{ij} は次のような物理的意味をもつ。

$$P_{ij} \begin{cases} i < j : \text{ブロックが成長する確率。} \\ i = j : S_i \text{ にとどまる確率。} \\ i > j : \text{ブロックが破壊する確率。} \end{cases}$$

2-2 仮定 遷移確率 P_{ij} が存在すると仮定する。ただしその場合次の仮定が暗黙のうちに述べられている。定常性の仮定、つまり P_{ij} が時間に依存しないという仮定である。この仮定をおいた理由は i) フロック形成過程の自平衡分布の存在がマルコフ連鎖の理論により保証される。ii) 数値計算が極めて容易である。iii) P_{ij} の物理的意味が明白である。以上3点である。

2-3. マルコフモデル h を時間幅とすると 2-1, 2 よりフロック形成過程はマルコフ連鎖として次式のごとく表せる。 $f(0)$ を初期分布とすると、

$$f(h) = f(0) P \quad (7)$$

$$f(2h) = f(h) P = f(0) P^2 \quad (8)$$

$\vdots$

$$f(kh) = f((k-1)h) P = f(0) P^k \quad (9)$$

$\vdots$

$$f_{s.p.D.} = \lim_{k \rightarrow \infty} f(0) P^k \quad (10)$$

ここで $f_{s.p.D.}$ は自平衡分布 (Self-Preserving Distribution) である。粒径分布の遷移過程をこのように粒径分布ベクトルと遷移行列とを用いて表現するモデルを「マルコフモデル」と呼ぶことにしよう。ここで(9)式は次のごとく書き直してもわかり易い。

$$\begin{aligned} f_j(kh) = & f_1((k-1)h) P_{1j} \\ & + f_2((k-1)h) P_{2j} \\ & + \cdots \\ & + f_n((k-1)h) P_{nj} \end{aligned} \quad (11)$$

この式の意味図を図-1に示す。

マルコフモデルはこのように初期分布 $f(0)$ と遷移行列 P とが既知ならば $f(0)$ の遷移過程を簡単に記述、計算することができる。ここで遷移行列 P はその物理的意味を考えれば粒径分布変換行列と呼ぶ方がふさわしい。また遷移行列は粒径分布の遷移過程のすべての情報を含んでいる。つまり遷移行列は分散媒の流動状態及びフロックの輸送、衝突、合一、破壊のメカニズムを反映しているはずである。従って遷移確率 P_{ij} はそれらを考慮して定式化されるべきである。しかし本論文の目的は P_{ij} を理論的に定式化するこ

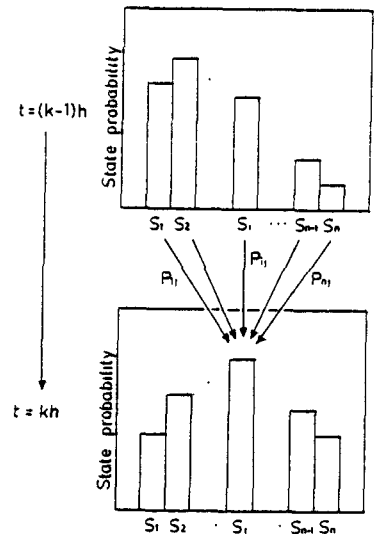


図-1 粒径分布の遷移過程

とにあるのではない。その前段階としてまず P_{ij} が存在すること、つまりフロック形成過程がマルコフ連鎖で表しうることを実験的に検討することにある。

3. 実験

3-1. 実験装置 実験に用いたフロック形成池は3槽直列の水平軸パドル型である。形状は幅1.6 m、長さ2.1 m（1槽が0.7 m）、高さ0.85 mである。有効容量は2.35 m³である。パドル回転数は10, 6, 4 r.p.m. で各槽を遮断して回分実験を行った。尚パドル形状は3槽とも同じである。

3-2. 実験条件 原水として札幌市水を使用した。水温は4℃である。注薬量はカオリン20 ppm、硫酸バンド18.5 ppm、NaOH 1.2 ppmである。

3-3. 実験方法 所定の注薬量で急速混和した原水をフロック形成池に満す。次にフロッキュレータパドルを回しはじめ30秒後に $t=0$ のサンプリングを行った。以後8分毎に30分間サンプリングを行った。ただしパドル回転数10, 6, 4 r.p.m. について各々同時にサンプリングした。すべてのサンプルについて顕微鏡撮影を行い、6分以後はオートペローズによる接写撮影も行った。粒径測定時の分級は顕微鏡写真では5 μ毎に、また接写写真では25 μ毎に行った。粒径の測定法、フロック重量分率の計算法等は丹保、渡辺の方法²⁾に準拠した。

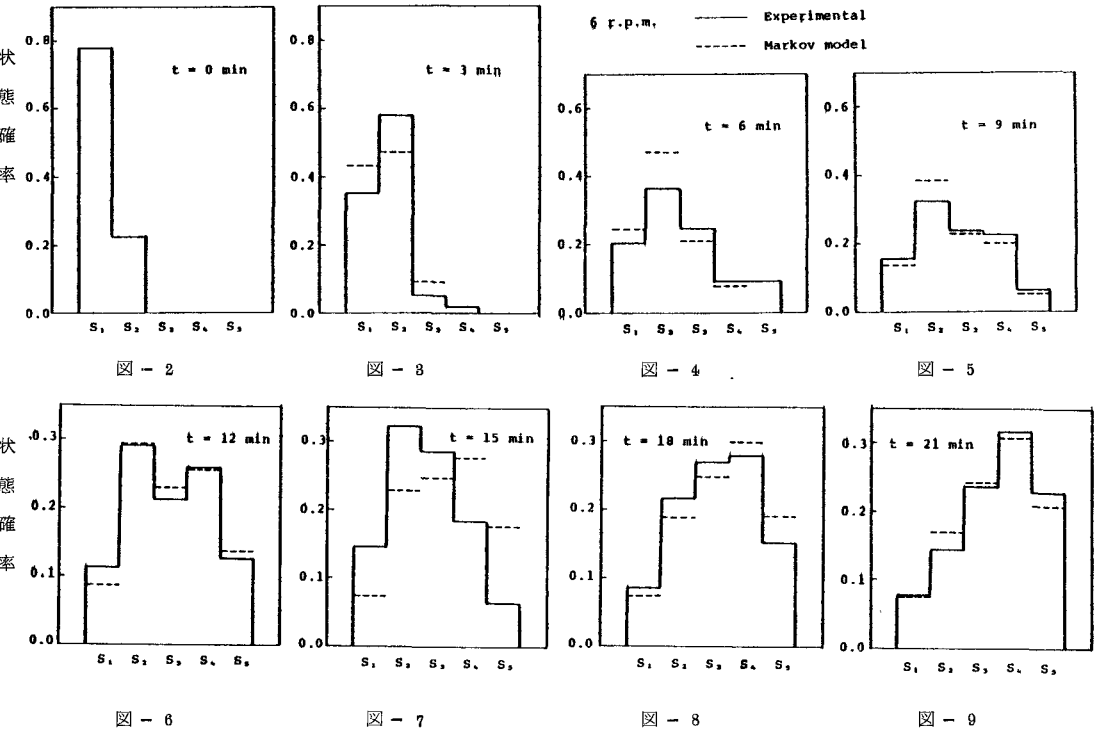
3-4. 実験結果 2-1(1)で定義した S_i を便宜上表-1のごとく設定した。このように状態空間を粗く分割することによって粒径分布測定時の誤差をある程度小さくすることができたと考える。表-1に従って整理した実験結果の1例として回転数6 r.p.m. の場合を図-2～図-12に実線部で示す。

表-1 S_i の設定

state	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5
floc size [μ]	0-25	25-75	75-150	150-250	250-

4. 遷移行列の推定

4-1. 遷移行列の構造 フロック形成過程において実際に様々な粒径のフロックすなわち $S_1 \sim S_5$ が共存している状態ではフロック同志の相



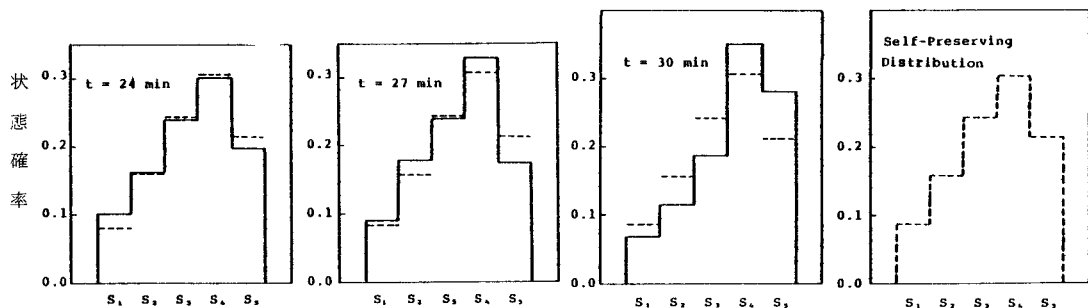


図 - 10

図 - 11

図 - 12

図 - 13

相互作用つまり衝突、合一、破壊が起っているものと思われる。従って微視的に見れば P はすべての要素をもっている。しかしブロックの破壊理論がまだ充分確立していない現段階では微視的考察を進めるには限界がある。そこで本論文ではマルコフモデルをとりあえずブラックボックスモデルとして取り扱うことにする。従っていたずらに変数 P_{ij} を導入するよりは必要最小限の変数と構造とにより現象を説明する立場を採る。そこで実験結果の視察により遷移行列 P を図-14のように仮定する。この時のシャノン線図は図-15である。粒径が徐々に成長していく場合のもっとも簡単な構造が図-15の実線部で示されており、破壊が S_5 より起るとした場合の構造が破線部で示されている。

4-2. 遷移行列の推定手法 4-1で仮定した P をパターン探索法³⁾を用いて求めた。ただし不等号制約条件のある場合にも探索可能なように修正して使用した。評価関数 J は次式を用いた。

$$J = - \sum_{k=1}^m \mathbf{e}_k^T \mathbf{e}_k \quad (12)$$

ここで m はサンプリング回数である。ただし初期分布のサンプリングは数えない。ここで

$$\mathbf{e}_k = \mathbf{f}(k, h) - \hat{\mathbf{f}}(k, h) \quad (13)$$

$$\hat{\mathbf{f}}(k, h) = \mathbf{f}(0) P^k \quad (14)$$

実験では3分毎にサンプリングを行ったので P は $h=3$ 分の遷移行列である。ここで不等号制約条件は(4)式に相当する。また図-14では変数は13個あるが(5)式の制約条件が5つあるので変数は8個となる。つまり8変数のパターン探索を行えばよい。

4-3. 推定結果 4-2の手法で推定した遷移行列を各回転数について表-2に示す。

$$P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P_{22} & P_{23} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P_{33} & P_{34} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{44} & P_{45} \\ P_{51} & P_{52} & P_{53} & P_{54} & P_{55} \end{bmatrix}$$

図 - 14 遷移行列

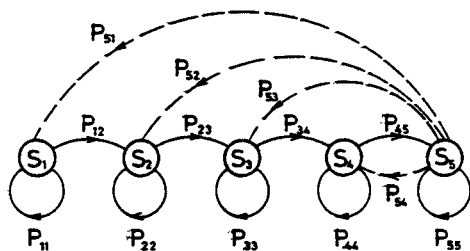


図 - 15 シャノン線図

5. 考察

5-1. 実験結果と推定結果との比較 推定された遷移行

列を用い2-3に従って粒径分布ベクトルの遷移過程を計算したところ回転数6 r. p. m. については図-2～図-12に示す破線部のごとくになった。実験値との適合性は良好で少なくとも1つの近似遷移行列が存在することがわかる。バドル回転数10, 4 r. p. m. についても適合性は良好である。4-1では遷移行列の構造に大胆な仮定をおき、また簡単な構造を考えたと推定した遷移行列で実験値を充分説明しうる。図-13に示す自平衡分布は(10)式に基づいて計算した。図-2～図-12を見ると $t=21$ 分ですでに自平衡分布に近づいていることがわかる。

5-2. 遷移行列の固有値と遷移の時定数 フロック形成過程において S_i は相互到達可能であり従って

既約である。また自平衡分布(定常分布)をもち周期的ではないからエルゴード的マルコフ連鎖である。マルコフ連鎖がエルゴード的ならば遷移行列は必ず固有値1を単根としてもち、その他の固有値は $|\lambda| < 1$ である。⁴⁾ さらに自平衡分布への漸近的性質は $|\lambda|$ が2番目に大きい λ が決定する。この時の遷移の速さを時定数 T として表すと、

$$e^{-\frac{t+h}{T}} = |\lambda_2| e^{-\frac{t}{T}} \quad (15)$$

$$\therefore T = -h / \ln |\lambda_2| \quad (16)$$

となる。つまり $|\lambda_2|$ と T とが小さい程自平衡分布へ速く漸近することがわかる。各バドル回転数の G 値及び遷移行列の $|\lambda_2|$, T を表-3に示す。表-3よりわかるように G 値が大きい程 $|\lambda_2|$ と T とが小さい。また図-2~図-12と比較すると $t=3T$ 位ですでに自平衡分布に近くなっていることがわかる。10, 4 r. p. m. についても同様であった。以上のように $|\lambda_2|$ と T とはフロック形成過程における粒径分布の遷移速度を表す指標になりうることをわかる。

5-3. フロックスの成長特性 表-2の各回転数について対角項 P_{11} , P_{22} を見ると回転数が増す程小さくなるつまりフロックスの成長が速い。 P_{44} を見ると回転数が増す程 P_{44} が大きい。つまり S_5 に成長しにくいことを表している。以上はフロック成長の定性的傾向を示している。

5-4. フロックスの破壊特性 図-16に各回転数について $P_{51} \sim P_{55}$ を示す。この図は S_5 が $S_1 \sim S_4$ にどのような確率で破壊するのかわかるフロックスの破壊特性を表している。この図には次のような定性的解釈が可能である。4 r. p. m. については攪拌強度が比較的弱い為 S_5 は微フロックス S_1 を剝離させて S_4 へ遷移すると推察される。次に6

r. p. m. と10 r. p. m. とを見ると P_{55} と P_{54} とはほとんど0である。つまりこのことは S_4 , S_5 に成長したフロックスは3分後には $S_1 \sim S_3$ にほとんど破壊してしまうと解釈できる。特に S_3 が卓越していることから10 r. p. m. と6 r. p. m. とにおけるフロックスは乱流渦のせん断力によって分裂していると思われる。また P_{51} において10 r. p. m. が一番小さいのは10 r. p. m. の場合 S_1 が S_5 の破壊によって生じてすぐ S_2 に成長してしまう為3分という時間間隔では P_{51} は小さく見えるものと推察される。

6. おわりに

表-2 推定した遷移行列

$$10 \text{ r.p.m. ; } P = \begin{bmatrix} 0.42 & 0.58 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.35 & 0.65 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.48 & 0.52 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.51 & 0.49 \\ 0.05 & 0.35 & 0.60 & 0.00 & 0.00 \end{bmatrix}$$

$$6 \text{ r.p.m. ; } P = \begin{bmatrix} 0.56 & 0.44 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.59 & 0.41 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.16 & 0.84 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.32 & 0.68 \\ 0.18 & 0.13 & 0.65 & 0.02 & 0.02 \end{bmatrix}$$

$$4 \text{ r.p.m. ; } P = \begin{bmatrix} 0.68 & 0.32 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.65 & 0.35 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.45 & 0.55 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.28 & 0.72 \\ 0.43 & 0.08 & 0.04 & 0.37 & 0.08 \end{bmatrix}$$

表-3 遷移速度を表す特性量

回転数(r.p.m.)	10	6	4
G (1/sec)	53.1	24.6	13.5
$ \lambda_2 $ (-)	0.49	0.63	0.72
T (min)	4.2	6.5	9.1

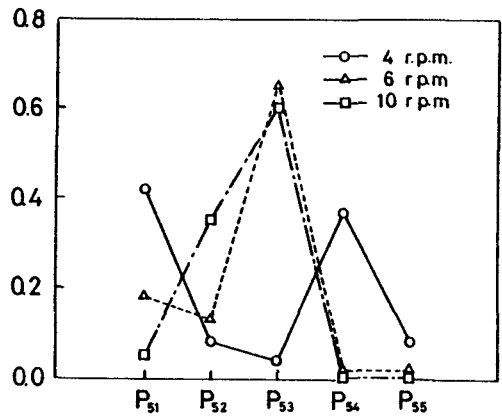


図-16 フロックスの破壊特性

i) 微視的考察に基づいた従来のモデルにかわる実用的なモデルの1つとしてマルコフモデルを提案した。マルコフモデルには①自平衡分布が保証される。②数値計算が極めて容易である。③フロックの破壊をも表現することができる。以上3点の長所がある。

ii) ある与条件の下で回分実験を行いマルコフモデルで粒径分布の遷移パターンを定量的に表現しうること、つまり近似遷移行列が存在することを明らかにした。

iii) $|\lambda_s|$ と遷移の時定数 T とは粒径分布が自平衡分布へ近づく速さつまり遷移速度を表す指標となることを明らかにした。そして $t=3T$ 位で自平衡分布に近くなることが明らかになった。

本論文ではマルコフモデルをブラックボックスとして取り扱い P を実験値から推定したが、実際には P は理論的に決定することが望ましい。つまり攪拌強度と水質条件との関数として P を定式化することが期待される。この定式化の為に様々な実験条件の下で多くの実験を行うことが必要である。実際の上水処理システムの運転上必要な程度で、また理論的にせよ実験的にせよ何らかの方法で、もし P を同定することができればマルコフモデルは上水処理システムの設計や運転に、ひいてはオンライン制御に応用できる可能性が生じてくるであろう。

最後に実験に際し、いろいろと御協力及び助言を頂いた北海道大学衛生工学科上水工学研究室の皆様にお礼申し上げる。

参考文献

- 1) 円保憲仁、渡辺義公；フロッキュレータの合理的設計（Ⅳ）、水道協会誌、454号、昭和47年
- 2) 同上（Ⅱ）、水道協会誌、441号、昭和46年
- 3) L. C. W, ディクソン著；非線形最適化計算法、P35、昭和49年、培風館
- 4) 北川敏男編；マルコフ過程、P4、昭和44年、共立出版