2005－DD－51（1）
2005／7／22

土中物質移動モデル構築のための支援システム

菊池　　貴† 　登尾　浩助†† 　片町健太郎† 　阿部　芳彦†

†

† 岩手県立大学ソフトウェア情報学部
020-0193 岩手県滝沢村巣子 152-52
†† 明治大学農学部, 214-8571 神奈川県川崎市多摩区東三田 1-1-1
E-mail: †g236c001@edu.soft.iwate-pu.ac.jp, ††noboriok@isc.meiji.ac.jp,
†††{katamati,yoshi}@soft.iwate-pu.ac.jp

あらまし　近年、土壌物理学の進展に伴い、土中の物質移動モデルの高度化が進んでいる。土中の物質移動は水分移動に大きく依存している事から水分移動が中心であるが、溶質や熱などの効果も取り入れた連成モデルについても研究が行われるようになっている。また、水分移動は従来から精度が得られ難い問題として知られている。

このような状況下で、新しいモデルについて検証を目指してシミュレーションを行う場合、「モデルの問題」と「数値精度の問題」を分離して考える必要がある。数値解法を行う場合、モデルの非線形性から陰解法が用いられる場合が多い。その際モデル自体も研究対象で固定できない、１つのモデル用に陰解法のための線形化に多大な労力が必要になり、かつ誤りを含む危険性が大きいという問題点がある。

本研究では、研究者がモデルを表す式を記述するだけで、数式処理の手法を取り入れて、自動的に線形化しシミュレーションを可能にするシステムを開発した。これによりモデルの改良、構築が容易になる。
キーワード　モデル構築、シミュレーション、差分法、陰解法

Support System for Construction of Transfer Model in Soil

Takashi KIKUCHI†, Kousuke NOBORIO††, Kentaro KATAMACHI†, and Yoshihiko ABE†

†

† Iwate Prefectural University, Sugo 152–52, Takizawa-mura, Iwate, 020–0193 Japan
†† Meiji University Higashi-mita 1–1–1, Tama-ku, Kawasaki-shi, Kanagawa, 214–8571 Japan
E-mail: †g236c001@edu.soft.iwate-pu.ac.jp, ††noboriok@isc.meiji.ac.jp,
†††{katamati,yoshi}@soft.iwate-pu.ac.jp

Abstract　Recently, the study of transfer model in soil advances with the progress in Soil Physics. Water transfer is dominant because it has a great effect on the other transfers. Numerical analysis of water transfer is difficult to get the solution with sufficient accuracy.

If a new model is simulated, should be deal with two problems separately "validity of model " and "accuracy of numerical solution". In this case, generally use implicit-method. However, the model is now in progress to improving. And, linearization for using implicit method need a large amount of labor and may be include some mistakes.

We developed the system that automatically linearize the equations to be solved, by only describing the formula of model.
Key words　Model Construction, Simulation, Finite Difference Method, Implicit Method

1. はじめに

近年、土壌物理学の進展により、土壌の基礎的な振る舞いのモデル化が行われている。[1] [2] 土中の物質移動では水分移動が他の物質の移動に最も影響を与える。さらに溶質や熱の移動も扱われている。従来はこれらを個別に扱う場合が多く、より高度なモデル化が進んでいる。また、相互への効果も取り入れた連成移動モデルについても研究が進められている。[3] [4] [5] [6]

連成モデルはその性質からパラメータも多く、式としても複雑なものになっている。

土壌中の水分移動はその非線形性から数値精度が得られ難い。このような状況下で新しいモデルを構築し、それらについて検証を目指してシミュレーションを行う場合、

- モデルの問題
- 数値精度の問題

という2つの問題を分離して考えなければならない。

一般に、陽解法を用いれば、土壌モデルだけの記述だけですむため、モデルの変更は容易であり、開発は短期間で行える。しかし、信頼できる解を得る観点からは、陰解法が望まれる。陰解法には線形化のプロセスが伴う。簡単なモデルであれば線形化の手間は問題にはならないが、複雑なモデルでは大きな問題になる。特に、モデルを簡易に書き変えられなければならない場合は、より重要である。

このように、モデル自体も研究対象であり固定できない上に、モデルを修正する毎に、線形化のために多大な労力が必要になるため、土壌物理モデル高度化の障害となっている。

本研究では、数式処理の手法を取り入れることで、扱いたいモデルを表す式を記述するだけで、陰解法を行い数値解を求めることを可能とするシステムを開発した。

2. 数値解法の流れ

2.1 物質移動モデルと定式化

土中の物質移動は多種多様なモデル化がなされているが、ここでは、最も先進的な水、溶質、熱の三連成のモデル [3] について示す。

三連成のモデルは体積含水率 θ_L、溶質濃度 C、温度 T を未知数として以下の方程式で表される。

a) 水移動の基礎方程式

$$\frac{\partial\rho_w(T)\theta_L}{\partial t}+\frac{\partial\rho_V(\theta_L,C,T)\theta_V(\theta_L)}{\partial t}$$
$$+\vec{\nabla}\cdot\vec{q}_w(\theta_L,C,T)=0 \tag{1}$$

$$q_w(\theta_L,C,T)=-D_{\theta\theta}(\theta_L,C,T)\vec{\nabla}\psi(\theta_L)$$
$$+D_{\theta C}(\theta_L,C,T)\vec{\nabla}C-D_{\theta T}(\theta_L,C,T)\vec{\nabla}T$$
$$+\vec{e}_z\rho_w(T)k(\theta_L)$$

b) 溶質移動の基礎方程式

$$\frac{\partial\rho_w(T)C\theta_L}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{q}_C(\theta_L,C,T)=0 \tag{2}$$

$$q_C(\theta_L,C,T)=\rho_w(T)\left[D_{C\theta}(\theta_L,C)\vec{\nabla}\psi(\theta_L)\right.$$
$$-D_{CC}(\theta_L,C,T)\vec{\nabla}C-D_{CT}(\theta_L,C)\vec{\nabla}T$$
$$\left.+\vec{q}_L(\theta_L,C,T)C\right]$$

c) 熱移動の基礎方程式

$$\frac{\partial H(\theta_L,C,T)}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{q}_H(\theta_L,C,T)=0 \tag{3}$$

$$q_H(\theta_L,C,T)=-\lambda(\theta_L)\vec{\nabla}T$$
$$+L_0\rho_V(\theta_L,C,T)\vec{q}_V(\theta_L,C,T)$$
$$+\left[c_p\rho_V(\theta_L,C,T)\vec{q}_V(\theta_L,C,T)\right.$$
$$\left.+c_L\rho_w(T)\vec{q}_L(\theta_L,C,T)\right](T-T_0)$$

本システムでは差分法を使い、Cranck-Nicolson スキームを用いる。

d) 水移動の差分方程式

$$F(\vec{\theta}_L^{n+1},\vec{C}^{n+1},\vec{T}^{n+1})$$
$$=\frac{\rho_{w\ j}^{n+1}\theta_{L\ j}^{n+1}-\rho_{w\ j}^{n}\theta_{L\ j}^{n}}{\Delta t}+\frac{\rho_{V\ j}^{n+1}\theta_{V\ j}^{n+1}-\rho_{V\ j}^{n}\theta_{V\ j}^{n}}{\Delta t}$$
$$+\frac{1}{\Delta z}\left(q_{wz\ j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}-q_{wz\ j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}\right)=0 \tag{4}$$

e) 溶質移動の差分方程式

$$G(\vec{\theta}_L^{n+1},\vec{C}^{n+1},\vec{T}^{n+1})$$
$$=\frac{\rho_{w\ j}^{n+1}C_j^{n+1}\theta_{L\ j}^{n+1}-\rho_{w\ j}^{n}C_j^{n}\theta_{L\ j}^{n}}{\Delta t}$$
$$+\frac{1}{\Delta z}\left(q_{cz\ j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}-q_{cz\ j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}\right)=0 \tag{5}$$

f) 熱移動の差分方程式

$$I(\vec{\theta}_L^{n+1},\vec{C}^{n+1},\vec{T}^{n+1})=$$
$$\frac{H_j^{n+1}-H_j^{n}}{\Delta t}+\frac{1}{\Delta z}\left(q_{Hz\ j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}-q_{Hz\ j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}\right)=0 \tag{6}$$

$$\vec{\theta_L}=\{\theta_{L\ 0},\theta_{L\ 1},\ldots,\theta_{L\ n}\}$$
$$\vec{C}=\{C_0,C_1,\ldots,C_n\}$$
$$\vec{T}=\{T_0,T_1,\ldots,T_n\}$$

これにより得られる差分方程式は連立の非線形方程式になるため、

$$\theta_L{}^{n+1}=\theta_L{}^{*}+\Delta\theta_L,$$
$$C^{n+1}=C^{*}+\Delta C,$$
$$T^{n+1}=T^{*}+\Delta T$$

と置き換え、線形化し連立一次方程式を得る。

それを解き

$$\theta_L^{*}\leftarrow\theta_L^{*}+\Delta\theta_L$$
$$C^{*}\leftarrow C^{*}+\Delta C$$
$$T^{*}\leftarrow T^{*}+\Delta T$$

と代入し再び連立一次方程式を解き収束するまで繰り返す。

2.2 SOR 法の適用

上述の連立一次方程式を解く際に、直接解法ではなく反復解法が有効である。もともと連立一次方程式の係数行列は、Newton 法における一時的なもので正確に解く必要は無く、反復により解の精度が向上していれば十分だと考えられる。そこで、連立一次方程式の反復解法で有効な SOR 法を適用する。また、その際には Newton 法の反復も同じ反復計算に含ませることで、計算量を削減する。

$\Delta\theta_{L\ j\pm1} = \Delta C_{j\pm1} = \Delta T_{j\pm1} = 0$ とすれば

$$\begin{aligned}
F(\theta_L^{n+1}, C^{n+1}, T^{n+1}) &\cong F(\theta_L^*, C^*, T^*) \\
&+F_\theta(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta\theta_L \\
&+F_C(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta C \\
&+F_T(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta T \\
G(\theta_L^{n+1}, C^{n+1}, T^{n+1}) &\cong G(\theta_L^*, C^*, T^*) \\
&+G_\theta(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta\theta_L \\
&+G_C(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta C \\
&+G_T(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta T \\
I(\theta_L^{n+1}, C^{n+1}, T^{n+1}) &\cong I(\theta_L^*, C^*, T^*) \\
&+I_\theta(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta\theta_L \\
&+I_C(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta C \\
&+I_T(\theta_L^*, C^*, T^*)\Delta T
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_\theta &= \frac{\partial F}{\partial \theta_L}, \quad F_C = \frac{\partial F}{\partial C}, \quad F_T = \frac{\partial F}{\partial T} \\
G_\theta &= \frac{\partial G}{\partial \theta_L}, \quad G_C = \frac{\partial G}{\partial C}, \quad G_T = \frac{\partial G}{\partial T} \\
I_\theta &= \frac{\partial I}{\partial \theta_L}, \quad I_C = \frac{\partial I}{\partial C}, \quad I_T = \frac{\partial I}{\partial T}
\end{aligned}$$

となり、この 3 元の連立方程式を解くことで $\Delta\theta_{L\ j}$, ΔC_j, ΔT_j が求められる。そして、

$$\begin{aligned}
\theta_j^* &\leftarrow \theta_{L_j}^* + \omega\Delta\theta_{L\ j} \\
C_j^* &\leftarrow C_j^* + \omega\Delta C_j \\
T_j^* &\leftarrow T_j^* + \omega\Delta T_j
\end{aligned}$$

$$0 < \omega < 2$$

これが収束するまで繰り返す。

3. 線形化の自動化

3.1 微係数の計算

(4),(5),(6) 式をそれぞれ θ_L, C, T で偏微分し定式化することはな多大な労力が必要になるため、これを自動的に計算する方法について考える。

ある物理量 $\alpha(\theta_L, C, T)$ について、$t = t_{n+1}$ における値 $\alpha(\theta_L^{n+1}, C^{n+1}, T^{n+1})$ を考えると

$$\begin{aligned}
&\alpha(\theta_L^{n+1}, C^{n+1}, T^{n+1}) \\
&= \alpha(\theta_L^* + \Delta\theta_L, C^* + \Delta C, T^* + \Delta T) \\
&= \alpha(\theta_L^*, C^*, T^*) \\
&\quad + \left.\frac{\partial\alpha}{\partial\theta_L}\right|_{\theta_L=\theta_L^*, C=C^*, T=T^*} \Delta\theta_L \\
&\quad + \left.\frac{\partial\alpha}{\partial C}\right|_{\theta_L=\theta_L^*, C=C^*, T=T^*} \Delta C \\
&\quad + \left.\frac{\partial\alpha}{\partial T}\right|_{\theta_L=\theta_L^*, C=C^*, T=T^*} \Delta T + O(\Delta^2) \\
&\cong \alpha^* + \beta^*\Delta\theta_L + \gamma^*\Delta C + \delta^*\Delta T
\end{aligned}$$

のように線形化でき、この値については 4 つの係数 (α^*, β^*, γ^*, δ^*) で表現できる。また、これに関数 f を作用させると

$$\begin{aligned}
&f(\alpha^{n+1}) \\
&\cong f(\alpha^* + \beta^*\Delta\theta + \gamma^*\Delta C + \delta^*\Delta T) \\
&\cong f(\alpha^*) + f'(\alpha^*)(\beta^*\Delta\theta_L + \gamma^*\Delta C + \delta^*\Delta T)
\end{aligned}$$

となり、同様に ($f(\alpha^*)$, $f'(\alpha^*)\beta^*$, $f'(\alpha^*)\gamma^*$, $f'(\alpha^*)\delta^*$) の 4 つで表現できる。

このように、線形化により現れた 4 つの項の各係数を演算毎に更新していくことで、各物理量を偏微分した式の定式化は不要となる。

本システムでは C++を用いて実装を行った。そして、$\alpha + \beta\Delta\theta_L + \gamma\Delta C + \delta\Delta T$ を扱うクラスを定義し、この四則演算および主要関数 (指数関数、対数関数、三角関数、べき乗、平方根など) を定義して、演算子および関数のオーバーロードを行っている。従って、利用者からすれば、従来は double 型であったものがクラスで定義した var 型になっただけである。

3.2 方程式の線形化

var クラスを用い、解くべき方程式を記述するだけで、線形化は自動的になされる。土壌物理の研究者からみて、モデルの改変が容易になっただけではなく、コードの可読性も高くなった。

4. 検　　証

4.1 開発効率の検証

従来のコードでは、モデルを記述している (4),(5),(6) 式の他に F_θ,F_C,F_T 等の 9 種の微係数をプログラム中に定義する必要があった。本手法により、モデルを記述している (4),(5),(6) 式のみを定義すれば十分である。その意味で、土壌物理の研究者が直接モデルを変更して、その数値解を得ることができるようになった。

土壌モデルを記述しているクラス soil だけを取り出して、ソースコードの行数を比較した結果を表 (1) に示した。

実コードにおいては計算結果の表示などの周辺部分の方が、モデル定義部分よりも大きいことから、全体としてのコードの

表 1 ソースコードの行数
Table 1 Linage of Source Code

コード	soil クラス	合計
自動化	388	1657
従来	1256	2707

表 2 1 次元水移動の計算時間

Table 2 Time of One Dimensional Water Transfer

コード	実行時間 (s)
自動化	21.9
従来	2.8

行数の減少の効果は小さい。しかし、土壌物理の研究者からみて、本質的に重要な部分である土壌モデルの定義部分は、3 分の 1 以下に減少している

4.2 実行時間の検証

方程式の線形化を同時に実行するため、実行時間が増加することが予想される。そこで、古典的な標準問題である Haverkamp [2] の砂質土壌中の 1 次元水移動の問題を適用して、F_θ,F_C,F_T などの 9 種の微係数を用いている従来コードと実行時間の比較した結果を表 (2) に示す。

その結果、実行時間は従来のコードに比べて 7.8 倍を要している。これは、従来のコードでは同じ物理量の同じ微係数を何度も計算することがないよう工夫されているのに対して、同じ物理量の同じ微係数が繰り返し求められていることに起因していると考えられる。

5. まとめ

本研究では土中の物質移動モデル構築のための支援システムを提案し開発を行った。具体的には、陰解法を適用するための

- 線形化を自動的に行う

ことによって、土壌物理の研究者は

- 土壌モデルのみの記述

を可能にし、モデル改変の試行実験に要する期間を大幅に短縮できたと同時に、手計算により誤りが入る可能性を大幅に減らすことができた。

代償として、計算実行時間が大幅に増えた。これについては今後の課題となる。

他の論文に示されたモデルとの比較研究するためには、それらのモデルについてもコードを作成し、信頼できる結果を短時間で得る必要がある。本システムの利用対象は土壌物理の研究者であり、必ずしもコンピュータや数値解析の専門家ではない。本論文はそのような利用者が、上述した目的を達成するのに対して貢献できている。

文献

[1] M.Th.van Genuchten: *A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils*, Soil Sci. Soc. Am. J. Vol. 44 (1980).

[2] R.Haverkamp,M.Vauclin,J.Touma,P.J.Wierenga, and G.Vachaud: *A Comparison of Numerical Simulation Models For One-Dimensional Infiltration*,Soil Sci. Soc. Am. J., Vol.41, pp. 285-294(1977).

[3] Michael J. Friedel : Documentation and Verification of VST2D, Water-Resources Investigations Report 00-4105 (2001).

[4] J.Simunek, T. Vogel and M. Th. van Genuchten : *The SWMS_2D Code for Simulating Water Flow and Solute Transport in Two-Dimensional Variably Saturated Media*, U.S.Salinity Laboratory Agricultural Research Service U.S.Department of Agriculture Riverside, California, Research Report No. 132 (1994).

[5] K.Noborio, K.J.McInnes, and J.L. Heilman : *Two-Dimensional Model for Water, Heat, and Solute Transport in Furrow-Irrigated Soil: II. Field Evaluation*, Soil Sci. Soc. AM. J., Vol.60, July-August, pp. 1010-1021 (1996).

[6] I.N.Nassar, Robert Horton, and A.M.M.Globus: *Simultaneous Transfer of Heat, Water, and Solute inPorous Media: II. Experiment and Analysis*, Soil Sci. Soc. Am. J., Vol.56, September-October pp. 1357-1365(1992).