

大学院の土壌物理学講義における土壌中の溶質移動計算への 汎用数学ソフトウェア (MathCad) の利用

登 尾 浩 助*

Using MathCad to Simulate Solute Transport in Soil for
 a Graduate Soil Physics Class

Kosuke NOBORIO*

I. はじめに

土壌中における水分、溶質、および熱の移動を知ること、農業ばかりでなく環境の面からも極めて重要である。土壌中におけるこれら物質や熱の移動は、通常、移流-分散方程式と呼ばれる偏微分方程式 (PDE) で表される。簡単な初期条件と境界条件を持つ線形 PDE は解析的に解を得ることができる。しかし、初期条件や境界条件が複雑な場合や係数が非常に非線形の場合には、解析解を得ることが極めて困難なので数値解法を用いる必要がある。従来はこれらの解析解や数値解を得るために、FORTRAN, BASIC, C などのプログラミング言語を使ってプログラムを開発するのが一般的であった。このようなプログラミング言語の習得には一定期間が必要である。

ところが、最近の農学系学科においてはプログラミング言語が講義されることがほとんど無く、電子メール、ワードプロセッサ、表計算などの市販ソフトウェアの操作法に重点を置いた講義が多く行われている。一方、学生が卒業論文や修士論文を作成するための研究では、解析解や数値解を使った解析を行わなければならない場面に出会うことが多数ある。近年発達の著しい Mathematica や MathCad といった汎用数学ソフトウェアは、比較的容易に学習できるので、従来のプログラミング言語を習得していない学生にとって利用しやすいと考えられる。

本論文では、汎用数学ソフトウェア (MathCad) を使った土壌中の溶質移動計算の例と MathCad を利用した講義に対する受講者による評価を報告する。この講義は、岩手大学大学院農学研究科の修士課程で平成 10 から 15 年度まで行った。講義では、土壌中の水分、溶質、または熱移動を差分法によって解く事を目的として、偏微分方程式から差分式への誘導と MathCad を使ったプ

ログラミングを解説した。本論文の計算例では、定常な水分フラックスが存在する条件下における 1 次元溶質輸送に対する解析解と MathCad による数値解を比較した。

II. 溶質移動の理論

溶質は水理学的分散と移流によって土壌中を移動する。均質土壌中における溶質の 1 次元分布は移流-分散方程式により次式で表される (van Genuchten and Parker, 1984)。

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1)$$

ここに、 R は遅延係数、 C は溶質濃度 (M/L^3)、 D は水理学的分散係数 (L^2/T)、 v は平均間隙流速 (L/T)、 t は時間 (T)、 x は距離 (L) である。

(1) 解析解による解法

式 (3) を 1 次元溶質輸送問題として次のような初期・境界条件下で解く。

$$\text{初期条件: } C = C_i \text{ for } t = 0, 0 \leq x \leq \infty \quad (2)$$

$$\text{境界条件: } \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \text{ for } t > 0, x = \infty \quad (3)$$

$$C = C_0 \text{ for } t > 0, x = 0 \quad (4)$$

ここに、 C_i は初期濃度、 C_0 は置換溶液濃度を示す。なお、表面境界条件には、通常、フラックス条件が用いられる。しかし、半無限大の解析解を用いて流出液濃度を近似するフラックス濃度は、(4) 式の濃度条件の解と等しいことを考慮して、ここでは (4) 式により境界条件を与えた (van Genuchten and Parker, 1984)。式 (1) の解析解は、

$$C_e(t, x) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{Rx - vt}{2\sqrt{DRt}} \right] + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{vx}{D} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{Rx + vt}{2\sqrt{DRt}} \right] \quad (5)$$

と表さる (van Genuchten and Parker, 1984)。ここに、 C_e は相対濃度で、 $C_e = \frac{C - C_i}{C_o - C_i}$ と表される。また、 $erfc$ は余誤差関数である。

(2) 数値解による解法

式(1)を前進差分の形に書き換えると、

$$C_{i,t+\Delta t} = C_{i,t} + \frac{\Delta t}{R} \frac{f_1 - f_2}{\Delta x} + \frac{\Delta t}{R} v \frac{f_1 + f_2}{2D} \quad (6)$$

$$f_1 = D \frac{C_{i-1} - C_i}{\Delta x} \quad (7)$$

$$f_2 = D \frac{C_i - C_{i+1}}{\Delta x} \quad (8)$$

となる。ここに、 $C_{i,t+\Delta t}$ と $C_{i,t}$ はそれぞれ時刻 $t + \Delta t$ と t での節点 i における溶液濃度 (M/L^3) で、 Δt と Δx は、それぞれ計算時間増分 (T) と節点間隔 (L) である。また、 C_{i-1} , C_i , C_{i+1} は、それぞれ節点 $i-1$, i , $i+1$ における溶液濃度 (M/L^3) である。そして、 f_1 と f_2 は、それぞれ節点 $i-1$, i 間の溶質フラックス ($M/L^2/T$) と節点 i , $i+1$ 間の溶質フラックス ($M/L^2/T$) である。式(6),

Pore water velocity

$$v := 0.15 \quad (\text{cm/h})$$

Soil column length.

$$x := 50 \quad (\text{cm})$$

Initial concentration.

$$C_i := 0.10 \quad (\text{g/cm}^3)$$

Applied concentration.

$$C_o := 0.50 \quad (\text{g/cm}^3)$$

Define the hydrodynamic dispersion coefficient.

$$D := 0.2 \quad (\text{cm}^2/\text{h})$$

Define the retardation factor.

$$R := 1.0$$

Define an analytical solution for solute transport in an semi-inifinite soil column.

$$Ca(t, x) := (C_o - C_i) \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \right) \cdot \text{erfc} \left(\frac{R \cdot x - v \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D \cdot R \cdot t}} \right) + \frac{1}{2} \cdot \exp \left(\frac{v \cdot x}{D} \right) \cdot \text{erfc} \left(\frac{R \cdot x + v \cdot t}{2 \cdot \sqrt{D \cdot R \cdot t}} \right) \right] + C_i$$

$$tt := 0, 5.. 900$$

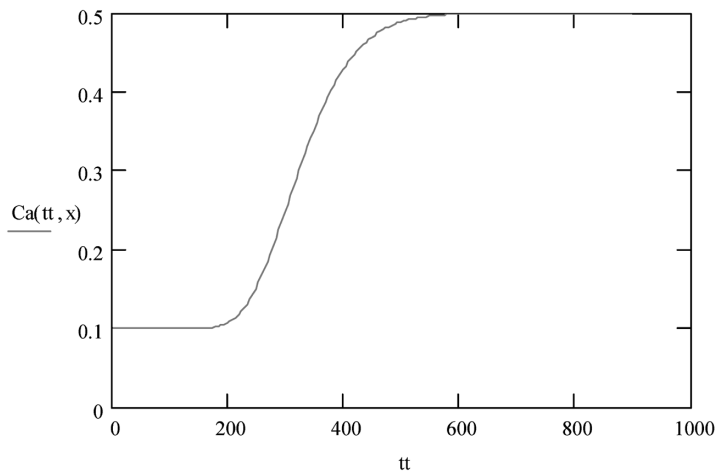


図-1 土壌中の溶質移動に対する解析解を使った MathCad プログラムの例と計算結果のグラフ

Fig. 1 An example of a MathCad program to simulate solute transport in soil using an analytical solution and its result.

(7), (8)を解析解と同様の境界条件 (式(2), (3), (4)) で解いた。

III. MathCad によるプログラミング

(1) 解析解

MathCad (Mathsoft, 2004) では、ほぼ数式の記述通りに画面上に数式を書くことで計算することができる (図-1)。「:=」は、右辺の値または計算結果を左辺の変数に代入することを意味する。一方、「=」は、左辺の変数の内容を画面上に表示する命令である。計算はワークシートの左から右、上から下に向かって進められる。変数や関数は、使う前に定義しないとエラーが発生する。

式(5)で表される解析解は、図-1に示されるようにほぼ数式通りに記述して、関数 Ca を定義した。関数 Ca では、引数として変数 t, x の値の受け渡しを行った。図-1の例では、「tt := 0, 5.. 900」という命令を使って、5 h 毎

に 0~900 h 計算した結果をグラフに表した。MathCad では、計算結果を図-1 ように同一のワークシート上にグラフで表すことができる。

(2) 数値解

MathCad では、数値計算ルーチンを変数の中身として取り扱う (図-2)。しかし、数値計算で使われる変数や関数は、数値計算ルーチンの外側で定義することができる。ルーチン中の「←」は、右辺の変数の値或いは計算式の結果の値を左辺の変数に代入する命令である。また、「for」は、それに続く変数を繰り返す命令である。このルーチンでは、変数 C に初期濃度 C_i を代入して、続いて時間ステップ毎に土壌深さ毎の溶液濃度 C_0 を更新した。更新は式(6)に従った。計算経過時間の内、変数「keep」が持っている数値の回数に 1 回の割合で、土壌深さ毎の溶液濃度の時間変化の計算値を変数 $C_{i,j}$ に格納した。この処理は、PC の内部記憶容量を節約するために行った。

Define some basic constants:

$$\begin{aligned} NL &:= 35 & \Delta x &:= 2.0 \text{ (cm)} \\ tmax &:= 900 \text{ (h)} & \Delta t &:= 0.1 \text{ (h)} & keep &:= 25 \\ Tsteps &:= \frac{tmax}{\Delta t} & Tsteps &= 9 \times 10^3 & \frac{Tsteps}{keep} &= 360 & t &:= 1.. Tsteps \end{aligned}$$

Define the flux density of solute.

$$flux(C, i) := D \cdot \frac{C_i - C_{i+1}}{\Delta x}$$

Peclet number

$$\frac{v \cdot \Delta x}{D} = 1.5$$

Δt should be smaller than this:

$$\frac{R \cdot \Delta x^2}{2 \cdot D} = 10$$

```

CC :=
| f2 ← 0
| for i ∈ 1.. NL + 1
|   | Ci,0 ← Ci
|   | C0,i ← Ci
| for t ∈ 1.. Tsteps
|   for i ∈ 1.. NL
|     | f1 ← f2
|     | f2 ← if(i = NL, f1, flux(C0, i))
|     | C0,i ← if [ i = 1, C0, C0,i +  $\frac{(f1 - f2) \cdot \Delta t}{\Delta x \cdot R}$  +  $v \cdot \frac{f1 + f2}{2 \cdot D \cdot R} \cdot \Delta t$  ]
|     | Ci,  $\frac{t}{keep}$  ← C0,i if mod(t, keep) = 0
|
| C
    
```

図-2 土壌中の溶質移動に対する差分法を使った MathCad プログラムの例

Fig. 2 An example of a MathCad program to simulate solute transport in soil using the finite difference method.

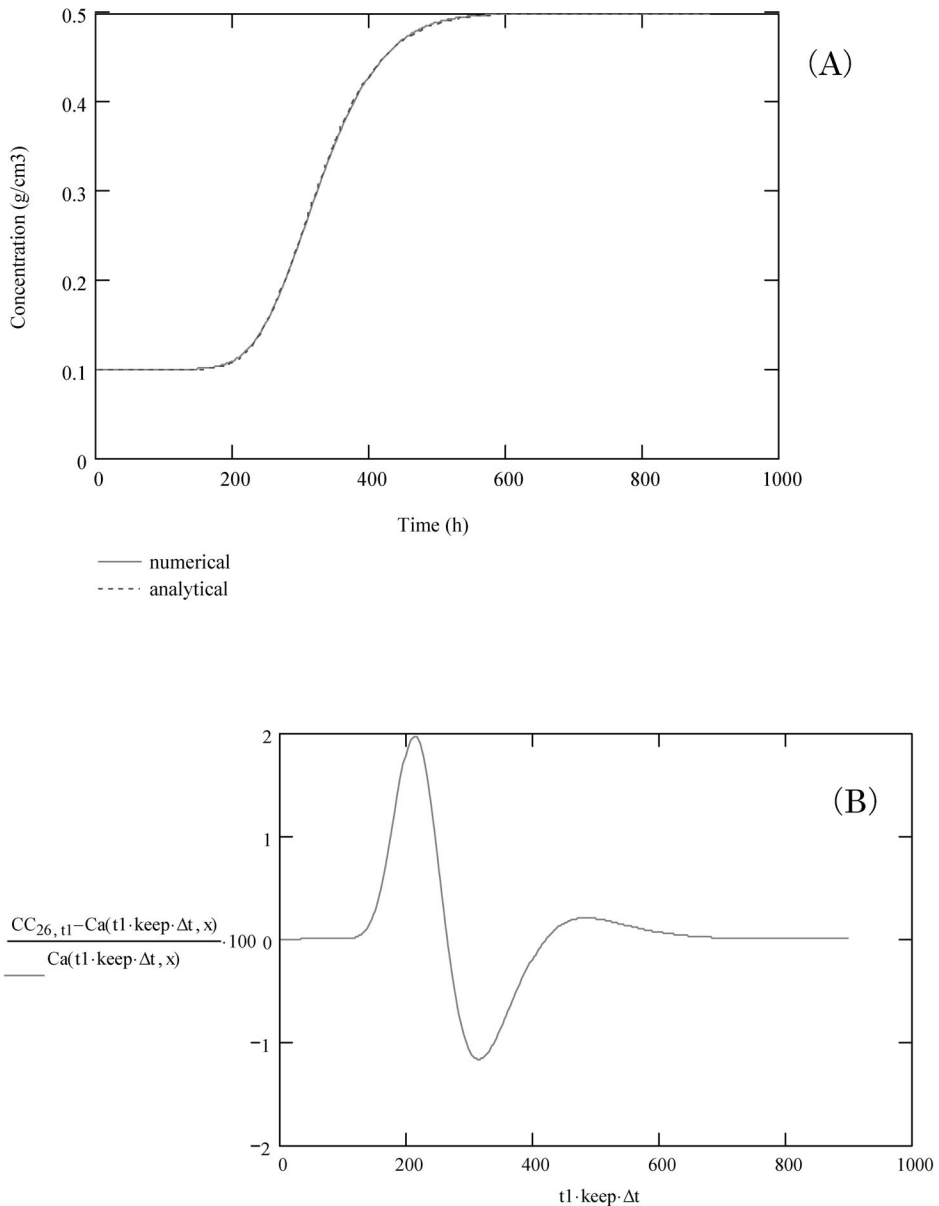


図-3 (A) 解析解と数値解により計算した破過曲線と (B) 数値解に起因する解析解に対する計算誤差

Fig. 3 (A) Breakthrough curves (B.T.C.) calculated with analytical and numerical solutions, and (B) calculation errors with the numerical solution relative to the analytical solution.

数値計算の解が収束するためには、時間ステップ $\Delta t < R\Delta t^2/(2D)$ である必要がある。一方、 P ($P=v\Delta x/D$) はペクレ数を表す。即ち、移流/分散の割合を表し、 P が大きければ移流による溶質の移動が分散による移動よりも卓越していることを意味する。

IV. 計算結果

図-1には解析解により計算した遅延係数 $R=1.0$ に対する破過曲線が示されている。ワークシートの上方に書かれている間隙流速 v や分散係数 D などの値を適宜変更すると、それに対応した破過曲線が得られた (図-1)。

ここでは、 $v=0.15\text{ cm/h}$, $x=50\text{ cm}$, $D=0.2\text{ cm}^2/\text{h}$, $R=1.0$ の条件で計算した。

図-3 (A) には解析解と差分法によって計算した数値解による破過曲線が示されている。両者には非常に良い一致が見られた。そこで、解析解による計算値と数値解による計算値の差を使って、数値解法による誤差がどの程度であるかの評価を行った (図-3 (B))。ここで例として示したペクレ数 $P=1.5$ の場合、数値解は解析解と比較して最大で+2%~-1.2%程度の誤差が生じた。

ペクレ数を変化させて数値計算を行うと、 $P>5$ で計算結果が振動した。図-4 に示されるように、 $P>0.38$ ではペクレ数が増加するに従って平方2乗誤差和 (RMSE) が増加した。一方、 $P<0.38$ ではペクレ数が減少するに従って RMSE が増加した。

V. 受講者の評価

平成 10~13 年度に岩手大学大学院農学研究科で行った MathCad を使った講義に対して受講者からアンケートを取った。講義で MathCad を使ったことについて適切であったかどうかを 10 段階で評価してもらった。10 段階を「適切」(8~10), 「どちらとも言えない」(4~7), 「不適切」(1~3) の 3 つに分けた。図-5 には 4 年間のアンケート結果を示す。平成 13 年度は、全員が「適切」と回答したが、その他の 3 年間は「適切」と「どちらとも言えない」がほぼ半々であった。平成 12 年度には「不適切」という回答があった。

プログラミングの経験が全く無い受講者がほとんどであったので、講義に先立ってコンピュータプログラムの概念に関して数時間分の補講をするべきであったと思わ

れる。しかし、土壌物理学的な事柄に余り興味や関心を持たない状態で受講した受講者の一部には、講義全般に対して低い評価を与える傾向も見られた。

講義を始めた平成 10 年度から平成 13 年度まではある程度受講者数を確保できたが、平成 14, 15 年度と受講者数が激減してアンケートが取れない状況になった。このことは、改組に伴い他学科からの受講者が居なくなったことにも起因する。また、学科の名前から「工学」が消えたために、プログラミングやコンピュータに興味を持つ学生の入学が減少している可能性があるかもしれない。

一方、同時期に開講した学部学生を対象とした土壌物理学においては、土壌中の物質・熱移動に関してシミュレーションモデルを使ったことへの受講者の評価は大変良好であった。ここでは、登尾 (2001) が紹介した汎用有限要素法プログラムを使用した。コンピュータを使った数値実験とレポート作成の組み合わせは、受講者の 90% 以上が現象を理解する上で役に立ったとアンケートに回答した (データ非表示)。ここでの受講者はモデルのパラメータを変更する程度で、大学院講義のように受講者がプログラムを書いてシミュレーションモデルの構築はしなかった。

VI. まとめ

通常のプログラム言語に比較して、MathCad を使うと比較的に簡単に解析解と数値解の両方を得ることが可能であることが分かった。大学院の講義で実際に MathCad を利用した事に対する 4 年間分の受講者のアンケー

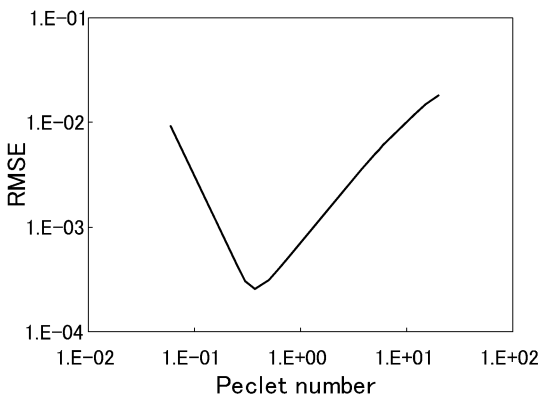


図-4 ペクレ数の変化に対する平方2乗誤差和 (RMSE) の変化

Fig. 4 Changes in root mean squared error (RMSE) with changes in Peclet numbers.

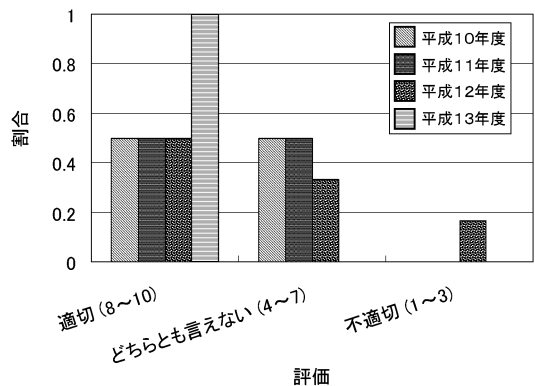


図-5 岩手大学大学院における土壌物理学特論の講義で MathCad を使用したことに対する受講者の反応

Fig. 5 Students' responses on using MathCad in the soil physics course for graduate students at Iwate University.

トでは、受講者の反応は「適切」と「どちらとも言えない」が半々であった。このことから、講義で MathCad を使用するためにはさらに何らかの工夫が必要であることが示唆された。一方、学部学生用のシミュレーションを使った数値実験はゲームのような感覚があるため、受講者には好評であった。即ち、シミュレーションのユーザーとしての興味は非常に高いが、シミュレーションそのものを構築する地味な工程には余り興味を持っていないかと思われる。大学院における今後の土壌物理学教育をどのように行うか、またどのような題材を取り扱うかについて広く議論する必要がある。

VII. 謝 辞

MathCad を使った数値解法に関しては、アメリカ合衆国・アイオワ州立大学の R. Ewing 博士と R. Horton

教授が開発した MathCad 用のプログラムを改変して使った。深謝致します。

引 用 文 献

- Mathsoft (2004) : Mathcad 12 ユーザーズガイド. マスソフト・エンジニアリング・アンド・エデュケーション・インク.
- 登尾浩助 (2001) : 土壌中の水分・溶質移動解析への汎用 PDE ソルバーの適用. 土壌の物理性, **88** : 19-25.
- van Genuchten, M. Th. and Parker, J.C. (1984) : Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns. Soil Sci. Soc. Am. J., **48** : 703-708.

受稿年月日 : 2005 年 12 月 28 日

受理年月日 : 2006 年 2 月 1 日