

東京大学大学院新領域創成科学研究科

社会文化環境学専攻

2016 年度

修 士 論 文

水底質統合モデルを用いた東京湾における炭素収支の評価

Evaluation of Carbon Budget in Tokyo Bay Using Benthic-Pelagic  
Coupled Numerical Model

2017 年 1 月 23 日提出

指導教員 佐々木 淳 教授

佐 藤 文 也

Sato, Fumiya

## 論文要旨

近年深刻化している地球温暖化の主な原因は人為起源の二酸化炭素排出量の増加であり、地球温暖化を緩和することおよび適応していくことは喫緊の課題とされている。排出された二酸化炭素は大気中、陸域、海域のいずれかに存在しているが、一般的に森林を含む陸域で蓄積される炭素をグリーンカーボン、海洋生態系に蓄積される炭素をブルーカーボンと呼ぶ。このブルーカーボンは高い炭素蓄積能力を有し、気候変動に対する緩和策としての重要性が高いとして注目を集めている。

日本国内では浅場や干潟において主に直接観測による研究が行われ始めた。以前まで浅海域は、陸域からの流入炭素が分解されることによる二酸化炭素の放出域であると考えられていたが、浅海域での海洋植物による炭素固定能力がそれを上回る結果、実際は吸収源であるということが明らかになっている。また、東京湾海表面の二酸化炭素分圧の実測例から、大部分では年間収支で二酸化炭素を吸収していることが分かった。しかしながら吸収された炭素の行方を追跡することは観測では困難であり、その動態を明らかにすることが求められている。

本研究では富栄養化が深刻な閉鎖性内湾のひとつである東京湾を対象とし、水底質統合型の3次元レイヤーモデルを用いて空間的、時間的な二酸化炭素フラックスの挙動を再現、予測することを目的とした。また、そのモデルを用いて将来的な気候変動シナリオを想定することにより二酸化炭素収支の変化を調べた。

再現計算の結果、水中内二酸化炭素分圧の季節変動傾向は再現できたが、値はやや過剰評価となった。原因としては、大気-海面フラックスおよび水底質間のフラックスの影響が大きすぎたということが考えられる。特に底質中有機物の分解により発生する二酸化炭素が水中に溶出するプロセスが強く影響しており、これは溶存酸素濃度が減少するメカニズムと同様の理解ができる。再現性向上のためには一次生産をより高い精度で再現すること、水底質間フラックスの改良および水中及び底質中の実測データを蓄積することが必要である。

精度面では改良の余地が残るものの、年間の二酸化炭素フラックスの収支のオーダーとしては観測結果と整合していた。このモデルを用いて、湾全体としての収支を推算したところ、湾内に流入する炭素は大部分が陸域由来であり、流入炭素の行方は1割強が底質内へ貯留され、残りは湾外へ流出するという結果になった。堆積量は有機物の沈降速度や、侵食/堆積を決定づける限界せん断応力の値により大きく左右されるが、フラックスの向きは変わらないと考えられる。

また気候変動を想定した2100年の東京湾における炭素収支を推算した結果、大気中の二酸化炭素濃度がある一定の値を超えると海水の二酸化炭素吸収量が急激に低下した。これは海水中の二酸化炭素分圧の増加および海水温の上昇により、本来海水が持つ酸に対する緩衝機能が低下したためであると考えられる。

## 目次

第1章	序論	1
1-1	研究背景	1
1-2	研究目的	2
1-3	東京湾の現状	2
1-4	溶存二酸化炭素の挙動	3
1-5	海洋の炭酸系	4
1-6	二酸化炭素フラックス	4
第2章	現地観測, 分析の方法	6
2-1	観測方法	6
2-1-1	概要	6
2-1-2	測定地点	6
2-2	採水方法	7
2-2-1	原理	7
2-2-2	器具	7
2-2-3	試薬類	8
2-2-4	手順	8
2-2-5	サンプルの保管	9
2-3	分析方法	9
2-3-1	装置の概要	9
2-3-2	試薬	10
2-3-3	機械操作手順	10
2-3-4	測定原理	11
2-3-5	注意事項	12
2-4	分析結果	12
2-4-1	第1回目(8月19日)	12
2-4-2	第2回目(9月2日)	14
2-4-3	鉛直分布	15
2-5	塩分との相関関係	15
第3章	水底質統合モデルの概要	17
3-1	数値モデルの全体像	17
3-1-1	水底質統合モデル	17
3-1-2	東京湾への適用	19
3-1-2-1	格子の設定	19

3-1-2-2 初期条件 .....	1 9
3-1-2-3 境界条件 .....	2 0
3-1-2-4 タイムステップと出力 .....	2 1
3-1-2-5 外力とモデルの妥当性 .....	2 2
3-2 流動モデル，波浪追算モデル，底層せん断応力モデル .....	2 3
3-2-1 流動モデル .....	2 3
3-2-1-1 境界条件 .....	2 4
3-2-1-1-4 $\sigma$ 座標系 .....	2 6
3-2-1-2 計算スキーム .....	3 0
3-2-1-3 格子システム .....	3 1
3-2-2 波浪追算モデル .....	3 1
3-2-3 底面せん断応力モデル .....	3 3
3-3 水質生態系モデル .....	3 5
3-3-1 スカラー量の支配方程式 .....	3 5
3-3-2 移流拡散項の離散化 .....	3 8
3-3-3 海面，海底の境界条件 .....	4 4
3-3-3-1 海面の境界条件 .....	4 4
3-3-3-2 底面の境界条件 .....	4 6
3-3-4 懸濁態物質の沈降 .....	4 7
3-3-5 生成項 .....	5 3
3-3-5-1 ルンゲクッタ法 .....	5 3
3-3-5-2 水中での生物化学プロセス .....	5 4
3-4 底質生態系モデル .....	6 1
3-4-1 有機炭素含有率に応じた間隙率の変化 .....	6 1
3-4-2 層厚調整 .....	6 2
3-4-3 状態変数の濃度更新 .....	6 3
3-4-4 支配方程式の差分化 .....	6 4
3-4-4-1 溶存態 .....	6 4
3-4-4-2 粒子態 .....	7 2
3-4-4-3 底質表層，底質底層の境界条件 .....	7 8
3-4-4-3-1 底質表層（溶存態） .....	7 8
3-4-4-3-2 底質底層（溶存態） .....	8 1
3-4-4-3-4 底質底層（粒子態） .....	8 7
3-4-4-4 差分式の解法（TDMA 法） .....	9 1
3-4-4-5 生成項 .....	9 2
3-4-5 埋没速度の評価 .....	9 4



3.5 境界面フラックスの設定および水底質統合方法 .....	9 6
3-5-1 海面での酸素フラックス .....	9 6
3-5-2 水底質間のフラックス .....	9 6
3-5-2-1 溶存態 .....	9 6
3-5-3 底質底層 .....	9 8
3-5-3-1 溶存態 .....	9 8
3-5-3-2 粒子態 .....	9 9
3-5-4 水底質統合 .....	1 0 0
3-5-4-1 水中における境界フラックスの取り扱い .....	1 0 0
3-5-4-2 底質中における境界フラックスの取り扱い .....	1 0 1
第4章 炭素モデル .....	1 0 2
4-1 全炭酸濃度 (DIC), 全アルカリ度 (TA) .....	1 0 2
4-2 DIC, TA の生成項 .....	1 0 2
4-2-1 水質 .....	1 0 2
4-2-2 底質 .....	1 0 7
4-3 pH, 二酸化炭素分圧 (pCO <sub>2</sub> ) .....	1 0 8
4-4 大気海面フラックス .....	1 1 0
4-4-1 大気中二酸化炭素濃度の定式化 .....	1 1 0
4-4-2 海面での二酸化炭素フラックス .....	1 1 2
4-5 水底質フラックス .....	1 1 2
第5章 .....	1 1 3
5-1 流動場の妥当性検討 .....	1 1 3
5-1-1 河川流量 .....	1 1 3
5-1-2 風速 .....	1 1 6
5-2 水質モデルによる DO, pCO <sub>2</sub> の妥当性検討 .....	1 1 9
第6章 感度分析 .....	1 3 4
6-1 大気海面フラックス, 水底質間フラックスの影響 .....	1 3 4
6-2 外洋の変動による影響 .....	1 3 6
6-3 河川流入負荷量の変動による影響 .....	1 3 7
6-4 二酸化炭素フラックス算定式の検討 .....	1 3 8
6-5 湾全体としての炭素収支 .....	1 4 0
6-6 大気中二酸化炭素濃度の変動による影響 .....	1 4 2
第7章 結論 .....	1 5 0

## 図目次

図 1.1	排出された炭素の行方 (IPCC 第4次評価報告書を基に作成) (IPCC, 2007)	2
図 2.1	(a) 観測の様子	6
図 2.2	左: 採水の様子, 右: 塩化水銀の添加	8
図 2.3	塩化水銀添加後のサンプルの変化	9
図 2.4	全アルカリ度滴定装置 ATT-05 の全体像	9
図 2.5	8/19 の分析結果 (表層の平面図)	14
図 2.6	9/2 の結果 (表層の平面図)	15
図 2.7	(a) 8/19 の分析結果	15
図 2.8	塩分と DIC, TA の相関	16
図 3.1	数値モデルの概要	17
図 3.2	生態系モデルの詳細	18
図 3.3	計算フロー (Amunugama, 2015 より引用)	19
図 3.4	河川流量の一例	21
図 3.5	気象条件, 潮位	22
図 3.6	$\sigma$ 座標系の概要	26
図 3.7	陽解法と陰解法のイメージ	31
図 3.8	スタaggerド格子	31
図 3.9	モデルで用いた地形	35
図 3.10	コントロールボリュームとフラックスの模式図	35
図 3.11	レイヤーに応じた沈降の様子	48
図 3.12	BSS に応じた侵食, 堆積	50
図 3.13	光制限の効果	55
図 3.14	水温制限の効果	55
図 3.15	POC の変化に応じた間隙率 (岡田・古川, 2005)	62
図 3.16	層厚調整のイメージ	62
図 3.17	溶存態と粒子態の存在形態	66
図 3.18	風上差分	68
図 3.19	間隙率の設定	69
図 3.20	区分線形を仮定した濃度勾配	70
図 3.21	水底質間の濃度勾配	97
図 4.1	二酸化炭素濃度の季節変動	111
図 4.2	二酸化炭素濃度の日変動	111

図 5.1	東京湾水質連続観測地点 .....	1 1 3
図 5.2	(a)河川 1 倍, (b)1.5 倍, (c)2 倍, (d)2.5 倍の表層水温, 塩分の実測値と計算値 .....	1 1 4
図 5.3	河川(a)1 倍, (b)1.5 倍, (c)2 倍, (d)2.5 倍の底層水温, 塩分の実測値と計算値 .....	1 1 5
図 5.4	風速(a)1.25 倍, (b)1.5 倍, (c)1.75 倍, (d)2.0 倍の底層水温, 塩分の実測, 計算値 .....	1 1 7
図 5.5	風速(a)1.25 倍, (b)1.5 倍, (c)1.75 倍, (d)2.0 倍の底層水温, 塩分の実測, 計算値 .....	1 1 8
図 5.6	POCC 実測値 (岡田・古川, 2005) .....	1 1 9
図 5.7	POCC の初期値 (左), 長期計算後の POCC 計算結果 (右) .....	1 2 0
図 5.8	1~5 年目の計算による底質 DIC, TA の変化 .....	1 2 1
図 5.9	6~10 年目の計算による底質 DIC, TA の変化 .....	1 2 1
図 5.10	間隙水中の全アルカリ度濃度 (右) (Di Toro, 2001) .....	1 2 2
図 5.11	表層 DO, クロロフィルaの計算値と実測値の比較 .....	1 2 3
図 5.12	曝気に関するガス交換係数として 0.3 (m/s) を使用した結果 .....	1 2 4
図 5.13	風速(a)1.0 倍, (b)1.25 倍, (c)1.5 倍のときの底層 DO の実測値と計算値 .....	1 2 5
図 5.14	計算結果出力地点 .....	1 2 6
図 5.15	上: CLH, 中: KSB, 下: TLH における pCO <sub>2</sub> 計算結果 .....	1 2 6
図 5.16	上: CLH, 中: KSB, 下: TLH における DO 計算結果 .....	1 2 7
図 5.17	Yamamoto-Kawai et al. (2015) による測定地点 .....	1 2 8
図 5.18	Yamamoto-Kawai et al. (2015) による測定結果, (a)TA, (b)DIC, (c)pCO <sub>2</sub> .....	1 2 8
図 5.19	古屋 (2014) による測定地点 .....	1 2 9
図 5.20	古屋 (2014) による二酸化炭素分圧測定結果 .....	1 2 9
図 5.21	2011 年 4 月~2012 年 3 月の水質の計算結果一覧① .....	1 3 0
図 5.22	2011 年 4 月~2012 年 3 月の水質の計算結果一覧② .....	1 3 1
図 5.23	2011 年 4 月~2012 年 3 月の底質の計算結果一覧① .....	1 3 2
図 5.24	2011 年 4 月~2012 年 3 月の底質の計算結果一覧② .....	1 3 3
図 6.1	大気海面フラックス, 水底質間フラックスの影響 .....	1 3 4
図 6.2	外洋の DIC, TA 開境界条件を変化させたときの pCO <sub>2</sub> .....	1 3 6
図 6.3	河川から流入する DIC を変化させたときの CO <sub>2</sub> フラックス年間収支 .....	1 3 8
図 6.4	様々な二酸化炭素フラックスの式を適用した時の年間収支 .....	1 4 0
図 6.5	湾全体における炭素収支の概念図 .....	1 4 1

図 6.6	BSS の大きさによる侵食と堆積 .....	1 4 1
図 6.7	$\tau_D$ , $\tau_E$ を変化させたときの炭素収支の結果 .....	1 4 2
図 6.8	将来の大気中二酸化炭素濃度予測 .....	1 4 3
図 6.9	2100 年における東京湾の炭素収支予測 .....	1 4 4
図 6.10	(a) 大気中二酸化炭素濃度 400ppm (現在) の炭酸系計算結果 .....	1 4 6
図 6.11	(b) RCP4.5 を想定した時の炭酸系計算パラメータ結果 .....	1 4 7
図 6.12	(c) RCP6.0 を想定した時の炭酸系計算パラメータ結果 .....	1 4 8
図 6.13	(d) RCP8.5 を想定した時の炭酸系計算パラメータ結果 .....	1 4 9

## 表目次

表 2.1	観測地点の座標 .....	7
表 2.2	分析に用いた試薬とその用途 .....	10
表 2.3	ATT-05 操作手順 .....	10
表 2.4	第1回目の分析結果一覧 .....	13
表 2.5	第二回目の分析結果一覧 .....	14
表 2.6	各層における TA, DIC と塩分の相関係数 .....	16
表 3.1	河川, 下水の種類と栄養塩濃度 .....	20
表 3.2	生化学プロセスと化学反応式 .....	55
表 4.1	DIC に関わる化学反応式 .....	104
表 4.2	TA に関わる化学反応式 .....	106
表 6.1	1986~2005 を基準とした, 21 世紀末の気温上昇予測 .....	143
表 6.2	初期条件, 開境界条件の変更点 .....	144

## シンボルリスト

水質	底質	単位	意味
$S$		[PSU]	塩分
$T$		[°C]	水温
$C_{phy1}$		[mgC/m <sup>3</sup> ]	植物プランクトン
$C_{phy2}$		[mgC/m <sup>3</sup> ]	植物プランクトン
$C_{phy3}$		[mgC/m <sup>3</sup> ]	植物プランクトン
$C_{zoo}$		[mgC/m <sup>3</sup> ]	動物プランクトン
$C_{pocL}$	$B_{pocL}$	[mg/m <sup>3</sup> ]	易分解性有機炭素
$C_{pocR}$	$B_{pocR}$	[mg/m <sup>3</sup> ]	難分解性有機炭素
$C_{pocI}$	$B_{pocI}$	[mg/m <sup>3</sup> ]	不活性有機炭素
$C_{NH_4}$	$B_{NH_4}$	[mmol N/m <sup>3</sup> ]	アンモニア態窒素
$C_{PO_4}$	$B_{PO_4}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	リン酸態リン
$C_{NO_3}$	$B_{NO_3}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	硝酸態窒素
$C_{Si}$	$B_{Si}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	溶存態シリカ
$C_{PSi}$	$B_{PSi}$	[mg/m <sup>3</sup> ]	粒子態シリカ
$C_{DOX}$	$B_{DOX}$	[g/m <sup>3</sup> ]	溶存酸素
$C_{H_2S}$	$B_{H_2S}$	[g/m <sup>3</sup> ]	硫化水素
$C_{silt}$	$B_{silt}$	[g/m <sup>3</sup> ]	シルト
$C_{DIC}$	$B_{DIC}$	[μmol/kg]	全炭酸
$C_{TA}$	$B_{TA}$	[μmol/kg]	全アルカリ度

水質モデル	単位	意味
$R_{PP_{phy}}$	[1/s]	植物プランクトンの光合成速度
$R_{Met_{phy}}$	[1/s]	植物プランクトンの呼吸速度
$R_{Mor_{phy}}$	[1/s]	植物プランクトンの枯死速度
$R_{Graze_{phy}}$	[1/s]	動物プランクトンによる捕食速度
$G_{phy}$	[1/s]	最大成長速度
$TL_{phy}$		温度による成長制限
$LL_{phy}$		光による成長制限
$NL_{phy}$		栄養塩濃度による成長制限
$K_{PO_4}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	リンの半飽和定数
$K_N$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	窒素の半飽和定数
$K_{SiO_2}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	シリカの半飽和定数

$K_{DIC}$	$[\mu\text{mol/kg}]$	DIC の半飽和定数
$R_{Gro_{zoo}}$	$[1/s]$	動物プランクトンの成長速度
$R_{Mor_{zoo}}$	$[1/s]$	動物プランクトンの死亡速度
$R_{Met_{zoo}}$	$[1/s]$	動物プランクトンの代謝速度
$R_{Absor_{zoo}}$	$[1/s]$	動物プランクトンの食物吸収速度
$R_{Min_{food}}$	$[1/s]$	動物プランクトンが使える最小の食料
$Absorb_{portion}$		最大吸収割合 (0~1) や(0~100)といったように範囲を書く
$R_{Graze_{zoo}}$	$[1/s]$	捕食速度
$R_{Graze_{pri}}$	$[1/s]$	
$G_{zoo}$	$[1/s]$	最大成長速度
$TL_{zoo}$		温度による成長制限
$FL_{zoo}$		食料による成長制限
$R_{Fecal_{zoo}}$	$[1/s]$	動物プランクトンの排泄速度
$D_{zoo}$	$[1/s]$	最大死亡速度
$R_{dec_{poc}}$	$[1/s]$	好気性分解の分解速度
$k_{dec_{poc}}$	$[1/s]$	好気性分解の速度定数
$\theta_{dec_{poc}}$		好気性分解の温度係数
$K_{O_{2poc}}$	$[\text{gO}_2/\text{m}^3]$	酸素の半飽和定数
$R_{denit_{poc}}$	$[1/s]$	窒素を用いる嫌気性分解の分解速度
$k_{denit_{poc}}$	$[1/s]$	速度定数
$\theta_{denit_{poc}}$		温度係数
$K_{denit}$	$[\text{g}/\text{m}^3]$	酸素の半飽和定数
$R_{adec_{poc}}$	$[1/s]$	硫酸イオンを用いる嫌気性分解の分解速度
$k_{adec_{poc}}$	$[1/s]$	速度定数
$\theta_{adec_{poc}}$		温度係数
$K_{NO_3}$	$[\text{mmol}/\text{m}^3]$	硝酸態窒素の半飽和定数
$R_{nitri_{NH_4}}$	$[1/s]$	硝化速度
$k_{nitri_{NH_4}}$	$[1/s]$	硝化最大速度
$K_{nitri_{NH_4}}$	$[\text{mmol}/\text{m}^3]$	アンモニア態窒素の半飽和定数
$R_{Si_{pro}}$	$[1/s]$	二酸化ケイ素の生産速度
$k_{Si}$	$[1/s]$	二酸化ケイ素の最大生産速度
$\theta_{Si}$		温度係数
$K_{Si}$	$[\text{mmol}/\text{m}^3]$	粒子態二酸化ケイ素の半飽和定数
$C_{Si_{sat}}$	$[\text{mmol}/\text{m}^3]$	二酸化ケイ素の飽和濃度
$R_{H_2S_{oxi}}$	$[1/s]$	硫化物から粒子状イオウへの酸化速度

$k_{oxi}$	[1/s]	最大酸化速度
$\theta_{oxi}$		温度係数
$K_{O_{2oxi}}$	[gS/m <sup>3</sup> ]	酸素の半飽和定数
<b>底質モデル</b>		
$R_{dec_{poc}}$	[1/s]	好気性分解の分解速度
$k_{dec_{poc}}$	[1/s]	好気性分解の速度定数
$\theta_{dec_{poc}}$		好気性分解の温度係数
$K_{O_{2poc}}$	[gO <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> ]	酸素の半飽和定数
$R_{denit_{poc}}$	[1/s]	窒素を用いる嫌気性分解の分解速度
$k_{denit_{poc}}$	[1/s]	速度定数
$\theta_{denit_{poc}}$		温度係数
$K_{denit}$	[g/m <sup>3</sup> ]	酸素の半飽和定数
$R_{adec_{poc}}$	[1/s]	硫化物を用いる嫌気性分解の分解速度
$k_{adec_{poc}}$	[1/s]	速度定数
$\theta_{adec_{poc}}$		温度係数
$K_{NO_3}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	硝酸態窒素の半飽和定数
$R_{nitri_{NH_4}}$	[1/s]	硝化速度
$k_{nitri_{NH_4}}$	[1/s]	硝化最大速度
$K_{nitri_{NH_4}}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	アンモニア態窒素の半飽和定数
$R_{Si_{pro}}$	[1/s]	二酸化ケイ素の生産速度
$k_{Si}$	[1/s]	二酸化ケイ素の最大生産速度
$\theta_{Si}$		温度係数
$K_{Si}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	粒子態二酸化ケイ素の半飽和定数
$Sat_{Si}$	[mmol/m <sup>3</sup> ]	二酸化ケイ素の飽和濃度
$R_{H_2S_{oxi}}$	[1/s]	硫化物の酸化速度
$k_{oxi}$	[1/s]	最大酸化速度
$\theta_{oxi}$		温度係数
$K_{O_{2oxi}}$	[gS/m <sup>3</sup> ]	酸素の半飽和定数
<b>水質，底質共通</b>		
rPC_dec	有機物分解時に発生するリンの，炭素に対する割合	
rNC_dec	有機物分解時に発生する窒素の，炭素に対する割合	
rSi_phy	有機物分解時に発生する二酸化ケイ素の，炭素に対する割合	



rSi_PSi	溶存態二酸化ケイ素の、粒子態二酸化ケイ素に対する割合
rCS_dec	有機物分解時に発生する硫黄の、炭素に対する割合
rCS_oxi	硫化物の酸化時に発生する炭素の、硫黄に対する割合
rOC_dec	有機物分解時に発生する酸素の、炭素に対する割合
rON_nit	硝化時に発生する酸素の、窒素に対する割合
rOS_oxi	硫化物の酸化時に発生する酸素の、炭素に対する割合
rDIC_POC	有機物分解時に発生する DIC の、炭素に対する割合
rDIC_NO <sub>3</sub>	有機物分解時に発生するリンの、窒素に対する割合
rTA_POC	有機物分解時に発生する TA の、炭素に対する割合
rTA_NO <sub>3</sub>	嫌気分解時に発生する TA の、窒素に対する割合
rTA_NH <sub>4</sub>	硝化時に発生するリンの、炭素に対する割合
rTA_POC <sub>NO<sub>3</sub></sub>	NO <sub>3</sub> を使用する光合成時に発生する TA の、炭素に対する割合
rTA_POC <sub>NH<sub>4</sub></sub>	NH <sub>4</sub> を使用する光合成時に発生する TA の、炭素に対する割合
rTA_H <sub>2</sub> S	硫化水素の酸化時に発生する TA の、硫黄に対する割合

---

#### フラックス

---

Jflux	[g/m <sup>2</sup> /s]	侵食 or 堆積フラックス
Diffusion_flux_s2w	[mmol/m <sup>2</sup> /s]	底質から水中への拡散フラックス
	[g/m <sup>2</sup> /s]	
flux_s2w	[mmol/m <sup>2</sup> /s]	底質から水中への移流フラックス
	[g/m <sup>2</sup> /s]	
flux_b2s	[mmol/m <sup>2</sup> /s]	底質堆積による底質有効層から深部への移動
	[g/m <sup>2</sup> /s]	(埋没) フラックス

## 第1章 序論

### 1-1 研究背景

近年深刻化している地球温暖化の主な原因は人為起源の二酸化炭素排出量の増加であり、IPCC 第4次評価報告書では、経済とグローバリゼーションの変化に応じた二酸化炭素排出量の予測（SRES シナリオ）が提唱され、また IPCC 第5次評価報告書ではさらに政府主導の排出緩和策や気候変動適応策を前提として、将来の温室効果ガスの安定化レベルとそこに至るまでの経路を予測した RCP シナリオが提唱された。このように将来的な気候変動予測し、緩和するための施策が検討されている。排出された二酸化炭素は大気中、陸域、海域のいずれかに存在しているが、一般的に森林を含む陸域で蓄積される炭素をグリーンカーボン、海洋生態系に蓄積される炭素をブルーカーボンと呼ぶ。（UNEP, 2009）このブルーカーボンは高い炭素蓄積能力を有し、気候変動に対する緩和策としての重要性が高いと脚光を浴びている。

しかし、二酸化炭素が海洋に吸収されると水素イオンが発生することで海洋が酸性化すると考えられており、炭酸カルシウム団が形成されにくくなるので貝類やサンゴなどの海洋生物への影響が懸念されている。実測により酸性化が進んでいることが明らかになってきているが、実態はまだよく解明されていないため、今後も知見を集積していくことが不可欠である。

二酸化炭素吸収量の評価は主に外洋域で行われてきており、例えば気象研究所によって太平洋における二酸化炭素フラックスの算出が行われている。（気象研究所, 2012）。沿岸域は総面積自体はあまり大きくないものの、陸域から多量の栄養塩が流入することにより一次生産量が多いという特徴がある。従って、沿岸域の二酸化炭素収支を解明することは重要な意味を持つ。

また日本国内で浅場や干潟において主に直接観測による研究が行われ始めた。以前まで浅海域は、陸域からの流入炭素が分解されることによる二酸化炭素の放出域であると考えられていたが、桑江ら(2014)の研究により浅海域での海洋植物による炭素固定能力がそれを上回り、実際は吸収源であったということが明らかになっている。また、Yamamoto-Kawai et al.(2015)や神田(2011)のように東京湾海表面の二酸化炭素分圧を実測し、港付近を除く大部分では二酸化炭素を吸収していることが分かっている。しかしながら湾全体を3次元的に捉えたところの二酸化炭素収支やはまだ不明確であり、その動態を明らかにすることが求められている。

そのためには数値モデルを用いて二酸化炭素フラックスの挙動を再現、予測することが有効な手段の一つであるが内湾を対象としたプロセスベースの二酸化炭素フラックス計算モデルは、その複雑な生態系プロセスのために困難さが伴う。内湾の二酸化炭素フラックスに関する既往の研究としてはボックスモデルを用いた数値計算（Arndt et al., 2011）、バルト海におけるプロセスベースのモデル（Pierre et al., 2013）、沿岸域における物質収支

(Volta et al., 2016) などがある。いずれも最近の研究であり、実測データが豊富な欧州で多く研究が行われている。多くのモデルでは湾の縦断方向にそった2次元

しかし内湾の環境は、それを取り巻く陸域からの流入負荷や、接する外洋の水質特徴に大きく依存するため、東京湾のように密度成層が形成されやすく、また流入負荷により汚濁した底質からの溶出の影響の強い内湾では、水底質統合型の3次元レイヤーモデルを用いて空間的、時間的な変動を詳細に調べる必要がある。

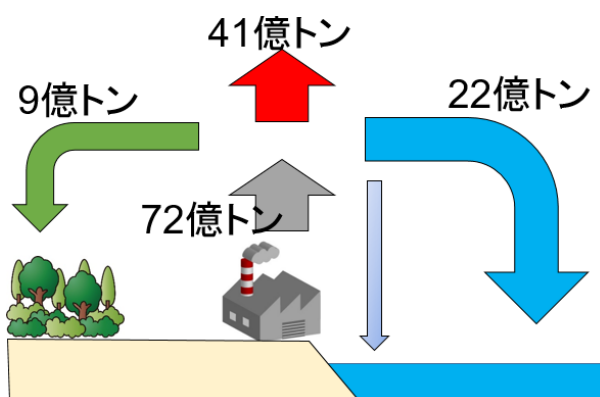


図 1.1 排出された炭素の行方 (IPCC 第4次評価報告書を基に作成) (IPCC, 2007)

## 1-2 研究目的

そこで本研究では富栄養化が深刻な閉鎖性内湾のひとつである東京湾を対象として二酸化炭素フラックス再現モデルを構築し、そのモデルを用いて二酸化炭素吸収量の推算、また吸収量に影響を与える因子とその影響の大きさを推察する。モデルのベースとなるのは準3次元流動モデル(佐々木ら, 1998)、生態系モデル (Amunugama et al., 2015) であり、本研究ではその生態系モデルに、後述する炭酸系パラメータのうち全アルカリ度と全炭酸濃度を新たな状態変数として追加して、水中、底質内の濃度をプロセスベースのモデルで計算する。その結果を用いて東京湾全体での二酸化炭素フラックスを算出する。さらにそのモデルを用いて感度分析により二酸化炭素収支に影響を与える要因を明らかにする。

また、現状扱える実測データの量が十分ではないため、浚渫窪地、航路を含む広域の海水のサンプリング、分析を行い炭酸系データを収集する。

## 1-3 東京湾の現状

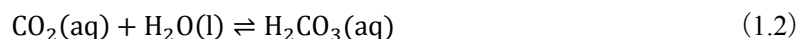
かつて豊かな漁場であった東京湾は、高度経済成長に伴う汚濁物質の流入増加や、干潟の埋め立てによる自浄能力の低下により東京湾の水質は悪化傾向へと変わった。また埋め立てに使用するため海底の土砂が浚渫されたことにより、幕張沖や浦安沖を代表として浚渫窪地が現在に至るまで残っている。浚渫窪地内では海水の鉛直混合が起こりにくいため酸素の供給が断たれ、水質悪化に拍車をかけることとなる。赤潮や青潮をはじめとした

深刻な環境問題に直面することとなった。そこで生活排水や工業廃水などの汚濁負荷の削減のため、浄化槽の整備や排水水の規制、下水道普及率の向上など様々な取り組みが行われてきた。そのため、COD など水質そのものは緩やかな改善傾向にあるが、貧酸素水塊問題には改善が見られず、水産資源の漸減傾向など生態系の改善には至っていない。近年、水環境や生態系、生物の再生に向けた取り組みが活発化し、干潟や浅場の再生も検討されているが、未だ課題は多い。このように複雑な生態系システムが存在する東京湾において二酸化炭素を含む無機炭素は、河川からの流入、大気との交換、底質への固定、外洋への流出などが行われている。

#### 1-4 溶存二酸化炭素の挙動

ここで本研究の根幹をなす、海洋における二酸化炭素の挙動について述べる。CO<sub>2</sub>が水に溶けてできる炭酸 (H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>)、炭酸水素イオン (HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>)、炭酸イオン (CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>)、およびそれらの塩を総称して「炭酸物質」と呼ぶ。後述するが、海水中に溶けている炭酸物質は互いに化学平衡の状態にあり、この化学平衡系（炭酸系）は海水の酸塩基的な性質を支配する要因となっている。炭酸系は複数の化学平衡から成り立っているため複雑に見えるが、「物質の収支」、「質量作用の法則による平衡定数の表現」、そして「電解質中のイオンの総度の電気的中性の原理」の3つを基本として解くことができる。

CO<sub>2</sub>は水に溶けると以下の反応式に示される通り、H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>になる。



ここに、(g) が気体、(l) が液体、(aq) が水溶液に溶けた状態を表している。

式 (1.1) は気体状のCO<sub>2</sub>と水溶液に溶けて水和したCO<sub>2</sub>との間の化学平衡を表す。式

(1.2) で表されるのは、水和したCO<sub>2</sub>とH<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>との間の化学平衡である。式 (1.2) の化学平衡は大きく左辺に偏っており、CO<sub>2</sub>(aq)とH<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(aq)の濃度比はおおよそ 1000:1 になっている。しかし、これらは酸塩基平衡を考える上で識別する必要がないことから、CO<sub>2</sub>(aq)とH<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(aq)を合わせて式 (1.3) で表すのが一般的である。



式 (1.3) の平衡式の平衡定数は式 (1.4) で表される（以下、(aq) は省略する）

$$K_0 = \frac{[\text{CO}_2^*]}{p\text{CO}_2} \quad (1.4)$$

[ ]は水溶液中の濃度（ここでは海水 1kg 中のモル濃度：単位は mol/kg を使用する）を表す。また pCO<sub>2</sub>は空気中のCO<sub>2</sub>分圧を表す。分圧は、理想気体の性質に関するドルトンの法則で示される概念である。

次に、海水に溶けたH<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>は式 (1.5)、(1.6) に表される酸塩基平衡の状態になる。



これらの酸塩基平衡の酸解離定数 $K_1$ および $K_2$ は式 (1.7), (1.8) で表される.

$$K_1 = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{CO}_2^*]} \quad (1.7)$$

$$K_2 = \frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} \quad (1.8)$$

ここで $K_0$ ,  $K_1$ ,  $K_2$ はそれぞれ次のような経験式で表される.

$$\begin{aligned} \ln K_0 = & 93.4517 \times \frac{100}{T} - 60.2409 + 23.3585 \times \ln \frac{T}{100} + S\{0.023517 \\ & - 0.023656 \times \frac{T}{100} + 0.0047036 \times \left(\frac{T}{100}\right)^2\} \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\text{p}K_1 = \frac{3633.86}{T} - 61.2172 + 9.6770 \ln T - 0.011555 S + 0.0001152 S^2 \quad (1.10)$$

$$\text{p}K_2 = \frac{471.78}{T} + 25.9290 - 3.1696 \ln T - 0.01781 S + 0.0001122 S^2 \quad (1.11)$$

$T$ は水温 (K),  $S$ は塩分, また $\text{p}K_n = -\log_{10} K_n$ である.

### 1-5 海洋の炭酸系

ここで海洋の炭酸系に関して説明する. 海洋の炭酸系は全アルカリ度(Total Alkalinity), 全炭酸濃度(Dissolved Inorganic Carbon), pH, 二酸化炭素分圧(partial pressure of  $\text{CO}_2$ )の4つから成る. 以下, 簡単のため全アルカリ度を TA, 全炭酸濃度を DIC, 二酸化炭素分圧を  $\text{pCO}_2$ と表記する.

全アルカリ度, 全炭酸濃度は式 (1.12), (1.13) で表される.

$$\text{DIC} = [\text{CO}_2^*] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] \quad (1.12)$$

$$\begin{aligned} \text{TA} = & [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{B}(\text{OH})_4^-] + [\text{OH}^-] + [\text{HPO}_4^{2-}] + 2[\text{PO}_4^{3-}] + [\text{H}_3\text{SiO}_4] \\ & + [\text{NH}_3] + [\text{HS}^-] - [\text{H}^+] - [\text{HSO}_4^-] - [\text{HF}] - [\text{H}_3\text{PO}_4] \end{aligned} \quad (1.13)$$

海水中の陽イオンと陰イオンのバランスは, 電気的中性ではなく陰イオンが過剰である. この余剰分の塩基のことを全アルカリ度と呼ぶ. 全炭酸濃度は溶解している二酸化炭素と炭酸系物質の総量のことである.

### 1-6 二酸化炭素フラックス

二酸化炭素フラックス  $F$ は式 (1.14) のように表される.

$$F = kK_0(\text{pCO}_{2\text{SW}} - \text{pCO}_{2\text{air}}) \quad (1.14)$$

ここで  $k$  はピストン速度と呼ばれる風速の関数であり，式 (1.15) で表される．

(Wanninkhof, 1992)

$$k = 0.39 \times U_{10}^2 \times \left( \frac{S_c}{660} \right)^{-0.5} \quad (1.15)$$

ここで， $U_{10}$  は海面 10m の風速， $S_c$  はシュミット数で式 (1.16) で表される．0.39 は経験則から得られる次元を持つ定数であり，全体で (cm/h) の単位をもつ．

$$S_c = 2073.1 - 125.62T + 3.6276T^2 - 0.043219T^3 \quad (1.16)$$

$p\text{CO}_{2\text{sw}}$  は海表面の二酸化炭素分圧， $p\text{CO}_{2\text{air}}$  は大気中の二酸化炭素分圧である．

フラックスの式を適用する際には単位の確認が最重要である．それぞれの単位は  $k$  が

(cm/h)，二酸化炭素の溶解平衡定数  $K_0$  が (mol/atm · kg)， $p\text{CO}_2$  が (μatm) である．そのため実用上は

$$F(\mu\text{mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}) = k \times \frac{0.01}{3600} (\text{m}/\text{s}) \times K_0 (\text{mol}/\text{atm} \cdot \text{kg}) \times \rho_w (\text{kg}/\text{m}^3) \times \Delta p\text{CO}_2 (\mu\text{atm})$$

のように単位の変換をして計算する． $\rho_w$  は海水の密度である．

## 第2章 現地観測、分析の方法

### 2-1 観測方法

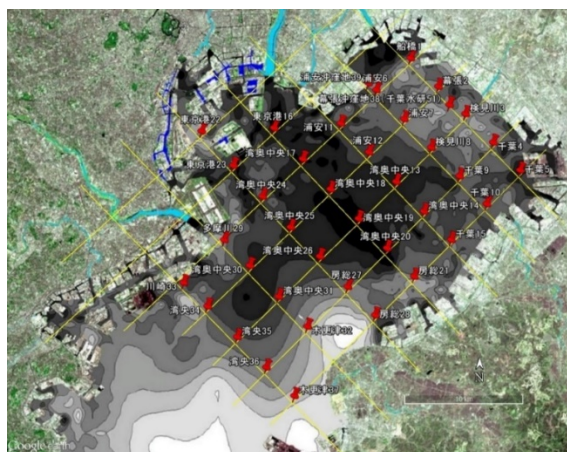
#### 2-1-1 概要

数値モデルによる再現、予測を行う場合には実測値と比較することによるモデルのキャリブレーションが不可欠であるが、東京湾における実測値は未だ少なく、特に底層における観測データは不足している。そこで本研究では実測データを収集し、キャリブレーションの精度を高めることを目的として現地観測を行った。

採水は2016年8月19日、9月2日の2回行った。東京湾表層水の二酸化炭素分圧は港付近など流入負荷の多い場所で高く、それ以外では年間を通じて大気中濃度よりも低いことが明らかになっている（神田, 2011）。しかし底層水や窪地、航路の内部の二酸化炭素分圧のデータは十分でない。そこで夏季東京湾における二酸化炭素分圧の分布を平面的、鉛直的に広く捉えることを目的とし、主に湾奥部を対象として表層、中層、底層の海水を採取した。



図 2.1 (a) 観測の様子



(b) 観測候補地点

(Google Earth に岡田・古川 (2005) の含水比マップを重ねた)

#### 2-1-2 測定地点

内湾の水質は、流入負荷の影響を除けば横断方向に比べて縦断方向の変化が大きいいため、湾中心を縦断する側線上を主な調査地点とした。

海水中における二酸化炭素の増減は、一次生産や有機物の分解、呼吸によって変化するので溶存酸素濃度の変化と逆の挙動を示すと考えられる。従って底質にヘドロ状の未分解有機物が多く堆積しており、夏季に貧酸素化、無酸素化が起こりやすい湾奥部や窪地においては二酸化炭素分圧の変化も大きいと予想されるため、幕張沖窪地、浦安沖窪地、千葉

航路，観測地点に加えた．また，河川流入の影響を調べるために多摩川河口付近も調査した．また，先ほど述べた未分解有機物が多く堆積している地点は，含水比の大きい地点に相当する．

表 2.1 観測地点の座標

地点名	緯度(東経)	経度(北緯)
検見川 3	35° 36'45.64"	140° 01'35.13"
湾奥中央 19	35° 31'59.70"	139° 55'37.65"
房総 21	35° 29'23.30"	139° 58'40.97"
多摩川 29	35° 31'03.27"	139° 48'11.34"
湾奥中央 31	35° 18'18.31"	139° 51'09.42"
湾央 35	35° 26'37.17"	139° 48'53.19"
幕張沖窪地 38	35° 38'04.19"	140° 00'21.26"
浦安沖窪地 39	35° 38'18.04"	139° 56'17.15"
千葉航路 C4	35° 34'43.00"	140° 01'73.00"

## 2-2 採水方法

### 2-2-1 原理

大気とのガス交換を最小限に抑えながら，海水サンプルをきれいなガラス容器に採取する．（大気とのCO<sub>2</sub>交換が炭酸系パラメータの測定値に及ぼす影響の度合いはpCO<sub>2</sub>のようにとても敏感なものから，全アルカリ度のように影響を受けないものまでさまざまである．）生物活動を抑えるために，採取したサンプルに塩化水銀(Ⅱ)を少量添加したあと，大気とのCO<sub>2</sub>交換や水蒸気交換を防ぐために採水容器を密閉する．

### 2-2-2 器具

サンプル容器に関しては Schott Duran®のような高品質のホウケイ酸ガラス(膨張係数が  $32 \times 10^{-7} \text{K}^{-1}$ )の試薬瓶が適しているとされる．ガラス瓶は共通摺り合わせ栓付きの瓶が最も密閉性が高いが，本研究ではサンプル数が多いことと，求める精度を十分に満たすと考えられることから，ねじ式のデュラン瓶で代用することとした．

採水器具は北原式採水器を用い，多項目水質計 AAQ-RINKO（JFE Advantec 社）を抱き合わせる形でテープで固定し，塩分，水温などの水質鉛直分布を測定しながら採水を行った．

塩化水銀添加に際しては10μL~100μLの可変式エッペンドルフピペットを用いた．



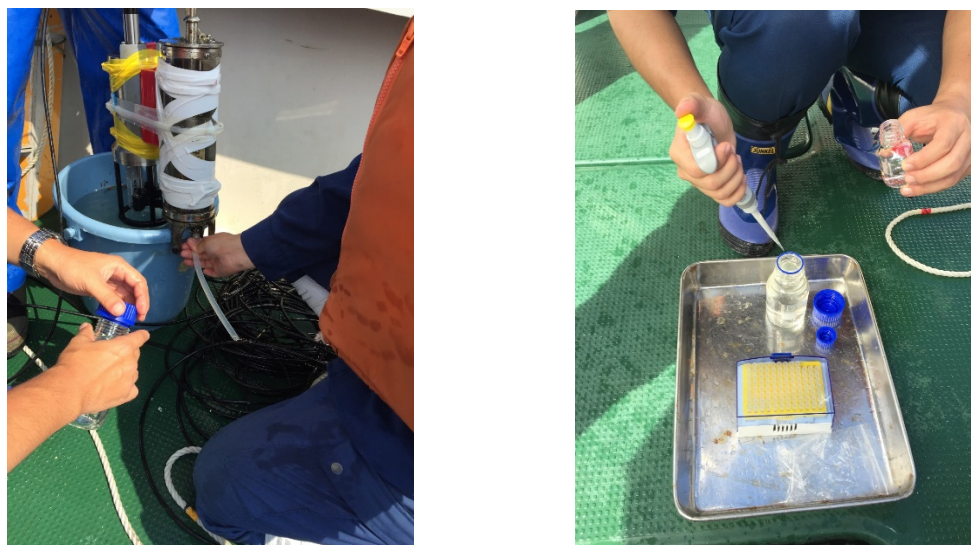


図 2.2 左：採水の様子，右：塩化水銀の添加

### 2-2-3 試薬類

塩化水銀溶液は，サンプル容器中の $\text{CO}_2$ 量が呼吸や光合成，分解などの生物活動によって増減するのを防ぐために添加される．通常は飽和塩化水銀溶液を用いるが，水温が低いと塩化水銀の結晶が析出する恐れがあるため，本研究では 50%飽和溶液を 2 倍量添加する方法をとった．飽和溶液の場合，標準的な添加量はサンプルの体積の 0.02~0.05%である．

### 2-2-4 手順

採水に先立って海水サンプルで採水瓶を 2 回ほど共洗いする．北原式採水器のチューブを採水瓶の底に近づけ，気泡が入らないように満たしていき，少量のサンプルをオーバーフローさせる．冷たい海水が温まって膨張することを考慮し，採水瓶の容量の 1%ほどをヘッドスペース（海水を満たさない部分）として残しておくために，海水を満たした瓶を指で軽くたたきサンプルを少量取り除く．

塩化水銀の添加は低温時の水銀析出を防ぐために 50%飽和溶液を用意し，75mL を 2 度添加することで水銀総量を調節した．



図 2.3 塩化水銀添加後のサンプルの変化

#### 2-2-5 サンプルの保管

採取したサンプルは測定までの間冷暗所に保管し、ビンのねじ口からの空気混入の影響を最小限に抑えるために、採水後一週間以内に測定を完了させた。

#### 2-3 分析方法

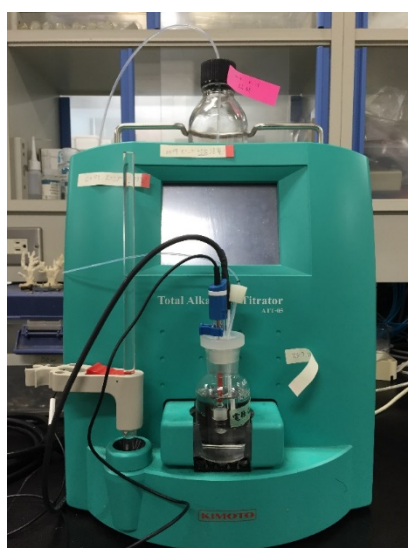


図 2.4 全アルカリ度滴定装置 ATT-05 の全体像

##### 2-3-1 装置の概要

分析装置は紀本電子工業株式会社の全アルカリ度滴定装置 ATT-05 を用いた。本装置は中和滴定の原理に基づいて構成されており、炭酸塩の脱気が完了する pH まで酸を一気に

注入し、CO<sub>2</sub>の脱気を行ってから酸の滴定をするオープンセル法と呼ばれる滴定方法と、酸を滴定し炭酸塩の脱気をモニターすることにより、全炭酸と全アルカリ度を共に求められるクローズドセル法を選択することができる。本研究では全炭酸濃度、全アルカリ度の両方が重要であるため後者を選択した。本測定に先立って、測定精度はDIC,TA それぞれ15μmol/kg以内であることを確認した。

### 2-3-2 試薬

本分析で用いた試薬を表 2.2 に示す。中和滴定に用いる塩酸の濃度は 0.1mol/L が標準である。また、電極の内部液として 3.3mol/L の塩化カリウムが用いられており、時間経過に従って徐々にサンプルへの流出や蒸発によって量が減少していくので、その場合は規定の量まで追加をする。校正用の pH 標準液は pH の値が異なる 2 種を用いて校正した。その後、全炭酸参照物質を用いて精度の確認をした。全炭酸参照物質とは、外洋海水に、ろ過、紫外線照射、塩化水銀（Ⅱ）添加、大気通気による二酸化炭素分圧の大気圧平衡の処理をしたものである。

表 2.2 分析に用いた試薬とその用途

試薬名	用途
0.1 mol/L 塩酸	滴定用
3.3 mol/L 塩化カリウム	電極の内部液交換用
中性リン酸 pH 標準液	pH 校正用
フタル酸塩 pH 標準液	pH 校正用
全炭酸参照物質	精度確認用

### 2-3-3 機械操作手順

ATT-05 の操作手順を表 2.3 に示す。機械はタッチパネル式になっており起動後は測定前の準備として温度校正、pH 校正を行う。その後、サンプル重量やサンプルの塩分を入力し、マグネチックスターラーを投入する。滴定を開始する前にスターラーを回転させて、サンプルが均一に混ざるように 10 秒ほど攪拌する。その後、測定を開始する。

表 2.3 ATT-05 操作手順

① 起動
② 暖機
③ 温度校正
④ pH 校正
⑤ 計測関連設定
⑥ スターラー調整

⑦	滴定試薬導入
⑧	計測情報読み込み（任意）
⑨	測定の開始
⑩	電源オフ

## 2-3-4 測定原理

全アルカリ度は、サンプル 1kg 中のプロトン供与体とプロトン受容体の差と定義されており、

$$\begin{aligned} \text{TA} = & [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{B}(\text{OH})_4^-] + [\text{OH}^-] + [\text{HPO}_4^{2-}] + 2[\text{PO}_4^{3-}] + [\text{H}_3\text{SiO}_4] \\ & + [\text{NH}_3] + [\text{HS}^-] \dots - [\text{H}^+]_{\text{F}} - [\text{HSO}_4^-] - [\text{HF}] - [\text{H}_3\text{PO}_4] + \dots \end{aligned} \quad (2.1)$$

で表される．ここで $[\text{H}^+]_{\text{F}}$ は水素イオンの遊離濃度、省略部分は無視できるほどの小さい物質質量を示している．

また、 $C_{\text{H}}$ を水素イオン濃度（相対的にプロトン状態にある）の分析総濃度と定義すると

$$\begin{aligned} C_{\text{H}} = & [\text{H}^+]_{\text{F}} + [\text{HSO}_4^-] + [\text{HF}] + [\text{H}_3\text{PO}_4] - [\text{HCO}_3^-] - 2[\text{CO}_3^{2-}] - [\text{B}(\text{OH})_4^-] \\ & - [\text{OH}^-] - [\text{HPO}_4^{2-}] - 2[\text{PO}_4^{3-}] - [\text{H}_3\text{SiO}_4] - [\text{NH}_3] - [\text{HS}^-] \end{aligned} \quad (2.2)$$

と表される．

$C_{\text{H}}$ は全アルカリ度TAと溶液の濃度C、サンプル試料の質量 $m_0$ 、酸を滴下したサンプル試料の質量 $m$ から、次式が導かれる．

$$C_{\text{H}} = \frac{-m_0\text{TA} + mC}{m_0 + m} \quad (2.3)$$

これを式（2.2）に代入すると次のように書き換えることができる．

$$\begin{aligned} \frac{-m_0\text{TA} + mC}{m_0 + m} = & [\text{H}^+]_{\text{F}} + [\text{HSO}_4^-] + [\text{HF}] + [\text{H}_3\text{PO}_4] - [\text{HCO}_3^-] - 2[\text{CO}_3^{2-}] \\ & - [\text{B}(\text{OH})_4^-] - [\text{OH}^-] - [\text{HPO}_4^{2-}] - 2[\text{PO}_4^{3-}] - [\text{H}_3\text{SiO}_4] - [\text{NH}_3] \\ & - [\text{HS}^-] \end{aligned} \quad (2.4)$$

ここで、電極の電位からそれぞれのイオンの物質質量を決定するためにネルンストの式(2.5)を用いる．

$$E = E^0 - \left(\frac{RT}{F}\right) \ln[\text{H}^+] \quad (2.5)$$

ここでEは電極電位（mV）、 $E^0$ は標準酸化還元電位（mV）、Rは気体定数（J/K/mol）、Fはファラデー定数（C/mol）である．

これを変形すると $[\text{H}^+]$ は次式のように表される．

$$[\text{H}^+] = \exp\left(\frac{E - E^0}{RT/F}\right) \quad (2.6)$$

式 (2.7) は式 (2.8) のように書き換えることができる (変換方法は第 4 章を参照)。さらに式 (2.6) を代入することにより未知数は TA, TC のみになる。TC は脱気された CO<sub>2</sub> の総量として求められるため、TA も求まる。

$$\begin{aligned} \text{TA} = \text{TC} & \left( \frac{K_1[\text{H}^+] + 2K_1K_2}{[\text{H}^+] + K_1[\text{H}^+] + K_1K_2} \right) + \text{TB} \left( \frac{1}{1 + [\text{H}^+]/K_B} \right) \\ & - \text{TS} \left( \frac{1}{1 + K_s(1 + \text{TS}/K_s)/[\text{H}^+]} \right) - \text{TF} \left( \frac{1}{1 + K_F/[\text{H}^+]} \right) \\ & - \left( \frac{m_0 + m}{m_0} \right) \left( \frac{[\text{H}^+]}{\text{TS}/K_s} - \frac{K_w}{[\text{H}^+]} \right) + \frac{m}{m_0} C \end{aligned} \quad (2.8)$$

### 2-3-5 注意事項

ここで、マニュアルに記載されていない注意事項を記しておく。

- ・電池の交換をする際はコンセントをさして電源をつけたまま行わないと日付データなどが初期化されてしまう。
- ・試薬瓶の位置は本体上部に置くとされているが、そうすると本体の熱が伝わるため好ましくない。横に発泡スチロールなどの断熱材を並べて、その上に試薬瓶を置くことで精度の低下を防げる。その際、試薬瓶はシリンジよりも高い位置に置くこと。
- ・測定中は電極の内部液補充口は常に開けておくこと。保存をする際は付属の青いクリップで栓をし、キャップに内部液 (KCL) を満たして装着。液漏れしないようにパラフィルムで覆うとなお良い。ただし毎日使う場合には酸性にした海水につけておくだけでよい。
- ・機械を長期間使用していなかった場合は再度測定精度を以下のようにして確認する。
  - ①電極をなじませるために、酸性にした海水に浸して 2 日ほど放置。
  - ②温度校正, pH 校正, ビュレットファクターを調整。
  - ③サンプル海水で測定を繰り返し、安定性を確認。
  - ④全炭酸参照物質を用いて測定精度の妥当性を確認。

## 2-4 分析結果

### 2-4-1 第 1 回目 (8 月 19 日)

表 3.1 に第一回目の分析結果を示す。平場に関しては多摩川河口を除いて大きな差はなく、一方窪地に関しては底層部で非常に高い全炭酸濃度が確認された。これは鉛直拡散が起りにくい窪地内部で有機物の分解により発生した二酸化炭素が滞留していたためであると考えられる。

表 2.4 第1回目の分析結果一覧

採水地点	TA ( $\mu\text{mol/kg}$ )	DIC ( $\mu\text{mol/kg}$ )
St.3 表層	2084.15	1630.26
St.3 底層	2155.98	2009.54
St.C4 (千葉航路) 表層	2081.52	1649.29
St.C4 (千葉航路) 底層	2282.91	2245.87
St.19 表層	2102.87	1549.23
St.19 中層	2146.76	1827.29
St.19 底層	2233.61	2112.15
St.29 表層 (多摩川河口)	1719.23	1659.21
St.31 表層	2130.87	1609.79
St.31 中層	2208.31	1989.08
St.31 底層	2254.37	2164.3
St.35 表層	2135.05	1642.14
St.35 底層	2237.32	2093.58
St.38 (幕張窪地) 表層	2071.91	1543.72
St.38 (幕張窪地) 中上層	2195.38	2073.44
St.38 (幕張窪地) 中下層	2535.69	2597.3
St.38 (幕張窪地) 底層	2344.24	2301.62
St.39 (浦安窪地) 表層	2052.93	1596.26
St.39 (浦安窪地) 中層	2199.11	2069.05
St.39 (浦安窪地) 底層	2265.11	2248.35

また、分析により得られた表層 $\text{pCO}_2$ の平面分布を図 3.1 に示す。多摩川河口付近で二酸化炭素を放出、それ以外では吸収していることが見て取れる。

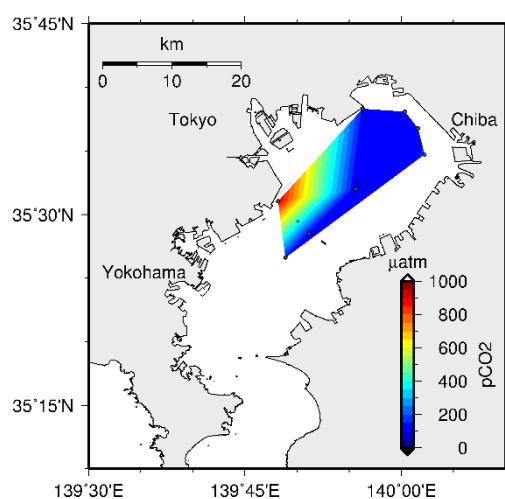


図 2.5 8/19 の分析結果（表層の平面図）

#### 2-4-2 第2回目（9月2日）

表 3.2 に第二回目の分析結果を示す．ほとんどの場所で第一回目の分析結果と同様の傾向がみられた．また，分析により得られた表層の $p\text{CO}_2$ 分布を図 3.2 に示す．

表 2.5 第二回目の分析結果一覧

採水地点	TA ( $\mu\text{mol/kg}$ )	DIC ( $\mu\text{mol/kg}$ )
St.3 表層	1952.39	1427.82
St.3 底層	2050.11	1846.41
St.C4（千葉航路）表層	1898.16	1502.89
St.C4（千葉航路）底層	2233.38	2158.71
St.19 表層	1936.22	1389.86
St.19 底層	2229.92	2116.86
St.29 表層	1553.36	1504.45
St.29 底層	2203.46	2101.3
St.35 表層	2023.98	1689.59
St.35 中層	2156.63	1938.15
St.35 底層	2243.23	2124.96
St.38（幕張窪地）表層	1953.8	1601.01
St.38（幕張窪地）中上層	2271.76	2222.21
St.38（幕張窪地）中下層	2401.6	2455.11
St.38（幕張窪地）底層	2628.5	2718.04
St.39（浦安窪地）表層	1830.88	1527.45
St.39（浦安窪地）中層	2120.44	2011.13

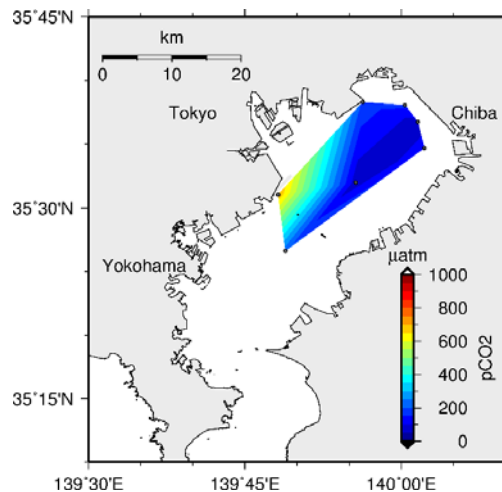


図 2.6 9/2 の結果 (表層の平面図)

### 2-4-3 鉛直分布

分析により得られた鉛直分布のうち平場と窪地で代表的なものを図 3.3 と図 3.4 に示した。平場においては表層の  $p\text{CO}_2$  は非常に小さく、底層に向かうにつれて緩やかに増加していき、最低層ではおよそ  $1000\mu\text{atm}$  になっている。一方で窪地の場合は DO がゼロになる深度よりも下では急激に  $p\text{CO}_2$  が増加しており、その量は平場底層の数倍という非常に高い値となっている。このことから窪地内部における  $p\text{CO}_2$  の増加は溶存酸素濃度の低下と同じプロセス、すなわち底質中有機物の分解に大きく影響を受けると推察できる。

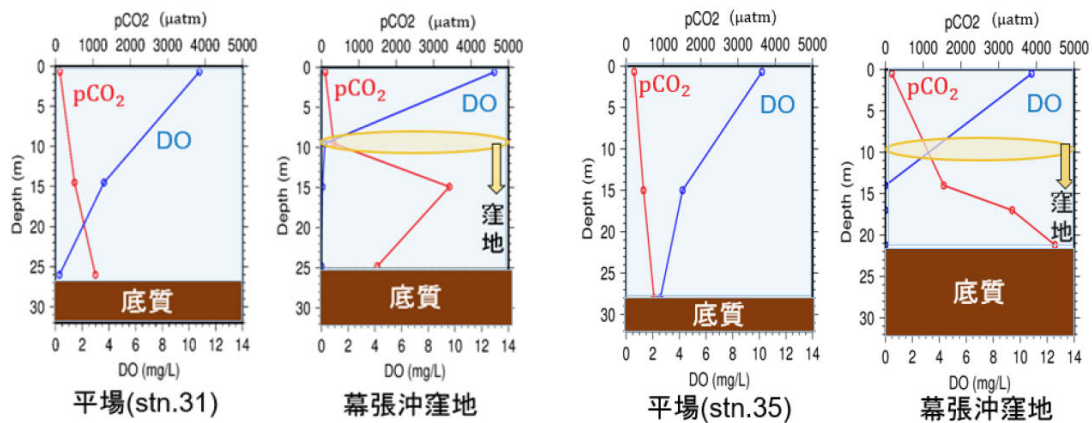


図 2.7 (a) 8/19 の分析結果  
(平場と窪地内の鉛直分布)

(b) 9/2 の分析結果  
(平場と窪地内の鉛直分布)

### 2-5 塩分との相関関係

田口ら (2009) によると、東京湾の表層全アルカリ度、全炭酸濃度は塩分と高い相関があり、一次式で精度よく近似されることが分かっている。しかし、航路や窪地を含む底層の



全アルカリ度、全炭酸濃度と塩分の相関は知られていないので、本研究で得たデータを基に相関図を作成した。

図 3.7, 図 3.8, 図 3.9 をみると、平場の全アルカリ度に関しては鉛直のいずれの層においても塩分との相関が非常に強いことが確認された。一方で全炭酸濃度に関しては相関が弱い、これは表層での二酸化炭素フラックスによる変動分が大きいからであると考えられる。

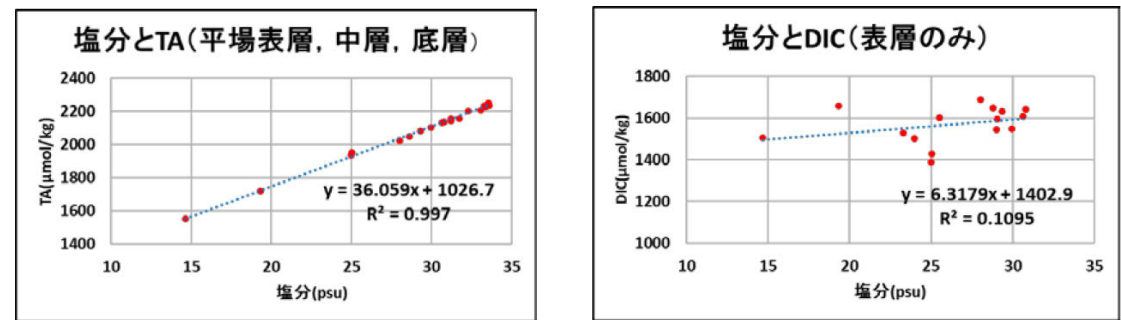


図 2.8 塩分と DIC, TA の相関

また、表 3.3 に地形の特徴と深度で分類した場合の TA, DIC の塩分との相関係数を示した。窪地、航路内部では相関がやや弱くなるものの、平場と同様に塩分との関係性がみられた。

表 2.6 各層における TA, DIC と塩分の相関係数

	TA	DIC
表層	◎ ( $R^2 = 0.99$ )	× ( $R^2 = 0.11$ )
中層	◎ ( $R^2 = 0.99$ )	○ ( $R^2 = 0.80$ )
平場底層	◎ ( $R^2 = 0.99$ )	◎ ( $R^2 = 0.93$ )
窪地、航路	△ ( $R^2 = 0.50$ )	△ ( $R^2 = 0.49$ )

### 第3章 水底質統合モデルの概要

#### 3-1 数値モデルの全体像

##### 3-1-1 水底質統合モデル

本モデルは静水圧近似および Boussinesq 近似を仮定した Navier-Stokes 方程式に基づいて開発された 3 次元流動モデル（佐々木・磯部，2000），波の追算モデル（Achari and Sasaki, 2007），底面摩擦応力モデル（Rasmeemasmuang and Sasaki, 2008），水底質生態系統合モデル（Amunugama and Sasaki, 2015）をベースとし，全アルカリ度，全炭酸濃度をプロセスベースで計算し， $\text{CO}_2$  フラックスの推算をするために構築された。

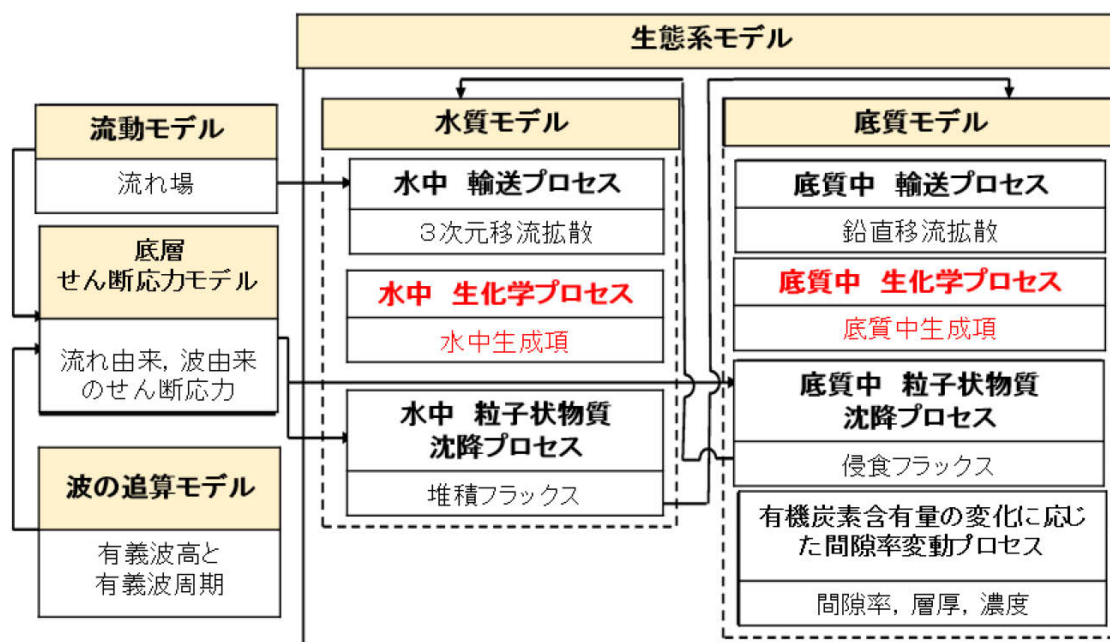


図 3.1 数値モデルの概要

主な状態変数は水温，塩分，分解速度に応じて分類された 3 種の有機炭素，季節性によって分類された 3 種の植物プランクトン，動物プランクトン，溶存酸素（DO），アンモニア態窒素，硝酸態窒素などの栄養塩，溶存態ならびに懸濁態シリカ，そして全アルカリ度，全炭酸濃度である．炭酸系のパラメータである pH と  $\text{pCO}_2$  は TA, DIC から求められるものとし，従属変数には含めなかった．適用した生化学的プロセスは（Di Toro, 2001）や（Ji, 2008）によって定式化された対流モデルを参考にした．

水質モデルは①光合成有効放射（PAR）を計算するモジュール，②3 次元移流拡散モジュール，③生成項計算モジュールの 3 つから構成されており，また底質モデルは①鉛直移流拡散モジュール，②生成項計算モジュールの 2 つから構成されている．

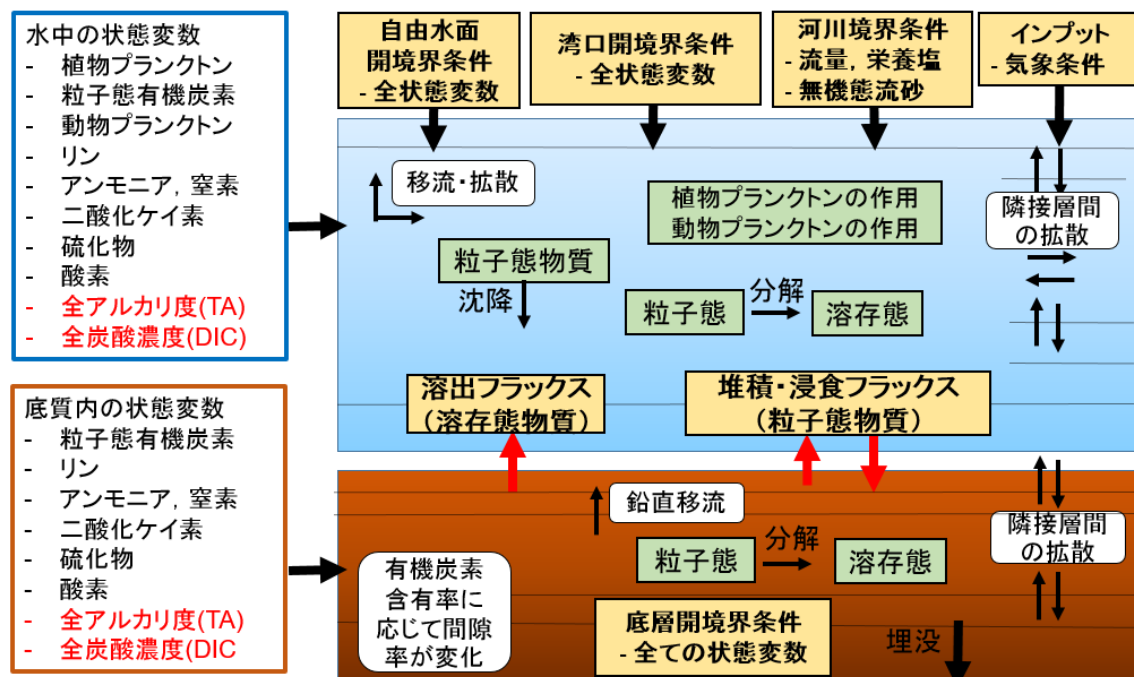


図 3.2 生態系モデルの詳細

プロセスベースによる沿岸生態系モデルは主に、物質の移流といった物理過程、呼吸や増殖などの生物的過程、さらに酸化などの化学的過程を考慮している。それらの一般的な過程に加えて本モデルでは、現地観測によって解明された有機炭素含有率に応じて変化する間隙率（岡田，古川ら，2005）のメカニズムを考慮している。間隙率の変化に応じて底質の有効層の厚さが変化し、その結果としての底質内の栄養塩の濃度変化も考慮している。

水質と底質の生態系プロセスは独立して設計されている。独立した水質の計算，独立した底質の計算，独立した水底質間フラックスの計算を経て，最終的には水底質間をフラックスのやりとりで結合している。

実際の数値計算のフローは図 3.3 で示される。

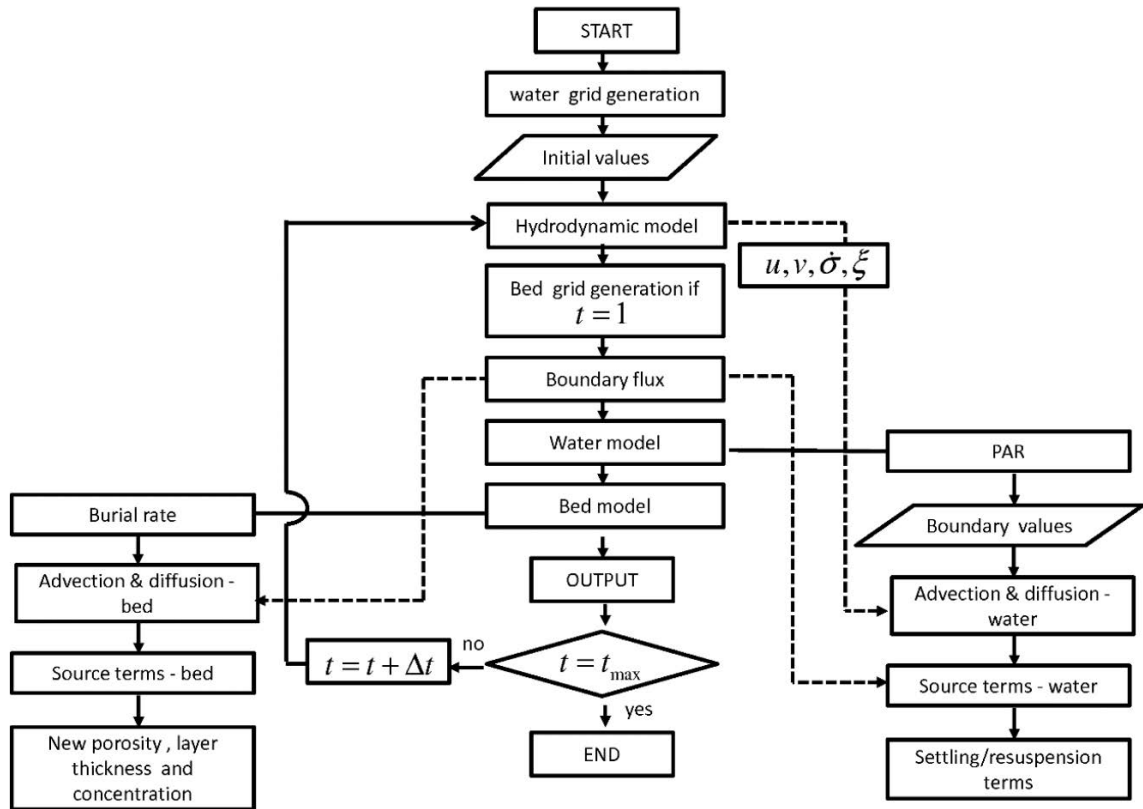


図 3.3 計算フロー (Amunugama, 2015 より引用)

### 3-1-2 東京湾への適用

#### 3-1-2-1 格子の設定

本モデルで用いた格子サイズは水平方向には水中，底質中共に  $2\text{km} \times 2\text{km}$  である．一方鉛直方向にはそれぞれ独立した格子を用いており，水中では 10 層の  $\sigma$  座標系，底質中では異なる層厚の 25 層が用いられている．底質中の層厚は各タイムステップごとの有機炭素含有率に応じて変化する．

#### 3-1-2-2 初期条件

水中の状態変数に関しては観測データを基に空間一様な値を与えており，底質モデルに関しては初期の POCC によって修正される．最初のタイムステップでは POCC は底質の質量の 2% であると仮定した．密度を  $\rho_{st} = 2600.0 \text{ kg/m}^3$  と仮定すると，

$$\frac{m_{poc}}{m_{st}} = \frac{m_{poc}/V_b}{m_{st}/V_b} \quad (3.1.1)$$

$$\frac{m_{poc}}{m_{st}} = \frac{B_{poc}}{B_{st}} \quad (3.1.2)$$

と表される．ここで， $\frac{m_{poc}}{m_{st}}$ がわかれば $\frac{B_{poc}}{B_{st}}$ もわかるので，

$$\begin{aligned}
 B_{st} &= \frac{m_{st}}{V_b} & (3.1.3) \\
 \Leftrightarrow B_{st} &= \frac{V_{st}\rho_{st}}{V_b} \\
 \Leftrightarrow B_{st} &= \frac{(V_b - V_w)\rho_{st}}{V_b} \times 10^3 \\
 \Leftrightarrow B_{st} &= \frac{(V_b - \phi V_b)\rho_{st}}{V_b} \times 10^3 \\
 \Leftrightarrow B_{st} &= (1 - \phi)\rho_{st} \times 10^3 \\
 \Leftrightarrow B_{st\_ini} &= (1 - \phi_{ini})\rho_{st} \times 10^3
 \end{aligned}$$

この式から $B_{st\_ini}$ が求まると， $B_{poc\_ini}$ も分かる．

### 3-1-2-3 境界条件

境界条件は湾口，河川，下水道，自由海面，底質底層において考慮される．12の河川と11の下水道の位置を表3.1に示す．また，流量は図3.4に示す．栄養塩に関してはAmunugama et al. (2015) が用いていた1999年時点でのデータを適用し，流量は2011年度の江戸川，多摩川実測データを適用し，その他の河川については比流量に応じた係数をかけて算出した．また，TAの値は荒川における観測地930 ( $\mu\text{mol/L}$ )，DICは感度分析により得られた値を使用している．

表 3.1 河川，下水の種類と栄養塩濃度

河川名	位置	表記	NH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub>	PO <sub>4</sub>	SiO <sub>2</sub>	DIC	TA
Tsurumi	(6,20)	R10	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Sumida	(9,29)	R12	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Tama	(10,23)	R11	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Ara	(11,29)	R1	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Edo	(13,29)	R2	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Mama	(17,31)	R3	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Ebi	(19,30)	R4	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Yoro	(21,23)	R7	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Obitsu	(14,17)	R8	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Koito	(11,13)	R9	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
Murata	(22,24)	R6	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930

Hanami	(21,29)	R5	5.0	300.0	1.5	175.0	1130	930
下水 1	(12,28)	S1	1200.0	0.0	30.0	0.0	1130	930
下水 2	(10,26)	S10	1060.0	0.0	20.0	0.0	1130	930
下水 3	(9,28)	S11	1326.0	0.0	31.0	0.0	1130	930
下水 4	(21,24)	S3	1146.0	0.0	62.0	0.0	1130	930
下水 5	(21,28)	S2	1144.0	0.0	22.0	0.0	1130	930
下水 6	(10,22)	S9	3401.0	0.0	18.0	0.0	1130	930
下水 7	(5,10)	S6	1215.0	0.0	48.5	0.0	1130	930
下水 8	(4,20)	S8	911.0	0.0	35.0	0.0	1130	930
下水 9	(4,15)	S7	1051.0	0.0	35.0	0.0	1130	930
下水 10	(8,8)	S5	487.0	0.0	30.0	0.0	1130	930
下水 11	(10,13)	S4	4200.0	0.0	5.0	0.0	1130	930

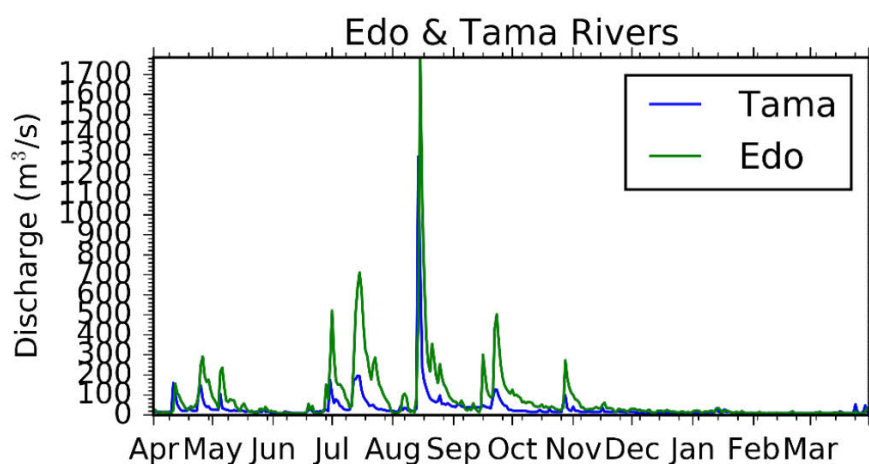


図 3.4 河川流量の一例

#### 3-1-2-4 タイムステップと出力

計算のタイムステップは CFL 条件を満たすように 100 秒に設定した．

$$\Delta t \leq \frac{\Delta L}{\sqrt{gD}} \quad (3.1.4)$$

ここで， $\Delta L$ は格子サイズ， $D$ は水深， $g$ は重力加速度である．例えば 2000m の格子で水深が 15m だとする，CFL 条件は

$$\begin{aligned} \Delta t &\leq \frac{2000}{\sqrt{9.81 \times 15}} \\ &\Leftrightarrow \Delta t \leq 165s \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

のように数値計算の安定性を満たすタイムステップの上限が決まる。

### 3-1-2-5 外力とモデルの妥当性

本モデルで使用した 2011 年 4 月～2012 年 3 月の気象条件，潮位を図 4.5 に示す

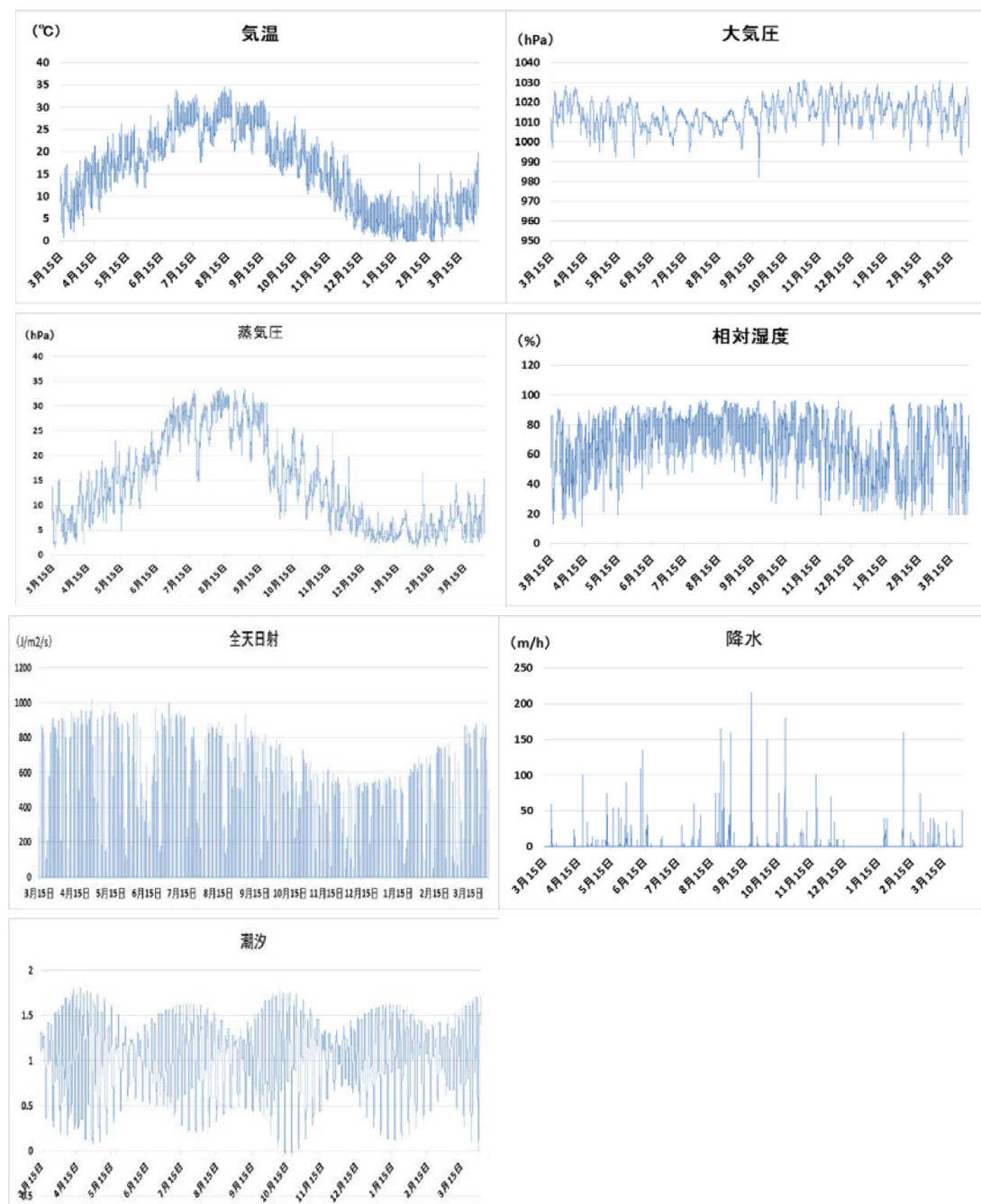


図 3.5 気象条件，潮位

### 3-2 流動モデル，波浪追算モデル，底層せん断応力モデル

#### 3-2-1 流動モデル

デカルト座標系における運動量保存則，静水圧を仮定した基本式に基づく準3次元流動モデル（佐々木・磯部，2000）が適用されている．内湾における3次元の流れ場は Navier-Stokes の運動量式，連続式，および密度を決定する状態方程式により記述される．今，図 5-1 に示すように静水面を基準として水平方向に  $x, y$  軸，鉛直上向きに  $z$  軸を取るデカルト座標系を考えると，以上の方程式は次のようになる．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = fv - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + A_h \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( A_v \frac{\partial u}{\partial z} \right) \quad (3.2.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -fu - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + A_h \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( A_v \frac{\partial v}{\partial z} \right) \quad (3.2.2)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g + A_h \left( \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( A_v \frac{\partial w}{\partial z} \right) \quad (3.2.3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (3.2.4)$$

$$\rho - 1000 = 20.99 + \{-4.3 \times 10^{-3} \times (T - 20) - 0.256\}(T - 20) + \{2.3 \times 10^{-4} \times (S - 30) - 1.53 \times 10^{-3} \times (T - 20) + 0.7577\}(S - 30) \quad (3.2.5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} = K_h \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_v \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{\rho C_p} \frac{dq_r(z)}{dz} \quad (3.2.6)$$

$$q_r(z) = (1 - A)(1 - \beta)Q_A \exp(\alpha z) \quad (3.2.7)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial S}{\partial x} + v \frac{\partial S}{\partial y} + w \frac{\partial S}{\partial z} = K_h \left( \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_v \frac{\partial S}{\partial z} \right) \quad (3.2.8)$$

ここに  $u, v, w$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向の流速， $f$  はコリオリ係数， $p$  は水面を基準とした圧力， $\rho$  は密度， $g$  は重力加速度， $A_h$  および  $A_v$  はそれぞれ水平及および鉛直方向の渦動粘性係数である．また， $T, q_r, A, \beta, Q_A, \alpha$  および  $C_p$  はそれぞれ，水温，短波放射による水中熱フラックス，アルベード，水中熱フラックスのうち水面近傍で吸収される割合，水面での短波放射，短波放射の水中での消散係数，および比熱であり， $K_h$  および  $K_v$  はそれぞれ水平および鉛直方向の渦動拡散係数， $S$  は塩分である．また，状態方程式は密度の単位として  $\text{kg/m}^3$ ，水温を  $^{\circ}\text{C}$ ，塩分を ‰（または，psu）で表した場合のものである．

内湾域は水平スケールに比べて鉛直スケールが一般に小さいことから，鉛直方向の運動量式における加速度項と粘性項は重力加速度に比べて無視できると仮定し（静水圧近似），方程式を簡略化している．このとき式 (3.2.3) は

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} - g \quad (3.2.9)$$



と近似できる．さらに， $\rho$ および $p$ を参照値 $\rho_0, p_0$ （共に一定値）と，塩分や水温によって変化する偏差分 $\rho', p'$ によってあらわすと，

$$\rho = \rho_0 + \rho' \quad (3.2.10)$$

$$p = p_0 + p' \quad (3.2.11)$$

となる．水面 $z = \zeta$ における大気圧を 0 とすると，式 (3.2.9) は

$$p_0(z) = \rho_0 g (\zeta - z) \quad (3.2.12)$$

$$0 = -\frac{\partial p'}{\partial z} - \rho' g \quad (3.2.13)$$

となる．式 (3.2.13) を $z$ から $\zeta$ まで積分することにより， $z$ における $p'$ は次式のようになる．

$$p' = \int_z^\zeta \rho' g dz \quad (3.2.14)$$

式 (3.2.12) および式 (3.2.14) を式 (3.2.12) に代入して得られる $p$ を式 (3.2.1) および (3.2.2) に代入し，密度の変化は十分に小さいことから，浮力項以外の密度変化を無視し，さらに非圧縮性流体における連続式が適用できるとする Boussinesq 近似を勝ておすると，基礎方程式 (3.2.1) ～ (3.2.4) は次のようになる．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} \quad (3.2.15)$$

$$= f v - g \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x} \int_z^\zeta \rho' dz + A_h \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( A_v \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} \quad (3.2.16)$$

$$= -f u - g \frac{\partial \zeta}{\partial y} - \frac{g}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial y} \int_z^\zeta \rho' dz + A_h \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( A_v \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (3.2.17)$$

これらの方程式を次節以降で述べる境界条件の下で解けば流れ場が得られるが，一般に解析的に解くことは不可能であり，様々な数値解析法が提案されている．

### 3-2-1-1 境界条件

#### 3-2-1-1-1 運動量

運動量式においては，風による摩擦応力 $\tau^s$ および海底摩擦応力 $\tau^b$ を考慮し，

$$\rho A_v \frac{\partial u}{\partial z} = \tau_x^s, \quad \rho A_v \frac{\partial v}{\partial z} = \tau_y^s \quad (3.2.18)$$

$$\rho A_v \frac{\partial u}{\partial z} = \tau_x^b, \quad \rho A_v \frac{\partial v}{\partial z} = \tau_y^b \quad (3.2.19)$$

とする．ここに，添字 $x, y$ はそれぞれ $x, y$ 方向成分を表す．また，側壁境界については，水平格子サイズが大きいことから，摩擦を 0 とする **slip condition** を採用する．湾口の開境界においては潮汐を考慮するために時々刻々の潮位を与える．

### 3-2-1-1-2 塩分場

海底や側面等の固体境界においてはそれに垂直な方向 ( $n$ ) の塩分勾配を 0，すなわち， $\partial S / \partial n = 0$  とする．また，湾口開境界においては水深に応じて変化する塩分の断面分布を与えた．

水面において塩分場に影響を与えるものは降水と蒸発であり，以下のようにモデル化することができる．

$$-K_v \frac{\partial S}{\partial z} = S(P_{rct} - E_{vap}) \quad (3.2.20)$$

ここに， $P_{rct}$ および $E_{vap}$ はそれぞれ単位時間当たりの降水量および蒸発量である．降水量は気象庁のデータにより毎時の値を知ることができる．蒸発量 $E_{vap}$ に関しては，次のバルク公式（近藤編，1994）により計算することが可能である．

$$E_{vap} = \rho_a C_E U (q_s - q) \quad (3.2.21)$$

ここに， $\rho_a$ は空気の密度， $C_E$ は無次元の係数でおよそ $1.2 \times 10^{-3}$ 程度の値を取るが，大気の安定度や風速に依存すると考えられている．また， $U$ は海面上 10m における風速， $q$ および $q_s$ はそれぞれ大気中の比湿および水面温度 $T_s$  (°C) に対する飽和比湿で，海面上における大気圧を $p_a$ ，大気の水蒸気圧を $E_a$ ，水面温度での飽和水蒸気圧を $E_s$ とすれば以下のようにかける．

$$q = \frac{0.622 \left( \frac{E_a}{p_a} \right)}{1 - 0.378 \left( \frac{E_a}{p_a} \right)}, \quad q_s = 0.98 \frac{0.622 \left( \frac{E_s}{p_a} \right)}{1 - 0.378 \left( \frac{E_s}{p_a} \right)} \quad (3.2.22)$$

ただし， $E_s$ は Tetens の近似式（近藤編，1994）により次のように計算される．

$$E_s = 6.1078 \times 10^{7.5T_s / (237.3 + T_s)} \quad (3.2.23)$$

### 3-2-1-1-3 水温場

海底や壁面等の固体境界においてはそれに垂直な方向 ( $n$ ) の温度勾配を 0，すなわち， $\partial T / \partial n = 0$  とする．

水面においては，短波放射 $Q_A$ ，長波放射 $Q_B$ ，蒸発による潜熱輸送 $Q_e$ ，および大気との接触による顕熱輸送 $Q_h$ によって決まる熱収支 $Q_s$ を考慮することにより，

$$-k_v \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{Q_s}{\rho C_p} \quad (3.2.24)$$

$$Q_s = (1 - A)Q_A - Q_B - Q_e - Q_h \quad (3.2.25)$$

と設定する．ここに $A$ はアルベード（反射率）である．水面および水中における熱フラックスを模式的に描いたものを図に示す．

各熱フラックスについてはそれぞれ以下のようなバルク公式によって推定することが可能である．

$$Q_B = s\sigma_v\{T_s^4(0.39 - 0.058\sqrt{E_a}) + 4T_a^3(T_s - T_a)\}(1 - 0.83c) \quad (3.2.26)$$

$$Q_e = \nu E_{vap}, \quad \nu = 2.50 \times 10^6 - 2400T_s \quad (3.2.27)$$

$$Q_h = c_p \rho_a C_H U (T_s - T_a) \quad (3.2.28)$$

ここに、 $T_a$ 、 $T_s$ は絶対温度で表した気温と海面水温、 $E_a$ は hpa で表した大気水蒸気圧、 $c$ は 0~1 で表した雲量（0 が快晴）である．また、 $s$ および $\sigma_v$ はそれぞれ黒体放射と太陽放射の比およびステファン・ボルツマン定数、 $\nu$ 、 $c_p$ 、 $C_H$ および $U$ はそれぞれ $T_s$ （K）の水の昇化潜熱（J kg<sup>-1</sup>）、空気の低圧比熱（1006 J K<sup>-1</sup> kg<sup>-1</sup>）、顕熱輸送係数（ $\approx C_E$ ）、および海面上 10m での風速である．

#### -3-2-1-1-4 $\sigma$ 座標系

$\sigma$ 座標系は図に示すように水面を $z = \zeta$ 、底面を $z = -h$ とする通常のデカルト座標系における $z$ 座標を、水面で $\sigma=1$ 、底面で $\sigma=0$ のように規格化するもので、座標変換式は次のようになる．

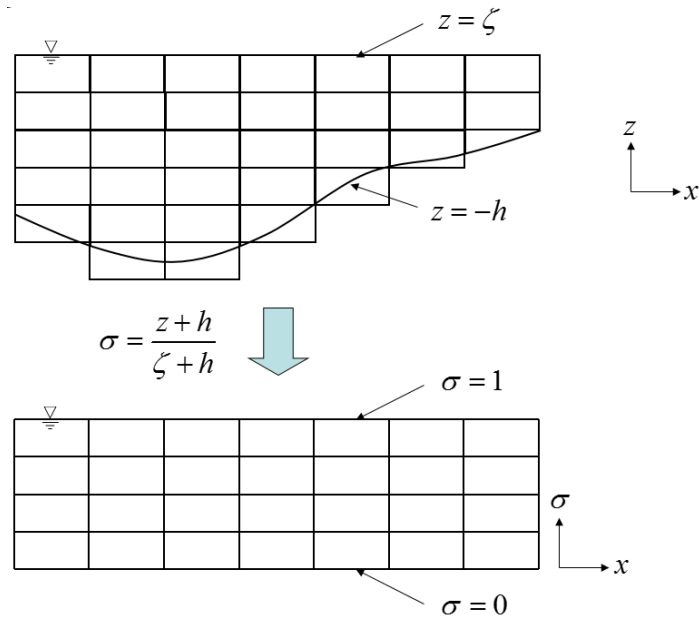


図 3.6  $\sigma$ 座標系の概要

$$\sigma = \frac{z+h}{h+\zeta} \quad (3.2.29)$$

今，変数 $\phi(x,y,z,t)$ を考えるとき，鉛直方向の微分は次のように変換される．

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} = \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial z} = \frac{1}{D} \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \quad (3.2.30)$$

ここに $D = h + \zeta$  である．次に $\sigma$ 座標系における $x$ 方向の偏微分は

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{\sigma} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\phi_2 - \phi_1}{\Delta x} \quad (3.2.31)$$

となる．一方，

$$\frac{\phi_3 - \phi_1}{\Delta x} = \frac{\phi_2 - \phi_1}{\Delta x} - \frac{\phi_2 - \phi_3}{\Delta x} \cdot \frac{\Delta z}{\Delta x} \quad (3.2.32)$$

であるから， $\Delta x \rightarrow 0$ ， $\Delta z \rightarrow 0$  とすると，

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{y,z,t} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{y,\sigma,t} - \left. \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|_{x,y,t} \left. \frac{\partial z}{\partial x} \right|_{y,\sigma,t} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{y,\sigma,t} - \frac{1}{D} \left( \sigma \frac{\partial D}{\partial x} - \frac{\partial h}{\partial x} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \quad (3.2.33)$$

が成り立つ．ここに，添字はその添字の独立変数を一定に保って微分を取ることを意味する．さらに，時間微分に関しては次のように変換される．

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{x,y,z} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{x,y,\sigma} + \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{x,y,\sigma} - \frac{\sigma}{D} \frac{\partial \zeta}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \quad (3.2.34)$$

この時，静水圧近似および Boussinesq 近似の下での運動量式 (3.2.15)，(3.2.16) は，Mellor and Blumberg (1985) による考察に基づいて水平粘性項の高次の項を省略し，また圧力勾配項を除いて，次のように変換される．

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + \dot{\sigma} \frac{\partial u}{\partial \sigma} = f v - \frac{1}{\rho_0} \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{y,z,t} + \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( A_v \frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) + A_h \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (3.2.35)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \dot{\sigma} \frac{\partial v}{\partial \sigma} \quad (3.2.36)$$

$$= -f u - \frac{1}{\rho_0} \left. \frac{\partial p}{\partial y} \right|_{y,z,t} + \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( A_v \frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) + A_h \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$$

ここに， $A_h$ および $A_v$ はそれぞれ水平および鉛直渦動粘性係数であり， $\dot{\sigma}$ は $\sigma$ 座標系における鉛直流速に相当するもので，次式のようになる．

$$\dot{\sigma} = \frac{\partial \sigma}{\partial t} + u \frac{\partial \sigma}{\partial x} + v \frac{\partial \sigma}{\partial y} + w \frac{\partial \sigma}{\partial z} \quad (3.2.37)$$

また，連続式 (3.2.17) は次のように変換される．

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial(Du)}{\partial x} + \frac{\partial(Dv)}{\partial y} + D \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial z} = 0 \quad (3.2.38)$$

水平圧力勾配項は以下のようにして $\sigma$ 座標系に変換することができる．今， $\nabla$ を水平方向の微分演算子とし， $\nabla \equiv (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$ であるとする． $z$ 座標系におけるものには添え字 $z$ を， $\sigma$ 座標系におけるものには添え字 $\sigma$ をつけると，圧力勾配項は次式のように変換される．

$$\nabla_z p = \nabla_\sigma p - \frac{\partial \sigma}{\partial z} (\nabla_\sigma z) \frac{\partial p}{\partial \sigma} \quad (3.2.39)$$

一方，静水圧近似を仮定すると，デカルト座標系においては

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -\rho g \quad (3.2.40)$$

となるから $\sigma$ 座標系では

$$\frac{\partial p}{\partial \sigma} = -\rho g \frac{\partial z}{\partial \sigma} \quad (3.2.41)$$

のように変換される．式 (3.2.41) を式 (3.2.39) に代入すると次式が得られる．

$$-\frac{1}{\rho} \nabla_z p = -\frac{1}{\rho} \left\{ \nabla_\sigma p - \frac{\partial \sigma}{\partial z} (\nabla_\sigma z) \left( -\rho g \frac{\partial z}{\partial \sigma} \right) \right\} = -\frac{1}{\rho} \nabla_\sigma p - g \nabla_\sigma z \quad (3.2.42)$$

次に， $p$ および $\rho$ を $p = p_0 + p'$ および $\rho = \rho_0 + \rho'$ のように参照量とそれらの偏差に分けると，

$$\nabla_\sigma p = \nabla_\sigma p_0 + \nabla_\sigma p' = \nabla_\sigma (\rho_0 g (\zeta - z)) + \nabla_\sigma p' = \rho_0 g (\nabla_\sigma \zeta - \nabla_\sigma z) + \nabla_\sigma p' \quad (3.2.43)$$

$$\rho \nabla_\sigma z = \rho_0 \nabla_\sigma z + \rho' \nabla_\sigma z \quad (3.2.44)$$

となるから，圧力勾配項は次式のように変換される．

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\rho} \nabla_z p &= -\frac{1}{\rho} \{ \rho_0 g (\nabla_\sigma \zeta - \nabla_\sigma z) + \nabla_\sigma p' \} - g \left\{ \frac{\rho_0}{\rho} \nabla_\sigma z + \frac{\rho'}{\rho} \nabla_\sigma z \right\} \\ &= -\frac{1}{\rho} \rho_0 g \nabla_\sigma \zeta - \frac{1}{\rho} \nabla_\sigma p' - \frac{1}{\rho} \rho' g \nabla_\sigma z \\ &= -\frac{\rho_0 g}{\rho} \nabla_\sigma \zeta - \frac{\rho' g}{\rho} \sigma \nabla_\sigma \zeta - \frac{\rho' g}{\rho} \sigma \nabla_\sigma h - \frac{1}{\rho} \nabla_\sigma \left[ D \int_\sigma^1 \rho' g d\sigma \right] \\ &= -\frac{g}{\rho} (\rho_0 + \rho' \sigma) \nabla_\sigma \zeta - \frac{\rho' g}{\rho} (\sigma - 1) \nabla_\sigma h - \frac{1}{\rho} \nabla_\sigma \left[ D \int_\sigma^1 \rho' g d\sigma \right] \end{aligned} \quad (3.2.45)$$

次に，移流項における運動量保存則が差分式においても満たされるように，式 (3.2.35) および (3.2.36) の移流項を以下のようにして保存型に変換する．式 (3.2.35) の左辺に $D$ をかけ，連続式 (3.2.38) に $u$ をかけたものを加えると，移流項は

$$\begin{aligned}
& D \frac{\partial u}{\partial t} + (Du) \frac{\partial u}{\partial x} + (Dv) \frac{\partial u}{\partial y} + (D\sigma) \frac{\partial u}{\partial \sigma} + u \left\{ \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial(Du)}{\partial x} + \frac{\partial(Dv)}{\partial y} + D \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial \sigma} \right\} \\
&= \frac{\partial D}{\partial t} + D \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial(Du)}{\partial x} + (Du) \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial(Dv)}{\partial y} + (Dv) \frac{\partial u}{\partial y} + (D\sigma) \frac{\partial u}{\partial \sigma} + (Du) \frac{\partial \dot{\sigma}}{\partial \sigma} \\
&= \frac{\partial(Du)}{\partial t} + \frac{\partial(Duu)}{\partial x} + \frac{\partial(Duv)}{\partial y} + \frac{\partial(D\dot{\sigma}u)}{\partial \sigma}
\end{aligned} \tag{3.2.46}$$

のように保存系に変換することができる。

以上により， $\sigma$ 座標系における運動量式は次のようになる。

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial(Du)}{\partial t} + \frac{\partial(Duu)}{\partial x} + \frac{\partial(Duv)}{\partial y} + \frac{\partial(D\dot{\sigma}u)}{\partial \sigma} \\
&= Dfv - \frac{gD}{\rho} \{ (\rho_0 + \rho'\sigma) \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \rho'(\sigma - 1) \frac{\partial h}{\partial x} \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial x} \left[ D \int_{\sigma}^1 \rho' g d\sigma \right] \} + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( A_v \frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) + D A_h \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)
\end{aligned} \tag{3.2.47}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial(Dv)}{\partial t} + \frac{\partial(Duv)}{\partial x} + \frac{\partial(Dvv)}{\partial y} + \frac{\partial(D\dot{\sigma}v)}{\partial \sigma} \\
&= -Dfu - \frac{gD}{\rho} \{ (\rho_0 + \rho'\sigma) \frac{\partial \zeta}{\partial y} + \rho'(\sigma - 1) \frac{\partial h}{\partial y} \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial y} \left[ D \int_{\sigma}^1 \rho' g d\sigma \right] \} + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( A_v \frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) + D A_h \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)
\end{aligned} \tag{3.2.48}$$

次に以下のように連続式を変形することにより， $\dot{\sigma}$ を求める。

$\sigma$ 座標系における連続式 (3.2.38) を鉛直方向に 0~1 まで積分すると，

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \int_0^1 \frac{\partial(Du)}{\partial x} d\sigma + \int_0^1 \frac{\partial(Dv)}{\partial y} d\sigma = 0 \tag{3.2.49}$$

となる。一方，連続式 (3.2.38) を 0~ $\sigma$ まで鉛直方向に積分すると，

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} \sigma + \int_0^{\sigma} \frac{\partial(Du)}{\partial x} d\sigma + \int_0^{\sigma} \frac{\partial(Dv)}{\partial y} d\sigma + D\dot{\sigma} = 0 \tag{3.2.50}$$

が得られる。式 (3.2.49) と (3.2.50) から  $\partial \zeta / \partial t$  を消去すれば，

$$\dot{\sigma} = \frac{1}{D} \left[ \sigma \int_0^1 \frac{\partial(Du)}{\partial x} d\sigma + \sigma \int_0^1 \frac{\partial(Dv)}{\partial y} d\sigma - \int_0^{\sigma} \frac{\partial(Du)}{\partial x} d\sigma - \int_0^{\sigma} \frac{\partial(Dv)}{\partial y} d\sigma \right] \tag{3.2.51}$$

が得られる。水温，塩分場に関しても同様に $\sigma$ 座標系に変換することができる。

$$\frac{\partial(DT)}{\partial t} + \frac{\partial(DuT)}{\partial x} + \frac{\partial(DvT)}{\partial y} + \frac{\partial(D\dot{\sigma}T)}{\partial \sigma} \quad (3.2.52)$$

$$= \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( K_v \frac{\partial(DT)}{\partial \sigma} \right) + DK_h \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\rho C_p} \frac{dq(\sigma)}{d\sigma}$$

$$\frac{\partial(DS)}{\partial t} + \frac{\partial(DuS)}{\partial x} + \frac{\partial(DvS)}{\partial y} + \frac{\partial(D\dot{\sigma}S)}{\partial \sigma} \quad (3.2.53)$$

$$= \frac{1}{D^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left( K_v \frac{\partial(DS)}{\partial \sigma} \right) + DK_h \left( \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} \right)$$

先において、 $z$ 座標系における境界条件を与えたが、ここではそれらのうち運動量に関する境界条件を $\sigma$ 座標系に変換し、さらに各応力について具体的な表示を与える。水温、塩分場に関する境界条件もまったく同様にして $\sigma$ 座標系に変換することができる。

$$A_v \frac{\partial u}{\partial \sigma} = D \frac{\tau_x^b}{\rho}, \quad A_v \frac{\partial v}{\partial \sigma} = D \frac{\tau_y^b}{\rho}, \quad \dot{\sigma} = 0 \quad (3.2.54)$$

となる。また、水面 $\sigma=1$ における風応力および $\dot{\sigma}$ における境界条件は

$$A_v \frac{\partial u}{\partial \sigma} = D \frac{\tau_x^s}{\rho}, \quad A_v \frac{\partial v}{\partial \sigma} = D \frac{\tau_y^s}{\rho}, \quad \dot{\sigma} = 0 \quad (3.2.55)$$

となる。ここで、各応力は以下のようにモデル化する。

$$\tau_x^b = \rho \gamma_b^2 u \sqrt{u^2 + v^2}, \quad \tau_y^b = \rho \gamma_b^2 v \sqrt{u^2 + v^2} \quad (3.2.56)$$

$$\tau_x^s = \tau_s \cos \theta, \quad \tau_y^s = \tau_s \sin \theta, \quad \tau_s = \rho_a C_f U_{10}^2 \quad (3.2.57)$$

ここで、 $\gamma_b^2$ は海底摩擦係数で一般に 0.0026 の値が用いられる。また、 $\tau_s$ は風による水面摩擦応力で、 $\theta$ は風向きの $x$ 軸からの角度、 $\rho_a$ は空気の密度、 $U_{10}$ は海上 10m における風速、 $C_f$ は摩擦係数である。

### 3-2-1-2 計算スキーム

一般的に数値解析は陽解法と陰解法に分類できる、陽解法は連立方程式を解く必要がなく、1 タイムステップあたりの計算時間は短い、安定性に欠け、積分時間間隔 $\Delta t$ を現象のタイムスケールから必要とされるよりもはるかに小さく取らなければならない場合が多く、効率的でない。一方、陰解法の場合はこれらの制約条件がなく、大きな $\Delta t$ を採用できる場合が多いが、一般に連立方程式を解かなければならなくなり、1 タイムステップあたりの計算時間は長くなる。

本モデルでは水位 $\zeta$ 、鉛直移流および鉛直粘性項を陰差分、その他を陽差分とする半陰解法を適用する。

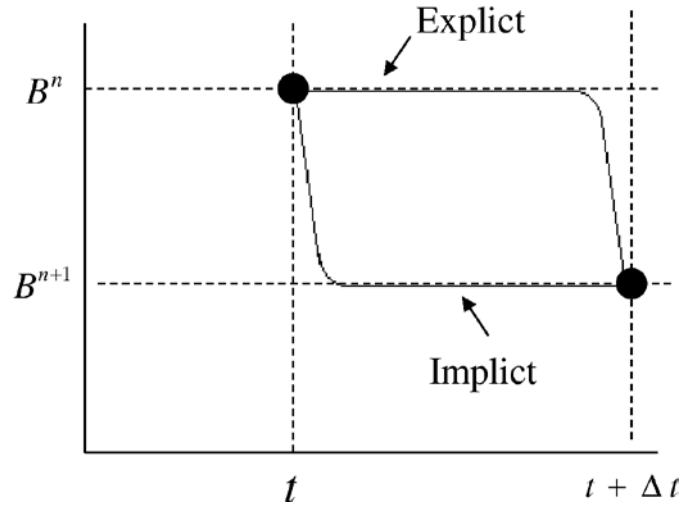


図 3.7 陽解法と陰解法のイメージ

### 3-2-1-3 格子システム

スカラー量は格子の中心で定義し，速度は格子の境界で定義する図 5.3 に示すスタaggerド格子を採用している．

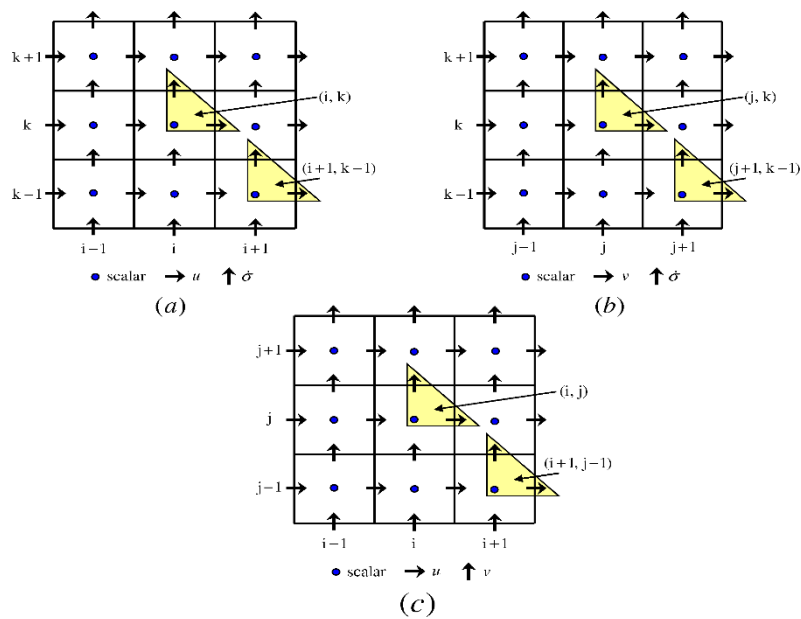


図 3.8 スタaggerド格子

### 3-2-2 波浪追算モデル

波浪追算モデルは，Achari and Sasaki(2007), Rasmeemasmuang and Sasaki(2008), Attari and Sasaki(2012)によって開発されたモデルを適用した．これは浅海域と深海域のどちらにも対応し，時空間的な有義波高，有義波周期の計算が可能である．



波の発達パターンはフェッチびよる制限と、風の吹送時間による制限の組み合わせによって特徴づけられるとされている。フェッチの制限に関しては、波高がフェッチの終端で平衡状態に達するのに十分な距離を風が吹くとするものであり、一方吹送時間の制限に関しては、風の吹送時間が波高の発達を制限するというものである。

フェッチ制限の下での有義波高 $H_w(m)$ 、有義波周期 $T_w(s)$ 、吹送時間 $t_w(s)$ 、は式(3.2.58)、(3.2.59)、(3.2.60)によって計算される。

$$\frac{gH_w}{U_w^2} = 1.6 \times 10^{-3} \left( \frac{gF_w}{U_w^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.58)$$

$$\frac{gT_w}{U_w} = 2.857 \times 10^{-1} \left( \frac{gF_w}{U_w^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.2.59)$$

$$\frac{gt_w}{U_w} = 6.88 \times 10 \left( \frac{gF_w}{U_w^2} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3.2.60)$$

ここで、 $F_w$ は想定している地点でのフェッチ (m) である。(Achiari and Sasaki, 2007)  
また $U_w^2$ は海面 10m における風速 (m/s)、 $g$ は重力加速度である。これらの式は、波の状態が完全に考慮され、実際の風の吹送時間が $t_w$ よりも長いときは以下のように表しても妥当であることが確かめられている。

$$\frac{gH_w}{U_w^2} = 2.433 \times 10^{-1} \quad (3.2.61)$$

$$\frac{gT_w}{U_w} = 8.134 \quad (3.2.62)$$

$$\frac{gt_w}{U_w} = 7.15 \times 10^4 \quad (3.2.63)$$

浅海域における波の成長パターンは、風の応力による波エネルギーの増加または底面摩擦による波エネルギーの減少という過程に基づいている。これらの過程から、次の関係式によって有義波高 $H_w(m)$ 、有義波周期 $T_w(s)$ 、吹送時間 $t_w(s)$ が計算できる。

$$\frac{gH_w}{U_w^2} = 0.283 \tanh \left[ 0.530 \left( \frac{gh}{U_w^2} \right)^{\frac{3}{4}} \tanh \left\{ \frac{0.00565 \left( \frac{gF_w}{U_w^2} \right)^{\frac{1}{2}}}{\tanh \left[ 0.530 \left( \frac{gh}{U_w^2} \right)^{\frac{3}{4}} \right]} \right\} \right] \quad (3.2.64)$$

$$\frac{gT_w}{U_w} = 7.54 \tanh \left[ 0.833 \left( \frac{gh}{U_w^2} \right)^{\frac{3}{8}} \tanh \left\{ \frac{0.0379 \left( \frac{gF_w}{U_w^2} \right)^{\frac{1}{3}}}{\tanh \left[ 0.833 \left( \frac{gh}{U_w^2} \right)^{\frac{3}{8}} \right]} \right\} \right] \quad (3.2.65)$$

$$\frac{gt_w}{U_w} = 537 \left( \frac{gT_w}{U_w} \right)^{\frac{7}{3}} \quad (3.2.66)$$

深海の場合と同様に，上記の式 (3.2.64)，(3.2.65)，(3.2.66) は実際の風の吹送時間が $t_w$ よりも長いときのみ妥当性がある．

$$L_w = \frac{gT_w^2}{2\pi} \tanh\left(\frac{2\pi h}{L_w}\right) \quad (3.2.67)$$

式 (3.2.67) は反復法を用いて解かなければならないため，(Goda, 2010) によって提唱された式 (3.2.68) で表される陽解法を適用する．

$$L_w = \frac{2\pi h}{\sqrt{(\Omega(\Omega + \frac{1}{1 + \Omega(0.6522 + \Omega(0.4622 + \Omega^2(0.0864 + 0.0675\Omega)))})})}} \quad (3.2.68)$$

ここで

$$\Omega = \frac{4\pi^2 h}{gT_w^2} \quad (3.2.69)$$

である．

### 3-2-3 底面せん断応力モデル

底質の空間分布をモデル化するために，底面せん断応力(Bed shear stress)の正確なモデル化は非常に重要である．BSS は (Rasmeemasmuang and Sasaki, 2008) や (Attari and Sasaki, 2012) などによって提唱された方法をモデルに適用している． $\vec{\tau}_b$ は波由来の応力 $\vec{\tau}_w$ と流れ由来の応力 $\vec{\tau}_c$ のベクトル和として表される．

$$\vec{\tau}_b = \vec{\tau}_w + \vec{\tau}_c \quad (3.2.70)$$

$\vec{\tau}_w$ と $\vec{\tau}_c$ の振幅は次の方程式で表される．

$$\vec{\tau}_c = \rho C_d |U|U \quad (3.2.71)$$

$$\vec{\tau}_w = \frac{1}{2} \rho f_w |\widehat{U}_b|^2 \quad (3.2.72)$$

ここで， $U$ は参照高さ $z_r$ における平均流れ速度， $\widehat{U}_b$ は波由来の振動速度の振幅， $C_d$ と $f_w$ はそれぞれ流れ由来の摩擦係数と波由来の摩擦係数である．ここで $\widehat{U}_b$ は波の特徴を決定するパラメータを用いて式 (3.2.73) で表される．

$$\widehat{U}_b = \frac{\pi H_w}{T_w \sinh\left(\frac{2\pi h}{L_w}\right)} \quad (3.2.73)$$

$f_w$ は式 (3.2.74) で計算される．ここで $a_m$ は粒子の移動範囲を表す．

$$f_w = \max \left[ \exp \left\{ 5.213 \left( \frac{a_m}{k_s} \right)^{-0.194} - 5.977 \right\} , \quad 0.30 \right] \quad (3.2.74)$$

$$a_m = H_w/2 \sinh \left( \frac{2\pi h}{L_w} \right) \quad (3.2.75)$$

### 3-3 水質生態系モデル

#### 3-3-1 スカラー量の支配方程式

本研究で扱う水質モデルは水平方向に  $2000\text{m} \times 2000\text{m}$ 、鉛直方向には 10 層の  $\sigma$  座標系を適用している。  $\sigma$  座標系を用いることで不規則な海底地形を扱う困難さを解消し、また海面、底面の境界条件の定式化を容易にできる。

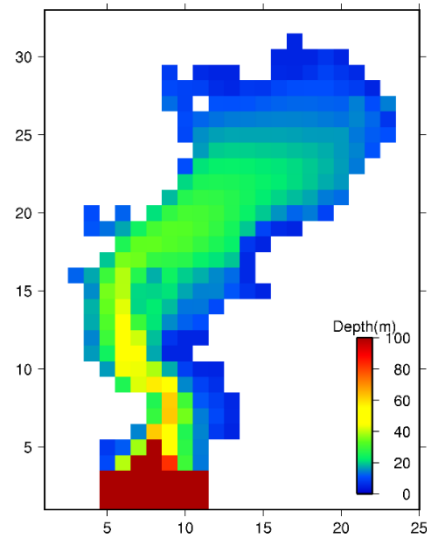


図 3.9 モデルで用いた地形

また先述したスタッガード格子を用い、コントロールボリュームに出入りするフラックスを考えることで、3次元レイヤーモデルの移流拡散方程式を導く。

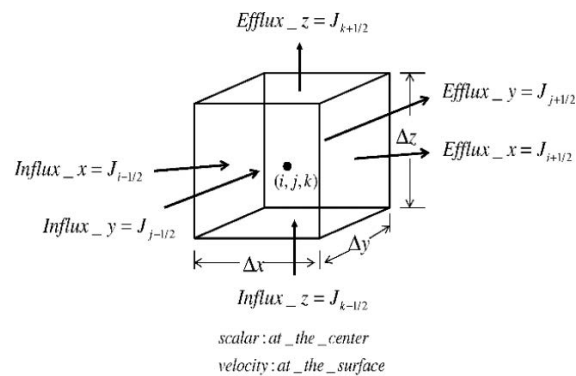


図 3.10 コントロールボリュームとフラックスの模式図

今、各辺の長さが  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  で体積が  $V$  であるコントロールボリュームを想定する。水中の格子  $(i, j, k)$  に存在する状態変数  $C$  を  $C_{i,j,k}$  と定義すると、コントロールボリュームの正味

の質量変化は，移流拡散フラックスによる質量変化と化学反応による質量変化の総和に等しくなるはずである．従って質量保存則は次のように書き表せる．

$$\begin{aligned} \text{Mass Change} + \text{Net mass advection flux} \\ = \text{net mass diffusion flux} + \text{mass source generation} \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

$\Delta t$ 間における正味の質量変化は式 (3.3.2) のようにかける．

$$\text{Mass Change} = \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \quad (3.3.2)$$

移流項は式 (3.3.3) のようにかける．

$$\begin{aligned} \text{net mass advection flux} \\ = \frac{\partial u C_{i,j,k}}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \frac{\partial v C_{i,j,k}}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \frac{\partial w C_{i,j,k}}{\partial z} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

ここで，拡散による $x$ 軸方向の流入フラックス，流出フラックスをそれぞれ $(J_{i-\frac{1}{2},j,k}, J_{i+\frac{1}{2},j,k})$

と定義すると， $y$ 軸方向， $z$ 軸方向の流入，流出フラックスも同様に $(J_{i,j-\frac{1}{2},k}, J_{i,j+\frac{1}{2},k})$ ，

$(J_{i,j,k-\frac{1}{2}}, J_{i,j,k+\frac{1}{2}})$ で表される．この時拡散フラックスによる正味の質量変化は式 (6.4) で表される．

$$\begin{aligned} \text{net mass diffusion flux} \\ = (J_{i-\frac{1}{2},j,k} - J_{i+\frac{1}{2},j,k}) \Delta y \Delta z \Delta t + (J_{i,j-\frac{1}{2},k} - J_{i,j+\frac{1}{2},k}) \Delta x \Delta z \Delta t \\ + (J_{i,j,k-\frac{1}{2}} - J_{i,j,k+\frac{1}{2}}) \Delta x \Delta y \Delta t \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

また，一般的に拡散フラックス  $J_{i,j,k}$  はフィックの法則により式 (3.3.5) で表される．

$$J_{i,j,k} = -K_{z,i,j,k} \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial z} \quad (3.3.5)$$

ここで， $K_{z,i,j,k}$ は拡散係数で $(\text{m}^2/\text{s})$ の単位をもつ．

よって式 (3.3.4) は以下のように書き換えることができる．

*net mass diffusion flux*

$$\begin{aligned}
&= \left[ \left( \left( -K_{i-\frac{1}{2},j,k} \frac{\partial C_{i-\frac{1}{2},j,k}}{\partial x} \right) - \left( -K_{i+\frac{1}{2},j,k} \frac{\partial C_{i+\frac{1}{2},j,k}}{\partial x} \right) \right) \right] \Delta y \Delta z \Delta t \\
&+ \left[ \left( \left( -K_{i,j-\frac{1}{2},k} \frac{\partial C_{i,j-\frac{1}{2},k}}{\partial y} \right) - \left( -K_{i,j+\frac{1}{2},k} \frac{\partial C_{i,j+\frac{1}{2},k}}{\partial y} \right) \right) \right] \Delta x \Delta z \Delta t \\
&+ \left[ \left( \left( -K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial C_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) - \left( -K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial C_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \right) \right] \Delta x \Delta y \Delta t
\end{aligned} \tag{3.3.6}$$

すなわち,

*net mass diffusion flux*

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial x} \left[ K_x \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial x} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_y \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial y} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \\
&+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_z \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial z} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{3.3.7}$$

となる.

コントロールボリューム内における,  $s$ 種類の化学反応による状態変数の生成速度の総和を  $\sum_s R_s$  とすると,  $\Delta t$ 間の生成量は式 (6.8) で表される.

$$\text{source generation} = \left[ \sum_s R_s \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \tag{3.3.8}$$

式 (3.3.2), (3.3.3), (3.3.7), (3.3.8) を式 (3.3.1) に代入することで質量保存則を導く,

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \frac{\partial u C_{i,j,k}}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \frac{\partial v C_{i,j,k}}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \frac{\partial w C_{i,j,k}}{\partial z} \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \\
&= \frac{\partial}{\partial x} \left[ K_x \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial x} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_y \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial y} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t \\
&+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_z \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial z} \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t + \left[ \sum_s R_s \right] \Delta x \Delta y \Delta z \Delta t
\end{aligned} \tag{3.3.9}$$

式 (3.3.9) の両辺を  $\Delta x \Delta y \Delta z \Delta t$  で除することによって最終的に式 (3.3.10) が得られる.

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial t} + \frac{\partial u C_{i,j,k}}{\partial x} + \frac{\partial v C_{i,j,k}}{\partial y} + \frac{\partial w C_{i,j,k}}{\partial z} \\
&= \frac{\partial}{\partial x} \left[ K_x \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_y \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_z \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial z} \right] + \left[ \sum_s R_s \right]
\end{aligned} \tag{3.3.10}$$

式 (3.3.10) を  $\sigma$ 座標系 (3.3.11) で書き直すと式 (3.3.12) のようになる.

$$\sigma = \frac{z + h}{\zeta + h} \quad (3.3.11)$$

ここに、 $h$ は水深、 $\zeta$ は水位を表す。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(DC_{i,j,k})}{\partial t} + \frac{\partial(uDC_{i,j,k})}{\partial x} + \frac{\partial(vDC_{i,j,k})}{\partial y} + \frac{\partial[(\dot{\sigma} + \dot{\sigma}_{\text{sink}})DC_{i,j,k}]}{\partial \sigma} \\ & = DK_h \left[ \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial y^2} \right] + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ K_v \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial \sigma} \right] + D \sum_s R_s \end{aligned} \quad (3.3.12)$$

ここで、 $D$ は全水深 ( $=\zeta + h$ )、 $\dot{\sigma}_{\text{sink}}$ は $\sigma$ 座標系における沈降速度で、 $\dot{\sigma}_{\text{sink}} = w/D$ で与えられる。 $K_h$ 、 $K_v$ はそれぞれ水平方向、鉛直方向の拡散係数である。

本モデル内では計算の簡便化のため、式 (3.3.12) を分割して以下のように計算している。

移流拡散項

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(DC_{i,j,k})}{\partial t} + \frac{\partial(uDC_{i,j,k})}{\partial x} + \frac{\partial(vDC_{i,j,k})}{\partial y} + \frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial \sigma} \\ & = DK_h \left[ \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial y^2} \right] + \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ K_v \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial \sigma} \right] \end{aligned} \quad (3.3.13)$$

懸濁態物質の沈降項

$$\frac{\partial(DC_{i,j,k})}{\partial t} + \frac{\partial(\dot{\sigma}_{\text{sink}}DC_{i,j,k})}{\partial \sigma} = 0 \quad (3.3.14)$$

生成項

$$\frac{\partial(DC_{i,j,k})}{\partial t} = D \sum_s R_s \quad (3.3.15)$$

次節以降で上記の方程式をそれぞれ離散化していく。

### 3-3-2 移流拡散項の離散化

反陰解法を用いるので式 (3.3.13) 中の鉛直移流と鉛直拡散の項は陰的に差分化し、そのほかは全て陽的に差分化する。

#### 1. 時間微分項

$$\frac{\partial(DC_{i,j,k})}{\partial t} = \frac{D_{i,j}^{n+1}C_{i,j,k}^{n+1} - D_{i,j}^nC_{i,j,k}^n}{\Delta t} = \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t}C_{i,j,k}^{n+1} - \frac{D_{i,j}^n}{\Delta t}C_{i,j,k}^n \quad (3.3.16)$$

## 2. $x$ 軸方向の移流

$$\begin{aligned} \frac{\partial(uDC_{i,j,k})}{\partial x} = & \frac{1}{\Delta x} \left( u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} C_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} C_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right) \\ & - \frac{\lambda_x}{2\Delta t} \left( \left| u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} (C_{i+1,j,k}^n - C_{i,j,k}^n) \right. \\ & \left. - \left| u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} (C_{i,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n) \right) \end{aligned} \quad (3.3.17)$$

ここで、式 (3.3.18) を定義する. この  $\lambda_x$  を 0~1 の間で適当な値を定義することで数値拡散項を調整する役割を果たしている.

$$\lambda_x = \frac{|u_{i,j,k}| \Delta t}{\Delta x} = amdx_{i,j,k} \quad (3.3.18)$$

すると式 (3.3.17) は式 (3.3.19) のように書き換えられる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(uDC_{i,j,k})}{\partial x} = & \frac{1}{\Delta x} \left( u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} C_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} - u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} C_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right) \\ & - \frac{amdx_{i,j,k}}{2\Delta t} \left( \left| u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} (C_{i+1,j,k}^n - C_{i,j,k}^n) \right. \\ & \left. - \left| u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} (C_{i,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n) \right) \end{aligned} \quad (3.3.19)$$

スタaggerド格子においてスカラー量は格子の中心で定義されていることを踏まえて、更に式を変形していくと、式 (3.3.20) が得られる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(uDC_{i,j,k})}{\partial x} = & \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{\Delta x} \left( \frac{C_{i+1,j,k}^n + C_{i,j,k}^n}{2} \right) - \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}}{\Delta x} \left( \frac{C_{i,j,k}^n + C_{i-1,j,k}^n}{2} \right) \\ & - \frac{amdx_{i,j,k}}{2\Delta t} \left( \left| u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} (C_{i+1,j,k}^n - C_{i,j,k}^n) \right. \\ & \left. - \left| u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} (C_{i,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n) \right) \end{aligned} \quad (3.3.20)$$

ここでスカラー量  $C_{i,j,k}$  に着目して式を整理すると式 (3.3.21) を得る.



$$\begin{aligned}
\frac{\partial(uDC_{i,j,k})}{\partial x} = & \left( \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} - \frac{amd x_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta t} \left| u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) C_{i+1,j,k}^n \\
& + \left( \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} - \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{amd x_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta t} \left| u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \right. \\
& \left. + \frac{amd x_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta x} \left| u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) C_{i,j,k}^n \\
& - \left( \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{amd x_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta x} \left| u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) C_{i-1,j,k}^n
\end{aligned} \tag{3.3.21}$$

### 3. y軸方向の移流

x軸の場合と全く同様の手順で式 (3.3.22) を得ることができるので、結果のみ示す.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(vDC_{i,j,k})}{\partial y} = & \left( \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} - \frac{amdy_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2\Delta t} \left| v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) C_{i,j+1,k}^n \\
& + \left( \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} - \frac{v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} + \frac{amdy_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2\Delta t} \left| v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} \right. \\
& \left. + \frac{amdy_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2\Delta y} \left| v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) C_{i,j,k}^n \\
& - \left( \frac{v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} + \frac{amdy_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2\Delta y} \left| v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) C_{i,j-1,k}^n
\end{aligned} \tag{3.3.22}$$

### 4. $\sigma$ 軸方向の移流

水平方向の移流の場合と同様の考え方で $\lambda_\sigma$ を導入する.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial \sigma} = & \frac{1}{\partial \sigma} \left( \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \\
& - \frac{\lambda_\sigma}{2\Delta \sigma} \left\{ \left( \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \left| D_{i,j}^{n+1} \right| (C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}) \right. \right. \\
& \left. \left. - \left( \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \left| D_{i,j}^{n+1} \right| (C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}) \right) \right\}
\end{aligned} \tag{3.3.23}$$

更に式 (3.3.23) を変形していくと式 (3.3.24) が得られる.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial\sigma} &= \left( \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k+1}^{n+1} + \left( \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} \\
&\quad - \left( \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} - \left( \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k-1}^{n+1} \\
&\quad - \left( \frac{\lambda_{\sigma}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k+1}^{n+1} + \left( \frac{\lambda_{\sigma}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} \\
&\quad + \left( \frac{\lambda_{\sigma}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} - \left( \frac{\lambda_{\sigma}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k-1}^{n+1}
\end{aligned} \tag{3.3.24}$$

ここで

$$\lambda_{\sigma} = \frac{|\dot{\sigma}_{i,j,k}|\Delta t}{\Delta\sigma} = amds_{i,j,k} \tag{3.3.25}$$

とおき,  $C_{i,j,k}$  に着目して式を整理すると次の式 (3.3.26) で表される.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial\sigma} &= \left( \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} - \frac{amds_{i,j,k}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k+1}^{n+1} \\
&\quad + \left( \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} - \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} + \frac{amds_{i,j,k}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right. \\
&\quad \left. + \frac{amds_{i,j,k}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} \\
&\quad - \left( \frac{\dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} + \frac{amds_{i,j,k}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}^{n+1}_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k-1}^{n+1}
\end{aligned} \tag{3.3.26}$$

5. 水平方向の拡散

$$\begin{aligned}
DK_h \left( \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial y^2} \right) &= D_{i,j} \left( K_x \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial y^2} \right) \\
&= D_{i,j}^{n+1} \left[ \frac{1}{\Delta x} \left( K_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},j,k} - K_{x_{i-\frac{1}{2},j,k}} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\Delta y} \left( K_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{i,j+\frac{1}{2},k} - K_{y_{i,j-\frac{1}{2},k}} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.3.27}$$

ここで、スカラー量は格子の中心で定義されることに注意して更に差分化すると、

$$\begin{aligned}
DK_h \left( \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial y^2} \right) &= D_{i,j}^{n+1} \left[ \frac{1}{\Delta x} \left( K_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}} \frac{C_{i+1,j,k}^n - C_{i,j,k}^n}{\Delta x} - K_{x_{i-\frac{1}{2},j,k}} \frac{C_{i,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n}{\Delta x} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{\Delta y} \left( K_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}} \frac{C_{i,j+1,k}^n - C_{i,j,k}^n}{\Delta y} - K_{y_{i,j-\frac{1}{2},k}} \frac{C_{i,j,k}^n - C_{i,j-1,k}^n}{\Delta y} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.3.28}$$

ここで、 $C_{i,j,k}$ に着目して式を整理すると、式 (3.3.29) が得られる。

$$\begin{aligned}
DK_h \left( \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{i,j,k}}{\partial y^2} \right) &= \left( \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}}{(\Delta x)^2} \right) C_{i+1,j,k}^n + \left( \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} \right) C_{i,j+1,k}^n \\
&\quad - \left( \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{x_{i,j-\frac{1}{2},k}}}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{y_{i,j-\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} \right) C_{i,j,k}^n + \left( \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{x_{i-\frac{1}{2},j,k}}}{(\Delta x)^2} \right) C_{i-1,j,k}^n \\
&\quad + \left( \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{y_{i,j-\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} \right) C_{i,j-1,k}^n
\end{aligned} \tag{3.3.29}$$

6. 鉛直方向の拡散項

$$\begin{aligned}
\frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ K_v \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial \sigma} \right] &= \frac{1}{D_{i,j}^{n+1}} \frac{1}{\Delta \sigma} \left( K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}} \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta \sigma} - K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta \sigma} \right) \\
&= \left( \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) C_{i,j,k+1}^{n+1} - \left( \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} + \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) C_{i,j,k}^{n+1} \\
&\quad + \left( \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) C_{i,j,k-1}^{n+1}
\end{aligned} \tag{3.3.30}$$

差分化した式 (3.3.16), (3.3.21), (3.3.22), (3.3.26), (3.3.29), (3.3.30) を, 移流拡散の式 (3.3.13) に代入すると, 式 (3.3.31) のように整理することができる.

$$\begin{aligned}
&apkc_{i,j,k} C_{i,j,k-1}^{n+1} + bpkc_{i,j,k} C_{i,j,k}^{n+1} + cpkc_{i,j,k} C_{i,j,k+1}^{n+1} \\
&= auk_{i,j,k} C_{i-1,j,k}^n + buk_{i,j,k} C_{i,j,k}^n + cuk_{i,j,k} C_{i+1,j,k}^n + duk_{i,j,k} C_{i,j,k-1}^n \\
&\quad + euk_{i,j,k} C_{i,j,k+1}^n
\end{aligned} \tag{3.3.31}$$

ここで, 各係数は以下に示す通りである.

$$apkc_{i,j,k} = - \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta \sigma} + \frac{amds_{i,j,k} D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta \sigma} + \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) \tag{3.3.32}$$

$$\begin{aligned}
bpkc_{i,j,k} &= \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} + \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta \sigma} + \frac{amds_{i,j,k} D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta \sigma} + \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) \\
&\quad - \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta \sigma} - \frac{amds_{i,j,k} D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta \sigma} - \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) \\
&\quad - \left( \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta \sigma} \left[ \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} - \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right] \right)
\end{aligned} \tag{3.3.33}$$

$$cpkc_{i,j,k} = \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta \sigma} - \frac{amds_{i,j,k} D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta \sigma} - \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \tag{3.3.34}$$

また,  $bpkc_{i,j,k}$  は  $apkc_{i,j,k}$  と  $cpkc_{i,j,k}$  を用いて次のように表される.

$$bpkc_{i,j,k} = \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} - apkc_{i,j,k} - cpkc_{i,j,k} - \left( \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta \sigma} \left[ \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} - \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right] \right) \tag{3.3.35}$$

$$auk_{i,j,k} = \frac{D_{i,j}^{n+1} K_{x_{i-\frac{1}{2},j,k}}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{amd x_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta x} \left| u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \tag{3.3.36}$$

$$\begin{aligned}
buk_{i,j,k} = & - \left( \frac{D_{ij}^{n+1} K_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{ij}^{n+1} K_{x_{i,j-\frac{1}{2},k}}}{(\Delta x)^2} + \frac{D_{ij}^{n+1} K_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} + \frac{D_{ij}^{n+1} K_{y_{i,j-\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} - \frac{D_{ij}^n}{\Delta t} \right. \\
& + \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} - \frac{u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} + \frac{amd_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta x} \left| u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \\
& + \frac{amd_{i-\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta x} \left| u_{i-\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} - \frac{v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} \\
& \left. + \frac{amd_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2\Delta y} \left| v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{amd_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2\Delta y} \left| v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right)
\end{aligned} \tag{3.3.37}$$

$$cuk_{i,j,k} = - \left( \frac{u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}}{2\Delta x} - \frac{amd_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2\Delta x} \left| u_{i+\frac{1}{2},j,k}^{n+1} \right| D_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - \frac{D_{ij}^{n+1} K_{x_{i+\frac{1}{2},j,k}}}{(\Delta x)^2} \right) \tag{3.3.38}$$

$$duk_{i,j,k} = \frac{v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} + \frac{amd_{i,j-\frac{1}{2},k}}{2\Delta y} \left| v_{i,j-\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} + \frac{D_{ij}^{n+1} K_{y_{i,j-\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} \tag{3.3.39}$$

$$euk_{i,j,k} = - \left( \frac{v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1}}{2\Delta y} - \frac{amd_{i,j+\frac{1}{2},k}}{2\Delta y} \left| v_{i,j+\frac{1}{2},k}^{n+1} \right| D_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - \frac{D_{ij}^{n+1} K_{y_{i,j+\frac{1}{2},k}}}{(\Delta y)^2} \right) \tag{3.3.40}$$

また、式 (3.3.31) は陽的な項と陰的な項で更に整理することができ、式 (3.3.41) のように表すことができる。

$$apkc_{i,j,k} C_{i,j,k-1}^{n+1} + bpkc_{i,j,k} C_{i,j,k}^{n+1} + cpkc_{i,j,k} C_{i,j,k+1}^{n+1} = dpkc_{i,j,k} \tag{3.3.41}$$

ここで、 $dpkc_{i,j,k}$  は、

$$\begin{aligned}
dpkc_{i,j,k} = & auk_{i,j,k} C_{i-1,j,k}^n + buk_{i,j,k} C_{i,j,k}^n + cuk_{i,j,k} C_{i+1,j,k}^n + duk_{i,j,k} C_{i,j-1,k}^n \\
& + euk_{i,j,k} C_{i,j+1,k}^n
\end{aligned} \tag{3.3.42}$$

と表される。

### 3-3-3 海面、海底の境界条件

#### 3-3-3-1 海面の境界条件

海面の上方に仮想の格子を設定し、 $C_{i,j,k+1} = C_{i,j,k}$ ,  $\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = 0$  とする。今まで海表面での

移流拡散はゼロと考えていたので、ここで考慮し、式を置き換える。

①  $\sigma$ 座標系での移流

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial\sigma} &= \frac{1}{\partial\sigma}(-\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}D_{i,j}^{n+1}C_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}) \\ &\quad - \frac{\lambda_\sigma}{2\Delta\sigma} \left\{ - \left| \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right| D_{i,j}^{n+1} (C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}) \right\} \end{aligned} \quad (3.3.43)$$

ここで式 (3.3.26) と同様の手順で整理すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial\sigma} &= \left( -\frac{\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} + \frac{amds_{i,j,k}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} \\ &\quad - \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} + \frac{amds_{i,j,k}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k-1}^{n+1} \end{aligned} \quad (3.3.44)$$

が得られる.

②  $\sigma$ 座標系での拡散

$$\begin{aligned} \frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial\sigma} \left[ K_v \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial\sigma} \right] &= \frac{1}{D_{i,j}^{n+1}} \frac{1}{\Delta\sigma} \left( -K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta\sigma} \right) \\ &= - \left( \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta\sigma)^2} \right) C_{i,j,k}^{n+1} + \left( \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta\sigma)^2} \right) C_{i,j,k-1}^{n+1} \end{aligned} \quad (3.3.45)$$

ここで前節と同様に式 (3.3.16), (3.3.21), (3.3.22), (3.3.42), (3.3.29), (3.3.43) を移流拡散の式 (3.3.13) に代入すると,

$$\begin{aligned} apkc_{i,j,k}C_{i,j,k-1}^{n+1} + bpkc_{i,j,k}C_{i,j,k}^{n+1} + cpkc_{i,j,k}C_{i,j,k+1}^{n+1} \\ = auk_{i,j,k}C_{i-1,j,k}^n + buk_{i,j,k}C_{i,j,k}^n + cuk_{i,j,k}C_{i+1,j,k}^n + duk_{i,j,k}C_{i,j-1,k}^n \\ + euk_{i,j,k}C_{i,j+1,k}^n \end{aligned} \quad (3.3.46)$$

の形に整理することができる. ここで各係数は

$$apkc_{i,j,k} = - \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta\sigma} + \frac{amds_{i,j,k}D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta\sigma} + \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta\sigma)^2} \right) \quad (3.3.47)$$

$$bpkc_{i,j,k} = \frac{D_{ij}^{n+1}}{\Delta t} + \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} D_{ij}^{n+1}}{2\Delta\sigma} + \frac{amds_{i,j,k} D_{ij}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta\sigma} + \frac{K_{\sigma_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{D_{ij}^{n+1} (\Delta\sigma)^2} \right) \quad (3.3.48)$$

$$- \frac{D_{ij}^{n+1}}{\Delta\sigma} \left[ \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right] \\ cpkc_{i,j,k} = 0 \quad (3.3.49)$$

また,  $bpkc_{i,j,k}$  は  $apkc_{i,j,k}$  と  $cpkc_{i,j,k}$  を用いて次のように表される.

$$bpkc_{i,j,k} = \frac{D_{ij}^{n+1}}{\Delta t} - apkc_{i,j,k} - cpkc_{i,j,k} - \left( \frac{D_{ij}^{n+1}}{\Delta\sigma} \left[ \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \right] \right) \quad (3.3.50)$$

$dpkc_{i,j,k}$  は式 (3.3.42) と同様である.

### 3-3-3-2 底面の境界条件

海底面の下方に仮想の格子を設定し,  $C_{i,j,k-1} = C_{i,j,k}$ ,  $\dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0$  とする. ここでは水柱の底での移流拡散はゼロと考えていたので, 境界条件はここで分けて考えられている.

#### ③ $\sigma$ 座標系での移流

$$\frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial\sigma} = \frac{1}{\partial\sigma} (\dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{ij}^{n+1} C_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1}) \\ - \frac{\lambda_\sigma}{2\Delta\sigma} \left\{ \left( \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \left| D_{ij}^{n+1} (C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}) \right| \right) \right\} \quad (3.3.51)$$

ここで式 (3.3.26) と同様の手順で整理すると

$$\frac{\partial(\dot{\sigma}DC_{i,j,k})}{\partial\sigma} = \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{ij}^{n+1}}{2\Delta\sigma} - \frac{amds_{i,j,k} D_{ij}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k+1}^{n+1} \\ + \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{ij}^{n+1}}{2\Delta\sigma} + \frac{amds_{i,j,k} D_{ij}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta\sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} \quad (3.3.52)$$

が得られる.

#### ④ $\sigma$ 座標系での拡散

$$\begin{aligned}
\frac{1}{D} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ K_v \frac{\partial C_{i,j,k}}{\partial \sigma} \right] &= \frac{1}{D_{i,j}^{n+1}} \frac{1}{\Delta \sigma} \left( K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}} \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta \sigma} \right) \\
&= \left( \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) C_{i,j,k+1}^{n+1} - \left( \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) C_{i,j,k}^{n+1}
\end{aligned} \tag{3.3.53}$$

ここで前節と同様に式 (3.3.16), (3.3.21), (3.3.22), (3.3.42), (3.3.29), (3.3.43) を移流拡散の式 (3.3.13) に代入すると,

$$\begin{aligned}
&apkc_{i,j,k} C_{i,j,k-1}^{n+1} + bpkc_{i,j,k} C_{i,j,k}^{n+1} + cpkc_{i,j,k} C_{i,j,k+1}^{n+1} \\
&= auk_{i,j,k} C_{i-1,j,k}^n + buk_{i,j,k} C_{i,j,k}^n + cuk_{i,j,k} C_{i+1,j,k}^n + duk_{i,j,k} C_{i,j,k-1}^n \\
&+ euk_{i,j,k} C_{i,j,k+1}^n
\end{aligned} \tag{3.3.54}$$

の形に整理することができる. ここで各係数は

$$apkc_{i,j,k} = 0 \tag{3.3.55}$$

$$\begin{aligned}
bpkc_{i,j,k} &= \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} - \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta \sigma} - \frac{amds_{i,j,k} D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta \sigma} - \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) \\
&+ \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta \sigma} \left[ \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right]
\end{aligned} \tag{3.3.56}$$

$$cpkc_{i,j,k} = \left( \frac{\dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} D_{i,j}^{n+1}}{2\Delta \sigma} - \frac{amds_{i,j,k} D_{i,j}^{n+1} \left| \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right|}{2\Delta \sigma} - \frac{K_{\sigma_{i,j,k+\frac{1}{2}}}}{D_{i,j}^{n+1} (\Delta \sigma)^2} \right) \tag{3.3.57}$$

また,  $bpkc_{i,j,k}$  は  $apkc_{i,j,k}$  と  $cpkc_{i,j,k}$  を用いて次のように表される.

$$bpkc_{i,j,k} = \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} - apkc_{i,j,k} - cpkc_{i,j,k} + \left( \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta \sigma} \left[ \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \right] \right) \tag{3.3.58}$$

$dpkc_{i,j,k}$  は式 (3.3.42) と同様である.

### 3-3-4 懸濁態物質の沈降

粒子状の有機物は水柱で沈降し, 底質の表層に堆積していく. 堆積した有機物は酸素を消費して分解されるが, この過程が海底の貧酸素化, 無酸素化を促進しているといえる. また, 酸素が消費しつくされた後には, 嫌気性分解が生じることにより貧酸素状態では底質中のアンモニアやリン, 無酸素状態では硫化水素濃度の増加につながる. そして無酸素状態下ではそれらが底質から水中へ溶出する. このように溶出した栄養塩は水中をさらに富栄養化させ, 光合成が活発になり, 有機物量が増え, 分解量が増えるといった負のスパイラルを引き起こすことになる. また溶出された硫化水素は青潮の原因となり, 魚介類のへ



い死を引き起こす。本章では、このように水質と底質の両方に大きく影響を与える懸濁態物質の沈降をモデル化していく。

式 (3.3.14) で表される沈降項の離散化は、その特徴によって水柱の格子、海表面の格子、海底の格子の 3 種類に分けてモデル化される。

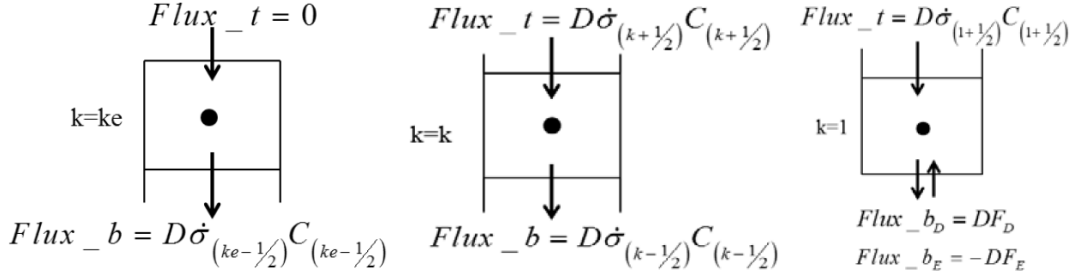


図 3.1.1 レイヤーに応じた沈降の様子

$$\begin{aligned} \frac{\partial(DC_{i,j,k})}{\partial t} + \frac{\partial(\dot{\sigma}_{sink}DC_{i,j,k})}{\partial \sigma} &= 0 \\ \Leftrightarrow \frac{\partial(DC_{i,j,k})}{\partial t} + \frac{(Flux_t - Flux_b)}{\partial \sigma} &= 0 \end{aligned} \quad (3.3.59)$$

差分化には陰解法，風上差分を用いる．以下，簡略化のため $\dot{\sigma}_{sink}$ を $\dot{\sigma}_s$ と表す．

ケース 1.  $k=ke-1 \sim 2$

$$Flux_t = D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}} C_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \quad (3.3.60)$$

$$Flux_b = D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}} C_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \quad (3.3.61)$$

よって式 (3.3.59) は式 (3.3.62) に変形できる．

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,k}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}} C_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}} C_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta \sigma} = 0 \quad (3.3.62)$$

ここで風上差分を適用すると， $C_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = C_{i,j,k+1}^{n+1}$ ， $C_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = C_{i,j,k}^{n+1}$ であるから，

更に式 (3.3.62) は (3.3.63)，(3.3.64) に書き換えられる．

$$\begin{aligned} \frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,k}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}} C_{i,j,k+1}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}} C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta \sigma} &= 0 \\ \left( \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} - \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta \sigma} \right) C_{i,j,k}^{n+1} &= \left[ \frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,k}^n}{\Delta t} - \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{i,j,k+\frac{1}{2}} C_{i,j,k+1}^{n+1}}{\Delta \sigma} \right] \end{aligned} \quad (3.3.63)$$

$$\Leftrightarrow C_{i,j,k}^{n+1} = \frac{\frac{C_{i,j,k}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,k+\frac{1}{2}}} C_{i,j,k+1}^{n+1}}{\Delta \sigma}}{\frac{1}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,k-\frac{1}{2}}}}{\Delta \sigma}} \quad (3.3.64)$$

## ケース 2. 海表面

海表面ではフラックスが無いと考えて、次のように表される.

$$Flux_t = 0 \quad (3.3.65)$$

$$Flux_b = D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,ke-\frac{1}{2}}} C_{i,j,ke-\frac{1}{2}}^{n+1} \quad (3.3.66)$$

よって式 (3.3.59) は式 (3.3.67) に変形できる

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,ke}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,ke}^n}{\Delta t} - \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,ke-\frac{1}{2}}} C_{i,j,ke-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta \sigma} = 0 \quad (3.3.67)$$

ここで風上差分を適用すると,  $C_{i,j,ke-\frac{1}{2}}^{n+1} = C_{i,j,ke}^{n+1}$  であるから, 更に式 (3.3.67) は (3.3.68),

(3.3.69) に書き換えられる.

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,ke}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,ke}^n}{\Delta t} - \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,ke-\frac{1}{2}}} C_{i,j,ke}^{n+1}}{\Delta \sigma} = 0 \quad (3.3.68)$$

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,ke}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,ke}^n}{\Delta t} - \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,ke-\frac{1}{2}}} C_{i,j,ke}^{n+1}}{\Delta \sigma} = 0 \quad (3.3.69)$$

$$\Leftrightarrow C_{i,j,ke}^{n+1} = \frac{\frac{C_{i,j,ke}^n}{\Delta t}}{\left( \frac{1}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,ke-\frac{1}{2}}}}{\Delta \sigma} \right)}$$

## ケース 3. 海底面

海底ではせん断応力 (Bed Shear Stress, (BSS)) によってフラックスは堆積方向と侵食方向のどちらもととり得る. ここで一般的なせん断応力を  $\tau_b$ , 堆積を起こす限界せん断応力を  $\tau_D$ , 侵食を起こす限界せん断応力を  $\tau_E$  で定義する. ここでは (Rasmeemasmuang and Sasaki, 2008) によって開発されたモデルを用いており, 侵食や堆積を考える際に非常に重要なパラメーターであり, 流れによるせん断応力 (Current induced Bed Shear Stress, (CBSS)) と波によるせん断応力 (Wave induced Bed Shear Stress, (WBSS)) のベクトル和として計算されている. また, WBSS は (Achari and Sasaki, 2007) による波浪追算モデルにより予測された波を通して得られている.

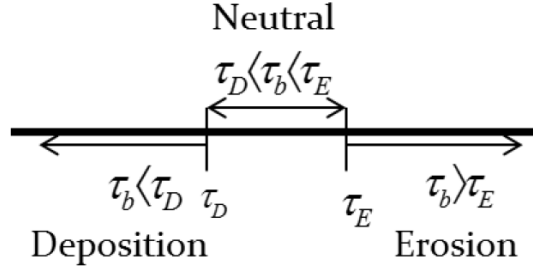


図 3.1 2 BSS に応じた侵食，堆積

堆積フラックスを考えると，次のように表される．

$$Flux_t = D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,1+\frac{1}{2}}^{n+1} \quad (3.3.70)$$

$$Flux_b = D_{i,j}^{n+1} F_D \quad (3.3.71)$$

堆積フラックス  $F_D$  は (Attati and Sasaki, 2012) らによる次の式で計算される．

$$F_D = \dot{\sigma}_{s_{i,j,1-\frac{1}{2}}} C_{i,j,1-\frac{1}{2}}^{n+1} \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_D}\right) \quad \text{if } \tau_b < \tau_D \quad (3.3.72)$$

$$F_D = 0 \quad \text{if } \tau_b > \tau_D \quad (3.3.73)$$

よって式 (3.3.59) は式 (3.3.74) に変形できる

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,1+\frac{1}{2}}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} \left[ \dot{\sigma}_{s_{i,j,1-\frac{1}{2}}} C_{i,j,1-\frac{1}{2}}^{n+1} \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_D}\right) \right]}{\Delta \sigma} = 0 \quad (3.3.74)$$

ここで風上差分を適用すると， $C_{i,j,1+\frac{1}{2}}^{n+1} = C_{i,j,2}^{n+1}$ ， $C_{i,j,1-\frac{1}{2}}^{n+1} = C_{i,j,1}^{n+1}$ であるから，更に式

(3.3.74) は (3.3.75)，(3.3.76) に変形できる．

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} \left[ \dot{\sigma}_{s_{i,j,1-\frac{1}{2}}} C_{i,j,1}^{n+1} \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_D}\right) \right]}{\Delta \sigma} = 0 \quad (3.3.75)$$

$$\left( \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} - \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1-\frac{1}{2}}} \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_D}\right)}{\Delta \sigma} \right) C_{i,j,1}^{n+1} = \frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^n}{\Delta t} - \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1}}{\Delta \sigma} \quad (3.3.76)$$

$$\Leftrightarrow C_{i,j,1}^{n+1} = \frac{\left( \frac{C_{i,j,1}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}}}{\Delta \sigma} C_{i,j,2}^{n+1} \right)}{\left( \frac{1}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}}}{\Delta \sigma} \left( 1 - \frac{\tau_b}{\tau_D} \right) \right)}$$

次に、侵食フラックスを考えると、次のように表される。沈降項は以下のように表される。

$$Flux_t = D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,1+\frac{1}{2}}^{n+1} \quad (3.3.77)$$

$$Flux_b = -D_{i,j}^{n+1} F_E \quad (3.3.78)$$

ここで侵食フラックスは、(Rasmeemasuang and Sasaki, 2008) による次の式で計算される。ここで $E_0$ は経験的に得られたパラメータである。

$$F_E = E_0 \left( \frac{\tau_b}{\tau_E} - 1 \right) \quad \text{if } \tau_b > \tau_E \quad (3.3.79)$$

$$F_E = 0 \quad \text{if } \tau_b < \tau_E \quad (3.3.80)$$

侵食フラックスは、底質から侵食された物質の総和として計算しているので、質量分率 $F_{M_B}$ をもつ物質 $B$ に着目するとき、 $B$ がどの程度侵食されているかは別に計算される。質量分率とは、侵食された物質全体の質量に対する各物質の質量の比である。侵食された全質量はバルク密度と侵食物質の全体積を使って置き換えることができる。

$$F_{M_B} = \frac{M_B}{M_T} \quad (3.3.81)$$

$$F_{M_B} = \frac{M_B}{\rho_{bulk} V_T} \quad (3.3.82)$$

状態変数の濃度は、(質量÷コントロールボリュームの体積) で定義されるので、

$$B = \frac{M_B}{V_T} \quad (3.3.83)$$

底質から侵食される物質の質量分率は式 (3.3.84) で表される。

$$F_{M_B} = \frac{B}{\rho_{bulk}} \quad (3.3.84)$$

よって式 (3.3.59) は式 (3.3.85) に変形できる

$$\frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,1+\frac{1}{2}}^{n+1} - \left\{ -D_{i,j}^{n+1} \left[ E_0 \left( \frac{\tau_b}{\tau_E} - 1 \right) F_{M_B} \right] \right\}}{\Delta \sigma} = 0 \quad (3.3.85)$$

ここで風上差分を適用すると、 $C_{i,j,1+\frac{1}{2}}^{n+1} = C_{i,j,2}^{n+1}$ であるから、

$$\begin{aligned}
& \frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^{n+1} - D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1} + \{D_{i,j}^{n+1} [E_0 (\frac{\tau_b}{\tau_E} - 1) F_{M_B}]\}}{\Delta \sigma} = 0 \\
& \Leftrightarrow \frac{D_{i,j}^{n+1}}{\Delta t} C_{i,j,1}^{n+1} = \left[ \frac{D_{i,j}^{n+1} C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{D_{i,j}^{n+1} \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1} + \{D_{i,j}^{n+1} [E_0 (\frac{\tau_b}{\tau_E} - 1) F_{M_B}]\}}{\Delta \sigma} \right] \\
& \Leftrightarrow C_{i,j,1}^{n+1} = \frac{\left[ \frac{C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1} + E_0 (\frac{\tau_b}{\tau_E} - 1) F_{M_B}}{\Delta \sigma} \right]}{\frac{1}{\Delta t}}
\end{aligned} \tag{3.3.86}$$

したがって、海底の格子における堆積あるいは侵食フラックスは式 (3.3.76) と (3.3.86) の組み合わせによって考慮される。

$$C_{i,j,1}^{n+1} = \frac{\left( \frac{C_{i,j,1}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1}}{\Delta \sigma} \right)}{\left( \frac{1}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1-\frac{1}{2}}} (1 - \frac{\tau_b}{\tau_D})}{\Delta \sigma} \right)} f_D + \frac{\left[ \frac{C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1} + E_0 (\frac{\tau_b}{\tau_E} - 1) F_{M_B}}{\Delta \sigma} \right]}{\frac{1}{\Delta t}} f_E \tag{3.3.87}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
f_D &= 1 \text{ if } \tau_b < \tau_D, \quad \text{and} \quad f_D = 0 \text{ if } \tau_b > \tau_D \\
f_E &= 1 \text{ if } \tau_b > \tau_E, \quad \text{and} \quad f_E = 0 \text{ if } \tau_b < \tau_E
\end{aligned}$$

である。

数値計算の安定性のために、式 (3.3.87) は式 (3.3.88) として用いられている。

$$\begin{aligned}
C_{i,j,1}^{n+1} &= \frac{\left( \frac{C_{i,j,1}^n}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1}}{\Delta \sigma} \right)}{\left( \frac{1}{\Delta t} - \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1-\frac{1}{2}}} \times \text{MAX} \left\{ \left( 1 - \frac{\tau_b}{\tau_D} \right), 0 \right\}}{\Delta \sigma} \right)} f_D \\
&+ \frac{\left[ \frac{C_{i,j,1}^n}{\Delta t} + \frac{\dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,2}^{n+1} + E_0 \times \text{MAX} \left\{ \left( \frac{\tau_b}{\tau_E} - 1 \right), 0 \right\} F_{M_B}}{\Delta \sigma} \right]}{\frac{1}{\Delta t}} f_E
\end{aligned} \tag{3.3.88}$$

以上のように3つのケースに分けて沈降を考えてきたが、実際の計算では始めに海面でのフラックス、次に水柱でのフラックス、最後に海底でのフラックスのという順番で計算される。

支配方程式の離散化によって水底質間の沈降フラックスを導いてきたが、改めて整理をすると、

$$\text{堆積フラックス : } Flux_b = D_{i,j}^{n+1} \left[ \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,1}^{n+1} \left( 1 - \frac{\tau_b}{\tau_D} \right) \right] \quad (3.3.89)$$

$$\text{侵食フラックス : } Flux_b = -D_{i,j}^{n+1} \left[ E_0 \left( \frac{\tau_b}{\tau_E} - 1 \right) \right] \quad (3.3.90)$$

この2つの式を統合すると、水質から底質へのフラックスは式 (3.3.91) で表される。

$$Flux_b = D_{i,j}^{n+1} \left[ \dot{\sigma}_{s_{i,j,1+\frac{1}{2}}} C_{i,j,1}^{n+1} \left( 1 - \frac{\tau_b}{\tau_D} \right) \right] f_D - D_{i,j}^{n+1} \left[ E_0 \left( \frac{\tau_b}{\tau_E} - 1 \right) \right] f_E \quad (3.3.91)$$

### 3-3-5 生成項

#### 3-3-5-1 ルンゲクッタ法

各状態変数によって多種多様な生成項が用いられているが、それらの中には互いに影響を及ぼすものもある。それらの影響を考慮し、補正しながら数値解を得られるようにここでは4次のルンゲクッタ法による差分法を適用する。ある状態変数の濃度  $C$  の時間変化は  $C$  と時間  $t$  の関数で表せ、

$$\frac{dC}{dt} = f(t, C) \quad (3.3.92)$$

ここで4次のルンゲクッタ法で用いる係数を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} k_1 &= \Delta t \times f(t^n, C^n) \\ k_2 &= \Delta t \times f\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t, C^n + \frac{1}{2}k_1\right) \\ k_3 &= \Delta t \times f\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t, C^n + \frac{1}{2}k_2\right) \\ k_4 &= \Delta t \times f(t^n + \Delta t, C^n + k_3) \end{aligned} \quad (3.3.93)$$

ここで、 $[C]$  と  $[F]$  は行列を表すとして、

$$\frac{d[C]}{dt} = [F](t, [C]) , \quad \text{where } [C] = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_m \end{bmatrix} \text{ and } [F] = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_m \end{bmatrix} \quad (3.3.94)$$

また、 $k_1, k_2, k_3, k_4$  は、

$$\begin{bmatrix} k_{11} \\ k_{12} \\ \dots \\ \dots \\ k_{1m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta t \times f_1(t^n, C_1^n, C_2^n, \dots, C_m^n) \\ \Delta t \times f_2(t^n, C_1^n, C_2^n, \dots, C_m^n) \\ \dots \\ \dots \\ \Delta t \times f_m(t^n, C_1^n, C_2^n, \dots, C_m^n) \end{bmatrix} \quad (3.3.95)$$

$$\begin{bmatrix} k_{21} \\ k_{22} \\ \dots \\ \dots \\ k_{2m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta t \times f_1\left\{\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \left(C_1^n + \frac{1}{2}k_{11}\right), \left(C_2^n + \frac{1}{2}k_{12}\right), \dots, \left(C_m^n + \frac{1}{2}k_{1m}\right)\right\} \\ \Delta t \times f_2\left\{\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \left(C_1^n + \frac{1}{2}k_{11}\right), \left(C_2^n + \frac{1}{2}k_{12}\right), \dots, \left(C_m^n + \frac{1}{2}k_{1m}\right)\right\} \\ \dots \\ \dots \\ \Delta t \times f_m\left\{\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \left(C_1^n + \frac{1}{2}k_{11}\right), \left(C_2^n + \frac{1}{2}k_{12}\right), \dots, \left(C_m^n + \frac{1}{2}k_{1m}\right)\right\} \end{bmatrix} \quad (3.3.96)$$

$$\begin{bmatrix} k_{31} \\ k_{32} \\ \dots \\ \dots \\ k_{3m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta t \times f_1\left\{\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \left(C_1^n + \frac{1}{2}k_{21}\right), \left(C_2^n + \frac{1}{2}k_{22}\right), \dots, \left(C_m^n + \frac{1}{2}k_{2m}\right)\right\} \\ \Delta t \times f_2\left\{\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \left(C_1^n + \frac{1}{2}k_{21}\right), \left(C_2^n + \frac{1}{2}k_{22}\right), \dots, \left(C_m^n + \frac{1}{2}k_{2m}\right)\right\} \\ \dots \\ \dots \\ \Delta t \times f_m\left\{\left(t^n + \frac{1}{2}\Delta t\right), \left(C_1^n + \frac{1}{2}k_{21}\right), \left(C_2^n + \frac{1}{2}k_{22}\right), \dots, \left(C_m^n + \frac{1}{2}k_{2m}\right)\right\} \end{bmatrix} \quad (3.3.97)$$

$$\begin{bmatrix} k_{41} \\ k_{42} \\ \dots \\ \dots \\ k_{4m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta t \times f_1\{(t^n + \Delta t), (C_1^n + k_{31}), (C_2^n + k_{32}), \dots, (C_m^n + k_{3m})\} \\ \Delta t \times f_2\{(t^n + \Delta t), (C_1^n + k_{31}), (C_2^n + k_{32}), \dots, (C_m^n + k_{3m})\} \\ \dots \\ \dots \\ \Delta t \times f_m\{(t^n + \Delta t), (C_1^n + k_{31}), (C_2^n + k_{32}), \dots, (C_m^n + k_{3m})\} \end{bmatrix} \quad (3.3.98)$$

のように表される．以上のことから差分式の解は式 (3.3.99) で得られる．

$$\begin{bmatrix} C_1^{n+1} \\ C_2^{n+1} \\ \dots \\ \dots \\ C_m^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1^n + \frac{1}{6}(k_{11} + 2k_{21} + 2k_{31} + k_{41}) \\ C_1^n + \frac{1}{6}(k_{12} + 2k_{22} + 2k_{32} + k_{42}) \\ \dots \\ \dots \\ C_1^n + \frac{1}{6}(k_{1m} + 2k_{2m} + 2k_{3m} + k_{4m}) \end{bmatrix} \quad (3.3.99)$$

### 3-3-5-2 水中での生物化学プロセス

本節で取り扱う生物化学プロセスは，生物的な活動による変形と，化学反応による解離，結合による変形の2つがある．生物化学的プロセスは多くの研究がなされており，ここでは例えば (Ji, 2008) や (Di Toro, 2001) により示される反応式に従った．

表 3.2 生化学プロセスと化学反応式

反応式
<p>光合成(NH<sub>4</sub>)</p> $92(\text{CO}_2) + 14(\text{HCO}_3^-) + 16(\text{NH}_4^+) + \text{HPO}_4^{2-} + 92(\text{H}_2\text{O}) \rightarrow (\text{CH}_2\text{O})_{106}(\text{NH}_3)_{16}(\text{H}_3\text{PO}_4) + 106(\text{O}_2)$
<p>光合成(NO<sub>3</sub>)</p> $106(\text{CO}_2) + 16(\text{NO}_3^-) + \text{HPO}_4^{2-} + 122(\text{H}_2\text{O}) + 18\text{H}^+ \rightarrow (\text{CH}_2\text{O})_{106}(\text{NH}_3)_{16}(\text{H}_3\text{PO}_4) + 138(\text{O}_2)$
<p>好気性分解</p> $(\text{CH}_2\text{O})_{106}(\text{NH}_3)_{16}(\text{H}_3\text{PO}_4) + 106(\text{O}_2) \rightarrow 92(\text{CO}_2) + 14(\text{HCO}_3^-) + 16(\text{NH}_4^+) + \text{HPO}_4^{2-} + 92(\text{H}_2\text{O})$
<p>窒素を使用する嫌気性文化史</p> $(\text{CH}_2\text{O})_{106}(\text{NH}_3)_{16}(\text{H}_3\text{PO}_4) + 94.4(\text{NO}_3^-) \rightarrow 55.2(\text{N}_2) + 92.4(\text{HCO}_3^-) + 13.6(\text{CO}_2) + \text{HPO}_4^{2-} + 92(\text{H}_2\text{O})$
<p>硫酸イオンを使用する嫌気性分解</p> $(\text{CH}_2\text{O})_{106}(\text{NH}_3)_{16}(\text{H}_3\text{PO}_4) + 53(\text{HSO}_4^-) \rightarrow 92(\text{CO}_2) + 14(\text{HCO}_3^-) + 16(\text{NH}_4^+) + \text{HPO}_4^{2-} + 92(\text{H}_2\text{O}) + 53(\text{HS}^-)$
<p>硝化</p> $\text{NH}_4^+ + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{NO}_3^- + 2\text{H}^+ + \text{H}_2\text{O}$
<p>硫化水素の酸化</p> $\text{H}_2\text{S} + 2\text{O}^2 \rightarrow 2\text{H}^+ + \text{SO}_4^{2-}$

#### 6-5-2-1 植物プランクトンのモデリング

水中底層での季節的な貧酸素化を再現するためには、クロロフィル $a$ の季節変化を精度よく再現することが非常に重要である。光制限については図 6.5 に示す Steel の式，また水温制限は植物プランクトンの種類に応じて図 6.6 に示す 3 種の制限を用いた。

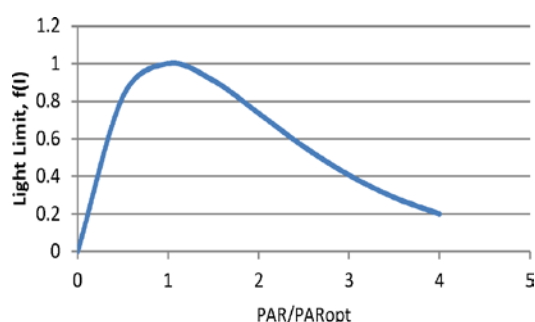


図 3.1.3 光制限の効果

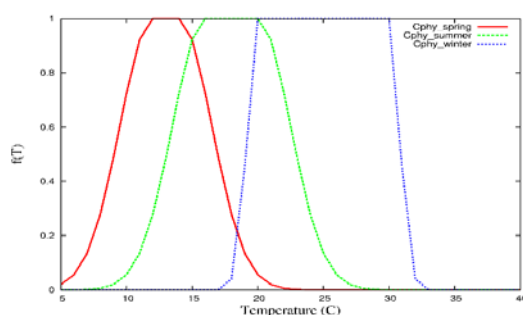


図 3.1.4 水温制限の効果

### 植物プランクトン

植物プランクトン濃度の時間変化とそれに関わる諸プロセスの詳細を記す。それぞれの記号については巻頭のリストを参照されたい。



$$\frac{dC_{phy}}{dt} = R_{PP_{phy}} - R_{Met_{phy}} - R_{Mor_{phy}} - R_{Graze_{phy}} \quad (3.3.100)$$

ここで各プロセスを詳細に見ていくと,

$$R_{PP_{phy}} = G_{phy} \times TL_{phy} \times LL_{phy} \times NL_{phy} \times CarbonL_{phy} C_{phy} \quad (3.3.101)$$

$$TL_{phy} = \begin{cases} e^{(GKL_{phy} \times (tempt - LOT_{phy}^2))} , & \text{if } tempt < LOT_{phy} \\ 1, & \text{if } LOT_{phy} < tempt < UOT_{phy} \\ e^{(-GKL_{phy} \times (tempt - UOT_{phy}^2))} , & \text{if } tempt > UOT_{phy} \end{cases} \quad (3.3.102)$$

$$LL_{phy} = \frac{PAR}{PAR_{opt}} \times e^{(1 - \frac{PAR}{PAR_{opt}})} \quad (3.3.103)$$

$$PAR = PAR_{sur} \times e^{-k_e D} \quad (3.3.104)$$

$$k_e = 0.022 + (C_{chl} + 27C_{SS} + 5.5 \times (35 - salt)) \times 0.0096 \quad (3.3.105)$$

$$PAR_{opt} = MAX(\frac{PAR_{opt}}{Photoinhibition}, PAR_{min_{phy}}) \quad (3.3.106)$$

$$NL_{phy} = MIN(C_{PO_4} NL, C_{nit} NL, C_{SiO_2} NL) \quad (3.3.107)$$

$$C_{PO_4} NL = f_{Monod}(C_{PO_4}, K_{PO_4}) \quad (3.3.108)$$

$$C_{nit} NL = f_{Monod}(C_{NH_4} + C_{NO_3}, K_{nit}) \quad (3.3.109)$$

$$C_{SiO_2} NL = f_{Monod}(C_{SiO_2}, K_{SiO_2}) \quad (3.3.110)$$

ここで,

$$f_{Monod} = \frac{Nutrient}{Nutrient_{sat\_half} + Nutrient} \quad (3.3.111)$$

また,

$$r_f = \frac{C_{NO_3}}{C_{NO_3} + C_{NH_4}} \quad (3.3.112)$$

で表される.

本モデルでは二酸化炭素濃度による光合成の制限を DIC による制限と捉え, Peter et al. (2004) を参考にし, 一定値30 $\mu$ mol/kgを使用することとした.

$$CarbonL_{phy} = 30 \text{ (}\mu\text{mol/kg)} \quad (3.3.113)$$

$$R_{Met_{phy}} = M_{phy} \times e^{0.04 \times (tempt - 20)} \times C_{phy} \quad (3.3.114)$$

$$R_{Mor_{phy}} = D_{phy} \times C_{phy} \quad (3.3.115)$$

### 動物プランクトン

動物プランクトン濃度の時間変化とそれに関わる諸プロセスの詳細を記す．それぞれの記号については巻頭のリストを参照されたい．

$$\frac{dC_{zoo}}{dt} = R_{Gro_{zoo}} - R_{Mor_{zoo}} \quad (3.3.115)$$

各プロセスの詳細をみると，

$$R_{Gro_{zoo}} = R_{Absor_{zoo}} - R_{Min_{food}} \quad (3.3.116)$$

$$R_{Absor_{zoo}} = Absorb_{portion} \times R_{Graze_{zoo}} \times f_{Monod}(C_{dox}, K_{dox_{zoo}}) \quad (3.3.117)$$

$$R_{Graze_{zoo}} = \sum R_{Graze_{each}} \quad (3.3.118)$$

$$R_{Graze_{each}} = R_{Graze_{pri}} \times \frac{Food_{each}}{Total_{food}} \quad (3.3.119)$$

$$R_{Graze_{pri}} = G_{zoo} \times TL_{zoo} \times FL_{zoo} \times C_{zoo} \quad (3.3.120)$$

また，

$$TL_{zoo} = e^{0.035 \times (tempt - 20)} \quad (3.3.121)$$

$$FL_{zoo} = 1 - e^{0.001 \times MIN(Food_{Threshold} - Total_{food}, 0)} \quad (3.3.122)$$

$$Total_{food} = \sum food_{each} \quad (3.3.123)$$

$$R_{Mor_{zoo}} = D_{zoo} \times C_{zoo} \times TL_{zoo} \times \frac{C_{zoo}}{MAX_{zoo}} \quad (3.3.124)$$

$$R_{Fecal_{zoo}} = R_{Graze_{zoo}} - R_{Absor_{zoo}} \quad (3.3.125)$$

$$R_{Met_{zoo}} = MIN(R_{Absor_{zoo}}, R_{Min_{food}}) \quad (3.3.126)$$

### 有機炭素

有機炭素濃度の時間変化とそれに関わる諸プロセスの詳細を記す．それぞれの記号については巻頭のリストを参照されたい．なお，実際のモデル内では易分解性有機物，難分解性有機物，非分解性有機物の３種類が用いられているが，各定数の値が異なるだけで生成項の中身は全て等しいものである．従ってここでは区別せずに扱う．

$$\frac{dC_{poc}}{dt} = \left\{ \sum_{p=1}^m R_{Mor_{phy,p}} + R_{Mor_{zoo}} + R_{Fecal_{zoo}} \right\} \times F_{labile} - R_{Grazee_{each}} \quad (3.3.127)$$

$$- R_{dec_{poc}} - R_{denit_{poc}} - R_{adec_{poc}} + \left( \frac{Aflux_{s2w}}{\Delta\sigma} \right)$$

[酸素存在下]

$$R_{dec_{poc}} = k_{dec_{poc}} \times \theta_{dec_{poc}} \times C_{poc} \quad (3.3.128)$$

好気性分解は DO によって制限されるので,

$$R_{dec_{poc}} = k_{dec_{poc}} \times \theta_{dec_{poc}} \times \frac{C_{dox}}{K_{O_2} + C_{dox}} \times C_{poc} \quad (3.3.129)$$

[無酸素下]

$$R_{denit_{NO_3}} = k_{denit_{poc}} \times \theta_{denit_{poc}} \times MIN\left(\frac{C_{dox}}{K_{O_2} + C_{dox}}, \frac{C_{poc}}{K_{NO_3} + C_{poc}}\right) \times C_{NO_3} \quad (3.3.130)$$

$$R_{denit_{poc}} = k_{denit_{poc}} \times \theta_{denit_{poc}} \times MIN\left(\frac{C_{dox}}{K_{O_2} + C_{dox}}, \frac{C_{poc}}{K_{NO_3} + C_{poc}}\right) \times C_{NO_3} \quad (3.3.131)$$

$$\times rCN_{denit}$$

## リン

リン濃度の時間変化の式を記す. それに関わる各プロセスはすでに述べたものと同様である.

$$\frac{dC_{PO_4}}{dt} = \left\{ \begin{array}{l} \sum R_{Met_{phy}} \\ + R_{Met_{zoo}} \\ - \sum R_{PP_{phy}} \\ + \sum R_{dec_{pocL}} \\ + \sum R_{denit_{pocL}} \\ + \sum R_{adec_{pocL}} \end{array} \right\} \times rPC_{dec} \quad (3.3.132)$$

$$+ \left( \frac{Aflux_{s2w}}{\Delta\sigma} \right)$$

## アンモニア

アンモニア濃度の時間変化の式を記す.

$$\begin{aligned} \frac{dC_{NH_4}}{dt} = & \left\{ \begin{array}{l} \sum R_{Met_{phy}} \\ + R_{Met_{zoo}} \\ - \sum R_{PP_{phy}} \times (1 - r_f) \\ + \sum R_{dec_{pocL}} \\ + \sum R_{denit_{pocL}} \\ + \sum R_{adec_{pocL}} \end{array} \right\} \times rNC_{dec} \\ & + \left( \frac{Aflux_{s2w}}{\Delta\sigma} \right) \\ & - R_{nitri_{NH_4}} \end{aligned} \quad (3.3.133)$$

硝化フラックス速度はアンモニア濃度と溶存酸素濃度によって制限されるので以下のように定式化できる.

$$R_{nitri_{NH_4}} = k_{nitri_{NH_4}} \times C_{NH_4} \times \frac{C_{NH_4}}{K_{nitri_{NH_4}} + C_{NH_4}} \times \frac{C_{dox}}{K_{O_2-NH_4} + C_{dox}} \quad (3.3.134)$$

### 硝酸態窒素

\_\_硝酸態窒素濃度の時間変化の式を記す

$$\begin{aligned} \frac{dC_{NO_3}}{dt} = & R_{nitri_{NH_4}} - \left\{ \sum R_{PP_{phy}} \times r_f \right\} \times rNC_{dec} \\ & - \sum R_{denit_{NO_3}} + \left( \frac{Aflux_{s2w}}{\Delta\sigma} \right) \end{aligned} \quad (3.3.135)$$

### 粒子態シリカ

\_\_粒子態シリカ濃度の時間変化の式を記す

$$\frac{dC_{PSi}}{dt} = \sum (R_{Mor_{phy}} \times rSi_{phy} \times rSi_{PSi}) - R_{Si_{pro}} \times rSi_{PSi} \quad (3.3.136)$$

ここで,

$$R_{Si_{pro}} = k_{Si} \times \theta_{Si} \times \frac{C_{PSi}}{K_{Si} + C_{PSi}} \times (C_{Si_{sat}} - C_{Si}) \quad (3.3.137)$$

である.

### 溶存態シリカ

\_\_溶存態シリカ濃度の時間変化の式を記す

$$\frac{dC_{Si}}{dt} = R_{Si_{pro}} - \sum (R_{PP_{phy}} \times r_{Si_{phy}}) + \left( \frac{Aflux_{s2w}}{\Delta\sigma} \right) \quad (3.3.138)$$

### 硫化物

\_\_硫化物濃度の時間変化の式を記す

$$\frac{dC_{H_2S}}{dt} = \sum R_{adec_{poc}} \times r_{CS_{dec}} - R_{H_2S_{oxi}} + \left( \frac{Aflux_{s2w}}{\Delta\sigma} \right) \quad (3.3.139)$$

### 溶存酸素

\_\_溶存酸素濃度の時間変化の式を記す

$$\begin{aligned} \frac{dC_{dox}}{dt} = & \left\{ \begin{array}{l} \sum R_{PP_{phy}} \\ - \sum R_{Met_{phy}} \\ - R_{Met_{zoo}} \\ - \sum R_{dec_{pocL}} \end{array} \right\} \times r_{OC_{dec}} \\ & - R_{nitri_{NH_4}} \times r_{ON_{nit}} \\ & - R_{H_2S_{oxi}} \times r_{CS_{oxi}} \\ & + \frac{1}{\Delta\sigma} K_{reaeration} (C_{sat} - C_{dox}) \end{aligned} \quad (3.3.140)$$

### 3-4 底質生態系モデル

本モデルでは水平方向に 2000m×2000m の格子が用いられている。底質有効層の初期の厚みは 50cm に設定されており、それを含めて 25 層のそれぞれ異なった厚さをもつ層から成り立っている。間隙率と有機炭素含有率との間の関係は、(岡田・古川, 2005) の分析による含水率 (WC) と有機炭素含有率 (POCC) との間の相関を基に算出している。間隙率は各タイムステップごとに有機炭素含有率によって求められている。底質各層の厚みは間隙率に応じて変化する。また、水質と同様にスタッガード格子を用いる。

#### 3-4-1 有機炭素含有率に応じた間隙率の変化

底質は無機底質 (本モデルではシルトとして扱う)、懸濁態有機炭素、懸濁態シリカ、水から構成されている。ここで  $m_b$  は底質のバルク質量、 $m_w$  は水の質量、 $m_{st}$  は乾燥底質の質量、 $V_b$  は底質のバルク体積、 $V_w$  は水の体積、 $V_{st}$  は乾燥底質の体積、 $\rho_w$  は水の密度、 $\rho_{st}$  は乾燥底質の密度、 $\phi$  は間隙率、そして  $n$  はある時刻を表すとする。岡田, 古川 (2005) に従うと、POCC は  $m_{poc}/m_{st}(\text{mg/g})$ 、WC は  $m_w/m_{st}(\%)$  で表現される。

$$\frac{m_{poc}}{m_{st}} = 0.075 \times WC + 1.12 \quad (3.4.1)$$

式を変形していくと、式 (3.4.2) が得られる。

$$\begin{aligned} WC &= \frac{m_w}{m_{st}} \times 100 \\ \Leftrightarrow WC &= \frac{\rho_w V_w}{\rho_{st} V_{st}} \times 100 \\ \Leftrightarrow WC &= \frac{\rho_w \phi V_b}{\rho_{st} (1 - \phi) V_b} \times 100 \\ \Leftrightarrow WC &= \frac{\phi}{(1 - \phi)} \frac{\rho_w}{\rho_{st}} \times 100 \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

ここで式 (3.4.2) を (3.4.1) に代入すると、式 (3.4.3) が得られる。

$$\frac{m_{poc}}{m_{st}} = 0.075 \times \frac{\phi}{(1 - \phi)} \frac{\rho_w}{\rho_{st}} \times 100 + 1.12 \quad (3.4.3)$$

これを  $\phi$  を得るために変形していくと、式 (3.4.4) のようになる。

$$\phi = \frac{1}{1 + \frac{1}{\left( \frac{m_{poc}}{m_{st}} - 1.12 \right) \times \frac{\rho_{st}}{7.5 \rho_w}}} \quad (3.4.4)$$

実際にはモデルの安定性を確保するために、式 (3.4.5) のようにモデリングしている。

$$\phi = \frac{1}{1 + \frac{1}{\left(\frac{m_{poc}}{m_{st}} + 1.12\right) \times \frac{\rho_{st}}{7.5\rho_w}}} \quad (3.4.5)$$

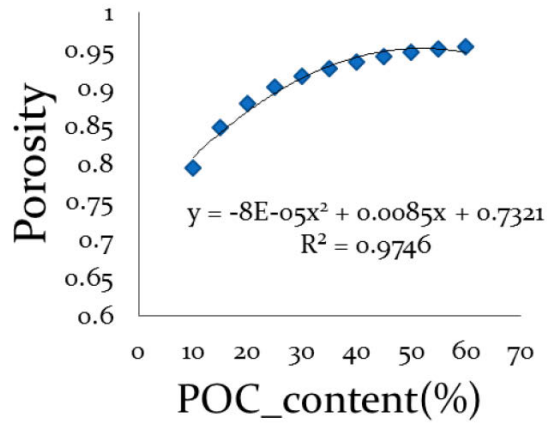


図 3.1 5 POC の変化に応じた間隙率 (岡田・古川, 2005)

#### 3-4-2 層厚調整

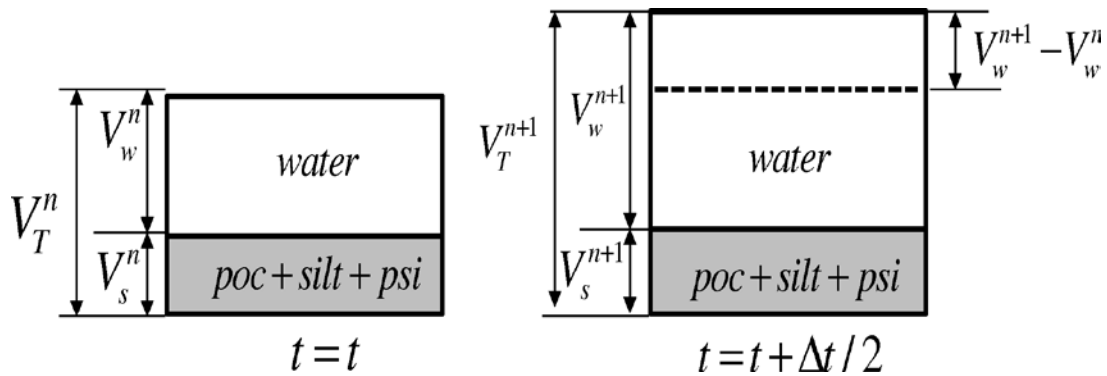


図 3.1 6 層厚調整のイメージ

間隙率は時間 $\Delta t/2$ が経過した時点で POCC の増加分に応じて変化すると考えている．間隙率の増加は，コントロールボリューム全体の体積増加につながる．

$t = t$ の時点での乾燥底質の体積は $V_s^n = (1 - \phi^n)V_T^n$ と書き表せる．

$t = t + \Delta t/2$ の時点での乾燥底質の体積は $V_s^{n+1} = (1 - \phi^{n+1})V_T^{n+1}$ と書き表せる．

また、タイムステップ $\Delta t/2$ , ( $\Delta t = 100(\text{s})$ ) の間乾燥底質の体積変化は無視できるほど小さいと仮定して,

$$\begin{aligned} V_s^n &= V_s^{n+1} \\ \Leftrightarrow (1 - \phi^n)V_T^n &= (1 - \phi^{n+1})V_T^{n+1} \\ \Leftrightarrow V_T^{n+1} &= \frac{(1 - \phi^n)}{(1 - \phi^{n+1})} V_T^n \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

ここで

$$MF = \frac{(1 - \phi^n)}{(1 - \phi^{n+1})} \quad (3.4.7)$$

とおくと,

$$V_T^{n+1} = MF \times V_T^n \quad (3.4.8)$$

従って, 新しい層厚は次のように計算される.

$$\Delta z^{n+1} = MF \times \Delta z^n \quad (3.4.9)$$

### 3-4-3 状態変数の濃度更新

先述したように層厚の変化が起こることによって, コントロールボリュームの体積が変化する. その結果として生じる状態変数の濃度変化を考慮していく

$t = t$ の時点での状態変数 $B$ の濃度は $B^n = \frac{m_B^n}{V_T^n}$ と書き表せる.

$t = t + \Delta t/2$ の時点での状態変数 $B$ の濃度は $B^{n+1} = \frac{m_B^{n+1}}{V_T^{n+1}}$ と書き表せる.

ここで,  $m_B^n$ は $t = t$ における状態変数の質量,  $m_B^{n+1}$ は $t = t + \Delta t/2$ における状態変数の質量を表す.

また, タイムステップ $\Delta t/2$ , ( $\Delta t = 100(\text{s})$ ) の間, 質量保存則を満たすと仮定して,

$$\begin{aligned} m_B^n &= m_B^{n+1} \\ \Leftrightarrow B^n V_T^n &= B^{n+1} V_T^{n+1} \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

ここで, 式 (3.4.8) より

$$V_T^{n+1} = MF \times V_T^n$$

であるから

$$B^n V_T^n = B^{n+1} (MF \times V_T^n) \quad (3.4.11)$$

従って, 更新された状態変数の濃度は以下のように計算される.



$$B^{n+1} = \frac{B^n}{MF} \quad (3.4.12)$$

#### 3-4-4 支配方程式の差分化

本研究で扱う底質モデルは水平方向に 2000m×2000m, 鉛直方向には厚さの異なる 25 層の z 座標系を適用している. またスタッガード格子を用い, コントロールボリュームに出入りするフラックスを考えることで, 3 次元レイヤーモデルの移流拡散方程式を導く. 今, 各辺の長さが  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  で体積が  $V$  であるコントロールボリュームを想定する. 移流フラックスは埋没の効果を表していると想定している.

##### 3-4-4-1 溶存態

水中の格子  $(i,j,k)$  に存在する状態変数  $B$  を  $B_{i,j,k}$  と定義すると, コントロールボリュームの正味の質量変化は, 移流拡散フラックスによる質量変化と化学反応による質量変化の総和に等しくなるはずである. 従って質量保存則は次のように書き表せる.

$$\begin{aligned} \text{Mass Change} = & \text{Net mass advection flux} + \text{net mass diffusion flux} \\ & + \text{mass source generation} \end{aligned} \quad (3.4.13)$$

$n$  を現在のタイムステップとすると, 期間  $\Delta t$  の間に起こる質量の変化は

$$\text{Mass Change} = (B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n) \Delta x \Delta y \Delta z \phi_{i,j,k} \quad (3.4.14)$$

また, コントロールボリュームの体積を  $V$  として, 移流フラックスは

$$\text{Net mass advection flux} = -(\omega_t B_t \phi_t - \omega_b B_b \phi_b) \Delta x \Delta y \Delta t \quad (3.4.15)$$

$$\Leftrightarrow -(\omega_{i,j,k+\frac{1}{2}} B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j,k-\frac{1}{2}} B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \Delta x \Delta y \Delta t$$

ここで, 拡散による z 軸方向の流入フラックス, 流出フラックスをそれぞれ  $(J_{i,j,k-\frac{1}{2}}, J_{i,j,k+\frac{1}{2}})$

とすると, 正味の拡散フラックスは,

$$\begin{aligned} \text{net mass diffusion flux} = & -(flux_t \times \phi_t - flux_b \times \phi_b) \Delta x \Delta y \Delta t \\ \Leftrightarrow & -(J_{i,j,k+\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - J_{i,j,k-\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \Delta x \Delta y \Delta t \end{aligned} \quad (3.4.16)$$

また, 拡散フラックス  $J_{i,j,k}$  はフィックの法則により

$$J_{i,j,k} = -K_{i,j,k} \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z}$$

で表せるので, 式 (3.4.16) は式 (3.4.17) に書き換えられる.

$$\begin{aligned}
& \text{net mass diffusion flux} = \\
& - \left\{ \left( -K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \left( -K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right\} \Delta x \Delta y \Delta t \\
& \Leftrightarrow \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right\} \Delta x \Delta y \Delta t
\end{aligned} \tag{3.4.17}$$

コントロールボリューム内における、 $s$ 種類の化学反応による状態変数の生成速度の総和を  $\sum_s R_s$  とすると、 $\Delta t$  間の生成量は式 (3.4.18) で表される。

$$\text{source generation} = \left[ \sum_s R_s \right] \Delta x \Delta y \Delta z_k \phi_{i,j,k} \Delta t \tag{3.4.18}$$

式 (3.4.14), (3.4.15), (3.4.17), (3.4.18) を (3.4.13) に代入すると、質量保存則は次のようになる。

$$\begin{aligned}
& (B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n) \Delta x \Delta y \Delta z_k \phi_{i,j,k} = \\
& - \left( \omega_{i,j,k+\frac{1}{2}} B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k;\frac{1}{2}} - \omega_{i,j,k-\frac{1}{2}} B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) \Delta x \Delta y \Delta t \\
& + \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right\} \Delta x \Delta y \Delta t \\
& + \left[ \sum_s R_s \right] \Delta x \Delta y \Delta z_k \phi_{i,j,k} \Delta t
\end{aligned} \tag{3.4.19}$$

さらに変形していくと、

$$\begin{aligned}
& \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n)}{\Delta t} \phi_{i,j,k} \\
& = - \frac{\left( \omega_{i,j,k+\frac{1}{2}} B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k;\frac{1}{2}} - \omega_{i,j,k-\frac{1}{2}} B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} \\
& + \frac{\left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right\}}{\Delta z_k} \\
& + \left[ \sum_s R_s \right] \phi_{i,j,k}
\end{aligned} \tag{3.4.20}$$

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} = -\omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right) + \left[ \sum_s R_s \right] \phi_{i,j,k} \quad (3.4.21)$$

式の順番を整理して,

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} - \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right) + \omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \left[ \sum_s R_s \right] \phi_{i,j,k} \quad (3.4.21)$$

溶存態栄養塩の割合に関しては、吸着と脱着の影響を考慮して決定されている。

図に示すように栄養塩（例えばリン）は間隙水中に溶存態として存在するものと、底質に吸着して存在する粒子態の2つの形態で存在している。

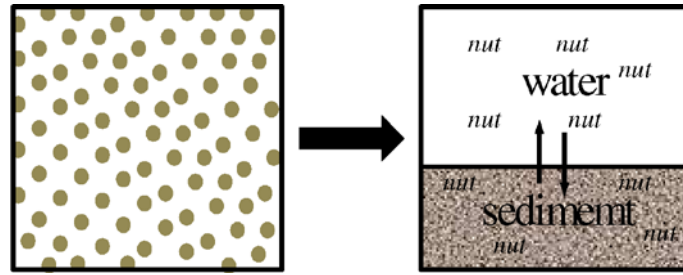


図 3.1 7 溶存態と粒子態の存在形態

この時拡散係数を  $K_{n,k} = (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k}$  で表すことにする。

ここで、 $f_p$ は粒子態の存在割合、 $f_d$ は溶存態の存在割合、 $D_p$ は粒子態の拡散係数、 $D_d$ は溶存態の拡散係数である。それぞれの存在割合は次の式 (7.22), (7.23) で計算される。

$$f_d_{i,j,k} = \frac{1}{1 + (m_{i,j,k} \pi_{i,j,k} / \phi_{i,j,k})} \quad (3.4.22)$$

$$f_p_{i,j,k} = \frac{(m_{i,j,k} \pi_{i,j,k} / \phi_{i,j,k})}{1 + (m_{i,j,k} \pi_{i,j,k} / \phi_{i,j,k})} \quad (3.4.23)$$

ここで、 $m_{i,j,k}$ は固体の濃度もしくはバルク体積に対する質量を表し、次のように計算される。

$$m_{i,j,k} = B_{silt}^n_{i,j,k} + B_{pocl}^n_{i,j,k} + B_{pocR}^n_{i,j,k} + B_{psi}^n_{i,j,k} \quad (3.4.24)$$

$\pi_{i,j,k}$ の値は状態変数の種類に依存し、ここでは (Di Toro, 2001) や (Ji, 2008) によって開発された式を用いる。アンモニアに関しては常に  $\pi_{i,j,k} = 1$  をとる。しかし、リン、シリカ、硫黄に関しては以下のように場合分けされる。

$$\left[ \text{if } B_{dox}(i,j,k) \leq B_{dox\_cri} \text{ then} \right] \pi_{nut} = \pi_{PO4\_anaerobic} \quad (3.4.25)$$

$$\left[ \text{else if } C_{dox}(i,j,1) \geq C_{dox\_cri} \text{ then} \right] \pi_{nut} = \pi_{PO4\_anaerobic} \times \Delta \pi_{pO4} \quad (3.4.26)$$

$$\left[ \text{else if } C_{dox}(i,j,1) \leq C_{dox\_cri} \text{ then} \right] \pi_{nut} = \pi_{PO4\_anaerobic} \times (\Delta \pi_{nut})^{\frac{C_{dox}(i,j,1)}{C_{dox\_cri}}} \quad (3.4.27)$$

改めてここまでを整理すると，溶存態の支配方程式は以下のように書き表せる．

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} + \omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} + \left[ \sum_s R_s \right] \phi_{i,j,k} \end{aligned} \quad (3.4.28)$$

また，計算の簡略化のために式 (3.4.28) を分割する．

移流拡散のみ

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} + \omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} \quad (3.4.29)$$

生成項のみ

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} = \sum_s R_s \quad (3.4.30)$$

生成項の差分式の解法は水質の時と同様に 4 次のルンゲクッタ法を用いる．

### 3-4-4-1-1 支配方程式の差分化

図に示すように，スカラー量は格子の中心，間隙率 $\phi$ は格子の表面で定義されている．まずは移流拡散のみを考えて差分式を展開していく．

#### 1. 時間微分項

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} = \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \times \phi_{i,j,k}^n \quad (3.4.31)$$

#### 2. 移流項

$$\omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \omega_{i,j} \frac{\left( f_{i,j,k+\frac{1}{2}} - f_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} \quad (3.4.32)$$

ここで，

$$f_{i,j,k+\frac{1}{2}} = B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} \quad (3.4.33)$$

$$f_{i,j,k-\frac{1}{2}} = B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \quad (3.4.34)$$

を表す．

濃度は陰的に、そして間隙率、層厚、埋没速度は陽的に評価していく。

$$\omega_{i,j} \frac{\partial(B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \frac{\omega_{i,j}}{\Delta z_k} (B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \quad (3.4.35)$$

表層濃度の評価には一次の風上差分法を適用する。

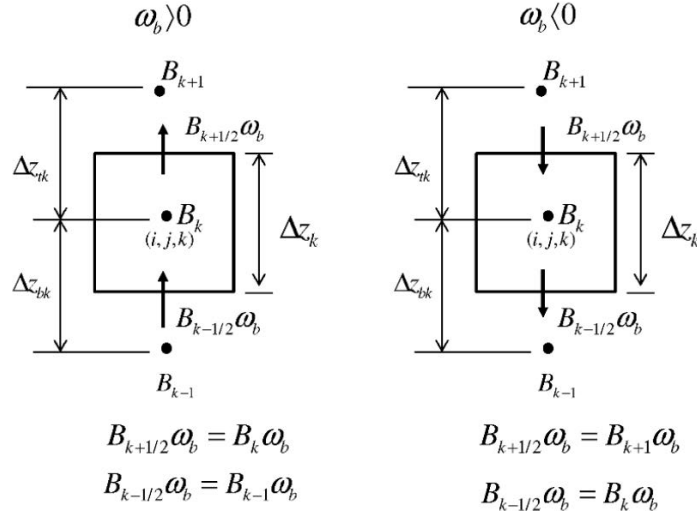


図 3.18 風上差分

$$\text{if } \omega_{i,j}^n > 0, \text{ then } \begin{cases} B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1} \\ B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \end{cases} \quad (3.4.36)$$

$$\text{if } \omega_{i,j}^n < 0, \text{ then } \begin{cases} B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k+1}^{n+1} \\ B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1} \end{cases} \quad (3.4.37)$$

ここで(Patankar, 1980)による新たな演算子 $\llbracket A, B \rrbracket$ を導入する。この演算子は $A$ と $B$ のうち大きいほうを採用することを意味する。これを用いると風上差分は次のように表される。

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k+1}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket \quad (3.4.38)$$

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket \quad (3.4.39)$$

間隙率の影響や隣接する2つの格子間での物質移動は、2つの層の間隙率のうち小さいほうの値を用いて計算されている。従って、コントロールボリューム境界の間隙率は次のようにして表される。

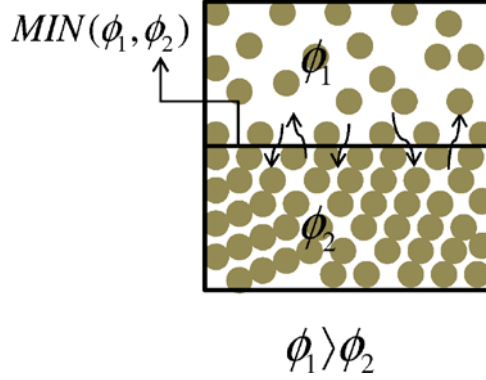


図 3.19 間隙率の設定

$$\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \quad (3.4.40)$$

$$\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n = MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \quad (3.4.41)$$

以上の定式化より，移流項は式 (3.4.42) で表される．

$$\begin{aligned} \omega_{i,j} \frac{\partial(B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = & \frac{1}{\Delta z_k^n} [(B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k+1}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket) \times MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \\ & - (B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket) \times MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)] \end{aligned} \quad (3.4.42)$$

### 3. 拡散項

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} &= \frac{\partial}{\partial z} (K_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z}) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{\Delta z_k} \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right\} \end{aligned} \quad (3.4.43)$$

濃度は陰的に評価されるが，ある 2 つの格子間の濃度は線形であると仮定する，区分線形を仮定する．また，層厚は陽的に解く．

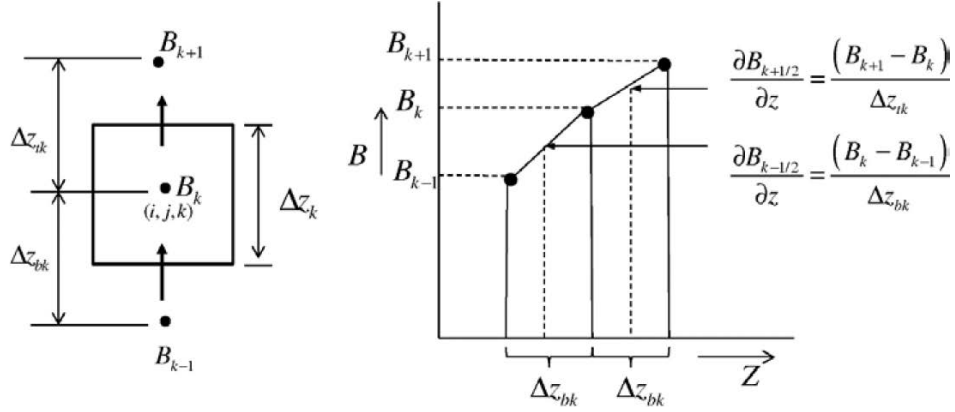


図 3.2 0 区分線形を仮定した濃度勾配

$$\frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n} \quad (3.4.44)$$

$$\frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n} \quad (3.4.45)$$

ここで,

$$\Delta z_{tk}^n = \frac{\Delta z_k^n + \Delta z_{k+1}^n}{2}, \quad \Delta z_{bk}^n = \frac{\Delta z_k^n + \Delta z_{k-1}^n}{2} \quad (3.4.46)$$

である。また、境界の間隙率は陽的に解き、隣接する 2 つのうち小さいほうの間隙率を用いるとして、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} \\ &= \frac{1}{\Delta z_k} \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z_{tk}^n} \right) \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right. \\ & \quad \left. - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z_{bk}^n} \right) \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right\} \end{aligned} \quad (3.4.47)$$

式 (3.4.31), (3.4.42), (3.4.47) を式 (3.4.29) に代入すると、移流拡散のみを考えたときの支配方程式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned}
& \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \times \phi_{i,j,k} = \\
& -\frac{1}{\Delta z_k^n} [(B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k+1}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket) \times \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \\
& \quad - (B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket) \times \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)] \\
& \quad + \frac{1}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} (B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^n) \right) \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} (B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^n) \right) \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right\}
\end{aligned} \tag{3.4.48}$$

ここで拡散係数を  $K_{n,k} = (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k}$  で表すと式 (3.4.49) となる。

$$\begin{aligned}
& \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \times \phi_{i,j,k} = \\
& -\frac{1}{\Delta z_k^n} [(B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k+1}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket) \times \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \\
& \quad - (B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket) \times \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)] \\
& \quad + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} (B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^n) \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \\
& \quad - \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} (B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^n) \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)
\end{aligned} \tag{3.4.49}$$

これを、状態変数  $B_{i,j,k}^n$  に着目して整理すると、

$$\begin{aligned}
& \left[ - \left( \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right) \frac{\text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k-1}^{n+1} \\
& + \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left[ \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right] \frac{\text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right. \\
& \quad \left. + \left( \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} \right) \frac{\text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k}^{n+1} \\
& + \left[ - \left( \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right) \frac{\text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k+1}^{n+1} \\
& = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{3.4.50}$$

この形は、 $a_k B_{i,j,k-1}^{n+1} + b_k B_{i,j,k}^{n+1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} = d_k$  のように表現できる。



ここで、 $a_k$ 、 $b_k$ 、 $c_k$ は陰的な項の係数であり、 $d_k$ は陽的な項の係数である。 $d_k$ は境界条件を考慮した後に値が更新される。

$$a_k = \left[ - \left( \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} + \frac{[\omega_{i,j}^n, 0]}{\Delta z_k^n} \right) \frac{MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] \quad (3.4.51)$$

$$b_k = \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left[ \frac{[\omega_{i,j}^n, 0]}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right] \frac{MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right. \\ \left. + \left( \frac{[-\omega_{i,j}^n, 0]}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} \right) \frac{MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] \quad (3.4.52)$$

$$c_k = \left[ - \left( \frac{[-\omega_{i,j}^n, 0]}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right) \frac{MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] \quad (3.4.53)$$

$$d_k = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \quad (3.4.54)$$

#### 3-4-4-2 粒子態

溶存態の場合と同様にコントロールボリュームの正味の質量変化は、移流拡散フラックスによる質量変化と化学反応による質量変化の総和に等しくなるはずである。従って質量保存則は次のように書き表せる。

$$\text{Mass Change} = \text{Net mass advection flux} + \text{net mass diffusion flux} + \text{mass source generation} \quad (3.4.55)$$

$n$ を現在のタイムステップとすると、期間 $\Delta t$ の間に起こる質量の変化は

$$\text{Mass Change} = (B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n) \Delta x \Delta y \Delta z_k (1 - \phi_{i,j,k}) \quad (3.4.56)$$

また、コントロールボリュームの体積を $V$ として、上向きが正の沈降速度 $\omega_t$ を導入すると、移流フラックスは

$$\text{Net mass advection flux} = -[\omega_t B_t (1 - \phi_t) - \omega_b B_b (1 - \phi_b)] \Delta x \Delta y \Delta t \\ \Leftrightarrow - \left[ \omega_{i,j,k+\frac{1}{2}} B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \left( 1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) - \omega_{i,j,k-\frac{1}{2}} B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \left( 1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) \right] \Delta x \Delta y \Delta t \quad (3.4.57)$$

ここで、拡散による $z$ 軸方向の流入フラックス、流出フラックスをそれぞれ $J_{i,j,k-\frac{1}{2}}$ 、 $J_{i,j,k+\frac{1}{2}}$

とすると、正味の拡散フラックスは、

$$\begin{aligned}
net\ mass\ diffusion\ flux &= -[flux_t \times (1 - \phi_t) - flux_b \times (1 - \phi_b)]\Delta x\Delta y\Delta t \\
&\Leftrightarrow -\left[J_{i,j,k+\frac{1}{2}}(1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) - J_{i,j,k-\frac{1}{2}}(1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}})\right]\Delta x\Delta y\Delta t
\end{aligned} \tag{3.4.58}$$

また，拡散フラックス $J_{i,j,k}$ はフィックの法則により

$$J_{i,j,k} = -K_{i,j,k} \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z}$$

で表せるので，式 (3.4.16) は式 (3.4.17) に書き換えられる．

$$\begin{aligned}
net\ mass\ diffusion\ flux &= \\
& -\left\{\left(-K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}\right)(1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) - \left(-K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right)(1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}})\right\}\Delta x\Delta y\Delta t \\
& \Leftrightarrow \left\{\left(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}\right)(1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) - \left(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right)(1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}})\right\}\Delta x\Delta y\Delta t
\end{aligned} \tag{3.4.59}$$

コントロールボリューム内における， $s$ 種類の化学反応による状態変数の生成速度の総和をを $\sum_s R_s$ とすると， $\Delta t$ 間の生成量は式 (3.4.60) で表される．

$$source\ generation = \left[\sum_s R_s\right]\Delta x\Delta y\Delta z_k(1 - \phi_{i,j,k})\Delta t \tag{3.4.60}$$

式 (3.4.56)，(3.4.57)，(3.4.59)，(3.4.60) を (3.4.55) に代入すると，質量保存則は次のようになる．

$$\begin{aligned}
& (B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n)\Delta x\Delta y\Delta z_k\phi_{i,j,k} = \\
& -\left(\omega_{i,j,k+\frac{1}{2}}B_{i,j,k+\frac{1}{2}}\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j,k-\frac{1}{2}}B_{i,j,k-\frac{1}{2}}\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right)\Delta x\Delta y\Delta t \\
& +\left\{\left(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}\right)\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \left(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right)\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right\}\Delta x\Delta y\Delta t \\
& +\left[\sum_s R_s\right]\Delta x\Delta y\Delta z_k\phi_{i,j,k}\Delta t
\end{aligned} \tag{3.4.61}$$

さらに変形していくと，

$$\begin{aligned}
& \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n)}{\Delta t} (1 - \phi_{i,j,k}) \\
&= - \frac{\left[ \omega_{i,j,k+\frac{1}{2}} B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \left(1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}\right) - \omega_{i,j,k-\frac{1}{2}} B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \left(1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right) \right]}{\Delta z_k} \\
&+ \frac{\left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \left(1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}\right) - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) \left(1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right) \right\}}{\Delta z_k} \\
&+ \left[ \sum_s R_s \right] (1 - \phi_{i,j,k})
\end{aligned} \tag{3.4.62}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \\
&= -\omega_{i,j} \frac{\partial [B_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k})]}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right] \\
&+ \left[ \sum_s R_s \right] (1 - \phi_{i,j,k})
\end{aligned} \tag{3.4.63}$$

式の順番を整理して,

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) - \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right] + \omega_{i,j} \frac{\partial [B_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k})]}{\partial z} \\
&= \left[ \sum_s R_s \right] (1 - \phi_{i,j,k})
\end{aligned} \tag{3.4.64}$$

また, 計算の簡略化のために式 (3.4.28) を分割する.

移流拡散のみ

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} + \omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} \tag{3.4.65}$$

生成項のみ

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} = \sum_s R_s \tag{3.4.66}$$

生成項の差分式の解法は水質の時と同様に 4 次のルンゲクッタ法を用いる.

#### 3-4-4-2-1 移流拡散方程式の差分化

図に示すように、スカラー量は格子の中心、間隙率 $\phi$ は格子の表面で定義されている。まずは移流拡散のみを考えて差分式を展開していく。

### 1. 時間微分項

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) = \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \times (1 - \phi_{i,j,k}^n) \quad (3.4.67)$$

### 2. 移流項

$$\omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \omega_{i,j} \frac{\left( f'_{i,j,k+\frac{1}{2}} - f'_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} \quad (3.4.68)$$

ここで、

$$f'_{i,j,k+\frac{1}{2}} = B_{i,j,k+\frac{1}{2}} (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) \quad (3.4.69)$$

$$f'_{i,j,k-\frac{1}{2}} = B_{i,j,k-\frac{1}{2}} (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \quad (3.4.70)$$

を表す。濃度は陰的に、そして間隙率、層厚、埋没速度は陽的に評価していく。

$$\omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \frac{\omega_{i,j}}{\Delta z_k} \left[ B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \left( 1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} \right) - B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \left( 1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right) \right] \quad (3.4.71)$$

以上の定式化より、溶存態の場合と同様の演算子を導入すると移流項は式 (3.4.72) で表される。

$$\begin{aligned} \omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \\ \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ (B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]) \times (1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)) \right. \\ \left. - (B_{i,j,k-1}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]) \times (1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)) \right] \end{aligned} \quad (3.4.72)$$

### 3. 拡散項

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} = \frac{\partial}{\partial z} (K_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z}) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{\Delta z_k} \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} \right) (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \right\} \end{aligned} \quad (3.4.73)$$

濃度は陰的に評価されるが、ある2つの格子間の濃度は線形であると仮定する、区分線形を仮定する。また、層厚は陽的に解く。

$$\frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n} \quad (3.4.74)$$

$$\frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n} \quad (3.4.75)$$

また、境界の間隙率は陽的に解き、隣接する2つのうち小さいほうの間隙率を用いるとして、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} \\ &= \frac{1}{\Delta z_k} \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \frac{B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta z_{tk}^n} \right) \left( 1 - \min(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right) \right. \\ & \quad \left. - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^n}{\Delta z_{bk}^n} \right) \left( 1 - \min(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.4.76)$$

式 (3.4.67), (3.4.72), (3.4.76) を式 (3.4.65) に代入すると、移流拡散のみを考えたときの支配方程式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} & \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) = \\ & - \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ (B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]) \times (1 - \min(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)) \right. \\ & \quad - (B_{i,j,k-1}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]) \\ & \quad \left. \times (1 - \min(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)) \right] \\ & + \frac{1}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \left\{ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}} (B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^n) \right) (1 - \min(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)) \right. \\ & \quad \left. - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} (B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^n) \right) (1 - \min(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)) \right\} \end{aligned} \quad (3.4.77)$$

これを、状態変数  $B_{i,j,k}^n$  に着目して整理すると、

$$\begin{aligned}
& \left[ - \left( \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right) \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k-1}^{n+1} \\
& + \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left[ \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right] \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right. \\
& + \left. \left( \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} \right) \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k}^{n+1} \\
& + \left[ - \left( \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right) \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k+1}^{n+1} \\
& = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{3.4.78}$$

この形は、 $a_k B_{i,j,k-1}^{n+1} + b_k B_{i,j,k}^{n+1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} = d_k$  のように表現できる。

ここで、 $a_k$ ,  $b_k$ ,  $c_k$  は陰的な項の係数であり、 $d_k$  は陽的な項の係数である。 $d_k$  は境界条件を考慮した後に値が更新される。

$$a_k = \left[ - \left( \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right) \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right] \tag{3.4.79}$$

$$\begin{aligned}
b_k = & \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left[ \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right] \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right. \\
& + \left. \left( \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{bk}^n} \right) \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right]
\end{aligned} \tag{3.4.80}$$

$$c_k = \left[ - \left( \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} + \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k \Delta z_{tk}^n} \right) \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{\phi_{i,j,k}^n} \right] \tag{3.4.81}$$

$$d_k = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \tag{3.4.82}$$

### 3-4-4-3 底質表層，底質底層の境界条件

開境界条件計算後，修正されることに留意．

#### 3-4-4-3-1 底質表層（溶存態）

溶存態の支配方程式は以下のように表される．

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} + \omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} \quad (3.4.83)$$

ここで， $(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k} = K_{i,j,k}$  ので

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} + \omega_{i,j} \frac{\partial (B_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K_{i,j,k} \times \phi_{i,j,k} \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} \quad (3.4.83)$$

また，

$$f_{i,j,k+\frac{1}{2}} = B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} \quad (3.4.84)$$

$$f_{i,j,k-\frac{1}{2}} = B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \quad (3.4.85)$$

$$F_{i,j,k+\frac{1}{2}} = (K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} \quad (3.4.86)$$

$$F_{i,j,k-\frac{1}{2}} = (K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \quad (3.4.87)$$

を用いて式（3.4.83）を変形すると

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} + \frac{\left( \omega_{i,j} f_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j} f_{j,j,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} = \frac{\left( F_{j,j,k+\frac{1}{2}} - F_{j,j,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} \quad (3.4.88)$$

ここで， $\omega_{i,j} f_{j,j,k+\frac{1}{2}}$ ， $F_{j,j,k+\frac{1}{2}}$  の項は水底質間のフラックスが計算された後に置き換えられる．

#### 1. 時間微分項

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} = \left( \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k} \quad (3.4.89)$$

#### 2. 移流項

濃度は陰的に，そして間隙率，層厚，埋没は陽的に差分化する．

$$\begin{aligned} \frac{\left(\omega_{i,j}f_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j}f_{j,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} &= \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n} - \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n} \\ &\Leftrightarrow \frac{F_{adv,s}}{\Delta z_k^n} - \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n} \end{aligned} \quad (3.4.90)$$

$F_{adv,s}$ は水底質間の移流に関する境界条件として分けて解かれて、後に置き換えられる。  
ここで表層の濃度を評価するために一次の風上差分を適用すると、

$$B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-1}^{n+1}, \quad \text{if} \quad \omega_{i,j}^n > 0 \quad (3.4.91)$$

$$B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1}, \quad \text{if} \quad \omega_{i,j}^n < 0 \quad (3.4.92)$$

また、演算子 $\llbracket A, B \rrbracket$ の導入により、風上差分は次のように表される。

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket \quad (3.4.93)$$

間隙率の評価には、先と同様に隣接する層の間隙率のうち小さいほうを用いる。

$$\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n = \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \quad (3.4.94)$$

以上のことから、移流項は式 (3.4.95) のように書き表せる。

$$\begin{aligned} \frac{\left(\omega_{i,j}f_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j}f_{j,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} &= \\ \frac{1}{\Delta z_k^n} [F_{adv,s} - (B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))] \end{aligned} \quad (3.4.95)$$

### 3. 拡散項

$$\begin{aligned} \frac{\left(F_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} &= \frac{\left(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} - \frac{\left(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \\ &\Leftrightarrow \frac{F_{dif,s}}{\Delta z_k} - \frac{\left(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \end{aligned} \quad (3.4.96)$$

$F_{dif,s}$ は水底質間の拡散項に関する境界条件として分けて解かれ、後にその値に置き換えられる。



濃度は区分線形を仮定して陰的に、また層厚は陽的に差分化され、

$$\frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n} \quad (3.4.97)$$

ここで、表層では  $B_{i,j,k+1}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1}$  なので、

$$\frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} = 0 \quad (3.4.98)$$

また、

$$\frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n} \quad (3.4.99)$$

ここで

$$\Delta z_{bk}^n = \frac{\Delta z_k^n + \Delta z_{k-1}^n}{2} \quad (3.4.100)$$

境界の間隙率は陽的に考え、隣接する2つのうち小さいほうを用いるとして、

$$\frac{(F_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F_{i,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} = \frac{1}{\Delta z_k} \left[ F_{dif,s} - (K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n}) MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right] \quad (3.4.101)$$

式 (3.4.95), (3.4.89), (3.4.101) を (3.4.88) に代入すると、

$$\begin{aligned} & \left( \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k}^n = \\ & - \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ F_{adv,s} - \left( B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right) \right] \\ & + \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ F_{dif,s} - ((f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n}) MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right] \end{aligned} \quad (3.4.102)$$

これを  $B_{i,j,k}^{n+1}$  に着目して整理すると、

$$\begin{aligned} & \left[ - \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k-1}^{n+1} \\ & + \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k}^{n+1} \\ & + [0] B_{i,j,k+1}^{n+1} = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \frac{F_{dif,s}}{\Delta z_k^n \phi_{i,j,k}^n} - \frac{F_{adv,s}}{\Delta z_k^n \phi_{i,j,k}^n} \end{aligned} \quad (3.4.103)$$

この形は、 $a_k B_{ij,k-1}^{n+1} + b_k B_{ij,k}^{n+1} + c_k B_{ij,k+1}^{n+1} = d_k$  のように表現できる。

ここで、 $a_k$ 、 $b_k$ 、 $c_k$  は陰的な項の係数であり、 $d_k$  は陽的な項の係数である。 $d_k$  は境界条件を考慮した後に値が更新される。

$$a_k = \left[ - \left\{ \frac{\left( (f_p D_p + f_d D_d)_{ij,k-\frac{1}{2}} \right)^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{ij}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{ij,k}^n, \phi_{ij,k-1}^n)}{\phi_{ij,k}^n} \right] \quad (3.4.104)$$

$$b_k = \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{\left( (f_p D_p + f_d D_d)_{ij,k-\frac{1}{2}} \right)^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket -\omega_{ij}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{ij,k}^n, \phi_{ij,k-1}^n)}{\phi_{ij,k}^n} \right] \quad (3.4.105)$$

$$c_k = 0 \quad (3.4.106)$$

$$d_k = \frac{B_{ij,k}^n}{\Delta t} + \frac{F_{diff,s}}{\Delta z_k^n \phi_{ij,k}^n} - \frac{F_{adv,s}}{\Delta z_k^n \phi_{ij,k}^n} \quad (3.4.107)$$

#### 3-4-4-3-2 底質底層（溶存態）

溶存態の支配方程式は以下のように表される。

$$\frac{\partial B_{ij,k}}{\partial t} \times \phi_{ij,k} + \omega_{ij} \frac{\partial (B_{ij,k} \times \phi_{ij,k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ (f_p D_p + f_d D_d)_{ij,k} \times \phi_{ij,k} \times \frac{\partial B_{ij,k}}{\partial z} \right\} \quad (3.4.108)$$

ここで、 $(f_p D_p + f_d D_d)_{ij,k} = K_{ij,k} \gamma_{\Delta}$  ので

$$\frac{\partial B_{ij,k}}{\partial t} \times \phi_{ij,k} + \omega_{ij} \frac{\partial (B_{ij,k} \times \phi_{ij,k})}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K_{ij,k} \times \phi_{ij,k} \times \frac{\partial B_{ij,k}}{\partial z} \right\} \quad (3.4.109)$$

また、

$$f_{ij,k+\frac{1}{2}} = B_{ij,k+\frac{1}{2}} \phi_{ij,k+\frac{1}{2}} \quad (3.4.110)$$

$$f_{ij,k-\frac{1}{2}} = B_{ij,k-\frac{1}{2}} \phi_{ij,k-\frac{1}{2}} \quad (3.4.111)$$

$$F_{ij,k+\frac{1}{2}} = (K_{ij,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{ij,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{ij,k+\frac{1}{2}} \quad (3.4.112)$$

$$F_{ij,k-\frac{1}{2}} = (K_{ij,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{ij,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{ij,k-\frac{1}{2}} \quad (3.4.113)$$

を用いて式（3.4.109）を変形すると

$$\frac{\partial B_{ij,k}}{\partial t} \times \phi_{ij,k} + \frac{\left( \omega_{ij} f_{ij,k+\frac{1}{2}} - \omega_{ij} f_{ij,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} = \frac{\left( F_{ij,k+\frac{1}{2}} - F_{ij,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} \quad (3.4.114)$$

ここで、 $\omega_{i,j}f_{j,j,k-\frac{1}{2}}$  ,  $F_{j,j,k-\frac{1}{2}}$ の項は水底質間のフラックスが計算された後に置き換えられる。

### 1. 時間微分項

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times \phi_{i,j,k} = \left( \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k} \quad (3.4.115)$$

### 2. 移流項

濃度は陰的に、そして間隙率、層厚、埋没は陽的に差分化する。

$$\begin{aligned} \frac{(\omega_{i,j}f_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j}f_{j,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} &= \frac{\omega_{i,j}^{n+1} B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n} - \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n} \\ &\Leftrightarrow \frac{\omega_{i,j}^{n+1} B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n} - \frac{F_{adv,b}}{\Delta z_k^n} \end{aligned} \quad (3.4.116)$$

$F_{adv,b}$ は底質底層の移流に関する境界条件として分けて解かれて、後に置き換えられる。

ここで表層の濃度を評価するために一次の風上差分を適用すると、

$$B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1} , \quad \text{if} \quad \omega_{i,j}^n > 0 \quad (3.4.117)$$

$$B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k+1}^{n+1} , \quad \text{if} \quad \omega_{i,j}^n < 0 \quad (3.4.118)$$

また、演算子 $[A, B]$ の導入により、風上差分は次のように表される。

$$\omega_{i,j}^{n+1} B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0] \quad (3.4.119)$$

間隙率の評価には、先と同様に隣接する層の間隙率のうち小さいほうを用いる。

$$\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \quad (3.4.120)$$

以上のことから、移流項は式 (3.4.95) のように書き表せる。

$$\begin{aligned} \frac{(\omega_{i,j}f_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j}f_{j,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} &= \\ \frac{1}{\Delta z_k^n} &[(B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]) \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) - F_{adv,b}] \end{aligned} \quad (3.4.121)$$

### 3. 拡散項

$$\begin{aligned} \frac{(F_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F_{i,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} &= \frac{(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} - \frac{(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} \\ &\Leftrightarrow \frac{(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k} - \frac{F_{dif,b}}{\Delta z_k} \end{aligned} \quad (3.4.122)$$

ここで,  $F_{dif,b} = 0$  と仮定する.

濃度は区分線形を仮定して陰的に, また層厚は陽的に差分化され,

$$\frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n} \quad (3.4.123)$$

$$\Delta z_{tk}^n = \frac{\Delta z_k^n + \Delta z_{k+1}^n}{2} \quad (3.4.124)$$

境界の間隙率は陽的に考え, 隣接する2つのうち小さいほうを用いるとして,

$$\frac{(F_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F_{i,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} = \frac{1}{\Delta z_k} \left[ (K_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n}) MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right] \quad (3.4.125)$$

支配方程式に代入すると,

$$\begin{aligned} &\left( \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) \phi_{i,j,k} = \\ &-\frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ (B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k+1}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket) MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) - F_{adv,b} \right] \\ &+ \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ ((f_p D_p + f_d D_d)^n_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n}) MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right] \end{aligned} \quad (3.4.126)$$

これを  $B_{i,j,k}^{n+1}$  に着目して整理すると,

$$\begin{aligned} [0]B_{i,j,k-1}^{n+1} + \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)^n_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k}^{n+1} \\ + \left[ - \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)^n_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] B_{i,j,k+1}^{n+1} = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \frac{F_{adv,b}}{\Delta z_k^n \phi_{i,j,k}^n} \end{aligned} \quad (3.4.127)$$

この形は、 $a_k B_{i,j,k-1}^{n+1} + b_k B_{i,j,k}^{n+1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} = d_k$ のように表現できる。

ここで、 $a_k$ 、 $b_k$ 、 $c_k$ は陰的な項の係数であり、 $d_k$ は陽的な項の係数である。 $d_k$ は境界条件を考慮した後に値が更新される。

$$a_k = 0 \quad (3.4.128)$$

$$b_k = \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] \quad (3.4.129)$$

$$c_k = \left[ - \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} + \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)}{\phi_{i,j,k}^n} \right] \quad (3.4.130)$$

$$d_k = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \frac{F_{adv,b}}{\Delta z_k^n \phi_{i,j,k}^n} \quad (3.4.131)$$

これは TDMA 法で解くことができる。

### 3-4-4-3 底質表層（粒子態）

粒子態の支配方程式は以下のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) + \omega_{i,j} \frac{\partial \{B_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k})\}}{\partial z} \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\} \end{aligned} \quad (3.4.132)$$

また、

$$f'_{i,j,k+\frac{1}{2}} = B_{i,j,k+\frac{1}{2}} (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) \quad (3.4.133)$$

$$f'_{i,j,k-\frac{1}{2}} = B_{i,j,k-\frac{1}{2}} (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \quad (3.4.134)$$

$$F'_{i,j,k+\frac{1}{2}} = (K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}) (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) \quad (3.4.135)$$

$$F'_{i,j,k-\frac{1}{2}} = (K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}) (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}) \quad (3.4.136)$$

を用いて式 (3.4.132) を変形すると

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) + \frac{(\omega_{i,j} f'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j} f'_{j,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} = \frac{(F'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - F'_{j,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} \quad (3.4.137)$$

ここで  $F'_{j,j,k+\frac{1}{2}} = 0$  を仮定し、また  $\omega_{i,j} f'_{j,j,k+\frac{1}{2}}$  の項は底質表層のフラックスが計算された後に置

き換えられる。

### 1. 時間微分項

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) = \left( \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) (1 - \phi_{i,j,k}) \quad (3.4.138)$$

### 2. 移流項

濃度は陰的に、そして間隙率、層厚、埋没は陽的に差分化する。

$$\begin{aligned} \frac{\left( \omega_{i,j} f'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j} f'_{j,j,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} &= \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n)}{\Delta z_k^n} - \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n)}{\Delta z_k^n} \\ &\Leftrightarrow \frac{F'_{adv,s}}{\Delta z_k^n} - \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n)}{\Delta z_k^n} \end{aligned} \quad (3.4.139)$$

$F'_{adv,s}$  は底質表層での移流に関する境界条件として分けて解かれて、後に置き換えられる。ここで表層の濃度を評価するために一次の風上差分を適用すると、

$$B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-1}^{n+1}, \quad \text{if} \quad \omega_{i,j}^n > 0 \quad (3.4.140)$$

$$B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1}, \quad \text{if} \quad \omega_{i,j}^n < 0 \quad (3.4.141)$$

また、演算子  $[A, B]$  の導入により、風上差分は次のように表される。

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-1}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0] \quad (3.4.142)$$

間隙率の評価には、先と同様に隣接する層の間隙率のうち小さいほうを用いる。

$$\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n = \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \quad (3.4.143)$$

以上のことから、移流項は式 (3.4.95) のように書き表せる。

$$\frac{\left( \omega_{i,j} f'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j} f'_{j,j,k-\frac{1}{2}} \right)}{\Delta z_k} = \quad (3.4.144)$$

$$\frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ F'_{adv,s} - \left\{ B_{i,j,k-1}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0] \left( 1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right) \right\} \right]$$

### 3. 拡散項

$$\begin{aligned}
& \frac{\left(F'_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F'_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} \\
&= \frac{\left(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} \\
&\quad - \frac{\left(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} \\
&\Leftrightarrow \frac{F'_{dif,s}}{\Delta z_k} - \frac{\left(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k}
\end{aligned} \tag{3.4.145}$$

は底質表層での拡散はゼロと仮定し、 $F'_{dif,s} = 0$  .

濃度は区分線形を仮定して陰的に、また層厚は陽的に差分化され、

$$\frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n} \tag{3.4.146}$$

ここで

$$\Delta z_{bk}^n = \frac{\Delta z_k^n + \Delta z_{k-1}^n}{2} \tag{3.4.147}$$

境界の間隙率は陽的に考え、隣接する2つのうち小さいほうを用いるとして、

$$\begin{aligned}
& \frac{\left(F'_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F'_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} \\
&= \frac{1}{\Delta z_k} \left[ F'_{dif,s} - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n} \right) (1 - MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)) \right]
\end{aligned} \tag{3.4.148}$$

式に代入すると、

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) (1 - \phi_{i,j,k}^n) = \\
& - \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ F'_{adv,s} - \left\{ B_{i,j,k-1}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0] (1 - MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)) \right\} \right] \\
& + \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ - \left( K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{(B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k-1}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n} \right) (1 - MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n)) \right]
\end{aligned} \tag{3.4.149}$$

これを $B_{i,j,k}^{n+1}$ に着目して整理すると、

$$\begin{aligned}
& \left[ - \left\{ \frac{K_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] B_{i,j,k-1}^{n+1} \\
& + \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{K_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] B_{i,j,k}^{n+1} + [0] B_{i,j,k+1}^{n+1} \\
& = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} + - \frac{F'_{adv,s}}{\Delta z_k^n (1 - \phi_{i,j,k}^n)}
\end{aligned} \tag{3.4.150}$$

この形は、 $a_k B_{i,j,k-1}^{n+1} + b_k B_{i,j,k}^{n+1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} = d_k$ のように表現できる。

ここで、 $a_k$ ,  $b_k$ ,  $c_k$ は陰的な項の係数であり、 $d_k$ は陽的な項の係数である。 $d_k$ は境界条件を考慮した後値が更新される。

$$a_k = \left[ - \left\{ \frac{K_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] \tag{3.4.151}$$

$$b_k = \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{K_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\Delta z_k^n \Delta z_{bk}^n} + \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] \tag{3.4.152}$$

$$c_k = 0 \tag{3.4.153}$$

$$d_k = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} + - \frac{F'_{adv,s}}{\Delta z_k^n (1 - \phi_{i,j,k}^n)} \tag{3.4.154}$$

#### 3-4-4-3-4 底質底層（粒子態）

粒子態の支配方程式は以下のように表される。

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) + \omega_{i,j} \frac{\partial \{B_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k})\}}{\partial z} \\
& = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ K_{i,j,k} \times (1 - \phi_{i,j,k}) \times \frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial z} \right\}
\end{aligned} \tag{3.4.108}$$

また,

$$f'_{i,j,k+\frac{1}{2}} = B_{i,j,k+\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} \tag{3.4.110}$$

$$f'_{i,j,k-\frac{1}{2}} = B_{i,j,k-\frac{1}{2}} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \tag{3.4.111}$$

$$F'_{i,j,k+\frac{1}{2}} = (K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}} \tag{3.4.112}$$



$$F'_{i,j,k-\frac{1}{2}} = (K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}) \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}} \quad (3.4.113)$$

を用いて式を変形すると

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) + \frac{(\omega_{i,j} f'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j} f'_{j,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} = \frac{(F'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - F'_{j,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} \quad (3.4.114)$$

ここで  $F'_{j,j,k-\frac{1}{2}} = 0$  を仮定し,  $\omega_{i,j} f'_{j,j,k-\frac{1}{2}}$  の項は底質底層のフラックスが計算された後に置き換えられる.

#### 1. 時間微分項

$$\frac{\partial B_{i,j,k}}{\partial t} \times (1 - \phi_{i,j,k}) = (\frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t})(1 - \phi_{i,j,k}) \quad (3.4.115)$$

#### 2. 移流項

濃度は陰的に, そして間隙率, 層厚, 埋没は陽的に差分化する.

$$\frac{(\omega_{i,j} f'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j} f'_{j,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} = \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n)}{\Delta z_k^n} - \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n)}{\Delta z_k^n} \quad (3.4.116)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n)}{\Delta z_k^n} - \frac{F'_{adv,b}}{\Delta z_k^n}$$

$F'_{adv,b}$  は底質底層の移流に関する境界条件として分けて解かれて, 後に置き換えられる.

ここで表層の濃度を評価するために一次の風上差分を適用すると,

$$B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1}, \quad \text{if } \omega_{i,j}^n > 0 \quad (3.4.117)$$

$$B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k+1}^{n+1}, \quad \text{if } \omega_{i,j}^n < 0 \quad (3.4.118)$$

また, 演算子  $[A, B]$  の導入により, 風上差分は次のように表される.

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0] \quad (3.4.119)$$

間隙率の評価には, 先と同様に隣接する層の間隙率のうち小さいほうを用いる.

$$\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \quad (3.4.120)$$

以上のことから、移流項は式 (3.4.95) のように書き表せる.

$$\frac{\left(\omega_{i,j} f'_{j,j,k+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j} f'_{j,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} = \quad (3.4.121)$$

$$\frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ \left\{ B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0] \left( 1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right) \right\} - F'_{adv,b} \right]$$

3. 拡散項

$$\begin{aligned} & \frac{\left(F'_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F'_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} \\ &= \frac{\left(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} \\ & \quad - \frac{\left(K_{i,j,k-\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k-\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} \\ & \Leftrightarrow \frac{\left(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z}\right) (1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}})}{\Delta z_k} - \frac{F'_{dif,b}}{\Delta z_k} \end{aligned} \quad (3.4.122)$$

ここで、 $F'_{dif,b} = 0$ と仮定する.

濃度は区分線形を仮定して陰的に、また層厚は陽的に差分化され、

$$\frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial z} = \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n} \quad (3.4.123)$$

$$\Delta z_{tk}^n = \frac{\Delta z_k^n + \Delta z_{k+1}^n}{2} \quad (3.4.124)$$

境界の間隙率は陽的に考え、隣接する2つのうち小さいほうを用いるとして、

$$\begin{aligned} & \frac{\left(F'_{i,j,k+\frac{1}{2}} - F'_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right)}{\Delta z_k} \\ &= \frac{1}{\Delta z_k} \left[ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{bk}^n} \right) \left( 1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.4.125)$$

支配方程式に代入すると、

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{B_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^n}{\Delta t} \right) (1 - \phi_{i,j,k}) = \\
& - \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ \left\{ B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k+1}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket \left( 1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right) \right\} - F_{adv,b} \right] \\
& + \frac{1}{\Delta z_k^n} \left[ \left( K_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \frac{(B_{i,j,k+1}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1})}{\Delta z_{tk}^n} \right) \left( 1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.4.126}$$

これを  $B_{i,j,k}^{n+1}$  に着目して整理すると,

$$\begin{aligned}
[0]B_{i,j,k-1}^{n+1} + & \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] B_{i,j,k}^{n+1} \\
& + \left[ - \left\{ \frac{K_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} + \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] B_{i,j,k+1}^{n+1} \\
& = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \frac{F'_{adv,b}}{\Delta z_k^n (1 - \phi_{i,j,k}^n)}
\end{aligned} \tag{3.4.127}$$

この形は,  $a_k B_{i,j,k-1}^{n+1} + b_k B_{i,j,k}^{n+1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} = d_k$  のように表現できる.

ここで,  $a_k$ ,  $b_k$ ,  $c_k$  は陰的な項の係数であり,  $d_k$  は陽的な項の係数である.  $d_k$  は境界条件を考慮した後値が更新される.

$$a_k = 0 \tag{3.4.128}$$

$$b_k = \left[ \frac{1}{\Delta t} + \left\{ \frac{(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} + \frac{\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] \tag{3.4.129}$$

$$c_k = \left[ - \left\{ \frac{K_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \Delta z_{tk}^n} + \frac{\llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket}{\Delta z_k^n} \right\} \frac{(1 - \text{MIN}(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n))}{(1 - \phi_{i,j,k}^n)} \right] \tag{3.4.130}$$

$$d_k = \frac{B_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \frac{F'_{adv,b}}{\Delta z_k^n (1 - \phi_{i,j,k}^n)} \tag{3.4.131}$$

これは TDMA 法で解くことができる.

#### 3-4-4-4 差分式の解法（TDMA 法）

差分式の解法として，Tri Diagonal Matrix Algorithm（TDMA）法，別名トーマスアルゴリズムを用いる．この名称は，方程式群の係数マトリックスを書いた際に，非ゼロ係数が行列の3つの対角線上に並ぶことに由来している．（三重対角行列アルゴリズム）．

今，方程式が式（3.4.132）の形で表されているとする．

$$a_k B_{i,j,k-1}^{n+1} + b_k B_{i,j,k}^{n+1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} = d_k \quad (3.4.132)$$

ここで  $k = -kbe$  のとき  $a_{-kbe} = 0$  であった．そのとき  $B_{i,j,-kbe-1}^{n+1}$  は何ら意味のある役割を持たない．

$$\begin{aligned} b_{-kbe} B_{i,j,-kbe}^{n+1} + c_{-kbe} B_{i,j,-kbe+1}^{n+1} &= d_{-kbe} \\ \Leftrightarrow B_{i,j,-kbe}^{n+1} &= \frac{d_{-kbe} - c_{-kbe} B_{i,j,-kbe+1}^{n+1}}{b_{-kbe}} \end{aligned} \quad (3.4.133)$$

式（3.4.133）を見ると， $B_{i,j,-kbe}^{n+1}$  は  $B_{i,j,-kbe+1}^{n+1}$  がわかれば求められることがわかる．同様に考えていくと最終的に  $B_{i,j,0}^{n+1}$  は  $B_{i,j,1}^{n+1}$  がわかれば求まるが，ここで  $k = 0$  のとき  $c_0 = 0$  だったことを思い出すと， $B_{i,j,0}^{n+1}$  はこの段階で求まる．

$$B_{i,j,0}^{n+1} = \frac{d_0 - c_0 B_{i,j,1}^{n+1}}{b_0} \quad (3.4.134)$$

$$B_{i,j,0}^{n+1} = \frac{d_0}{b_0} \quad (3.4.135)$$

したがってここから後退代入をしていくことができる．すなわち  $B_{i,j,0}^{n+1}$  によって  $B_{i,j,-1}^{n+1}$  が求まり， $B_{i,j,k}^{n+1}$  によって  $B_{i,j,k-1}^{n+1}$  が求まり，最終的に  $B_{i,j,-kbe+1}^{n+1}$  によって  $B_{i,j,-kbe}^{n+1}$  まで求まる．

この一連の流れが TDMA 法の基本である．

さて，前進代入の過程において，たとえば

$$B_{i,j,k-1}^{n+1} = P_{k-1} B_{i,j,k}^{n+1} + Q_{k-1} \quad (3.4.136)$$

が得られたら，ただちに

$$B_{i,j,k}^{n+1} = P_k B_{i,j,k+1}^{n+1} + Q_k \quad (3.4.137)$$

の関係を求めようとするが，そこで式（3.4.136）を式（3.4.132）に代入してみると，

$$\begin{aligned} a_k (P_{k-1} B_{i,j,k}^{n+1} + Q_{k-1}) + b_k B_{i,j,k}^{n+1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} &= d_k \\ \Leftrightarrow (a_k P_{k-1} + b_k) B_{i,j,k}^{n+1} + a_k Q_{k-1} + c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} &= d_k \\ \Leftrightarrow (a_k P_{k-1} + b_k) B_{i,j,k}^{n+1} &= -c_k B_{i,j,k+1}^{n+1} + (d_k - a_k Q_{k-1}) \\ \Leftrightarrow B_{i,j,k}^{n+1} &= \frac{c_k}{a_k P_{k-1} + b_k} B_{i,j,k+1}^{n+1} + \frac{d_k - a_k Q_{k-1}}{a_k P_{k-1} + b_k} \end{aligned} \quad (3.4.138)$$

となり，式（3.4.137）とほぼ同じ形をしていることがわかる．

便宜上

$$P_k = \frac{c_k}{a_k P_{k-1} + b_k} \quad (3.4.139)$$

$$Q_k = \frac{d_k - a_k Q_{k-1}}{a_k P_{k-1} + b_k} \quad (3.4.140)$$

これらは漸化式で $P_k$ ,  $Q_k$ は $P_{k-1}$ ,  $Q_{k-1}$ で与えられている.  
すると, 計算は以下のステップにより進められる.

**STEP1** :  $k = -kbe$ のときの $P_{-kbe}$ ,  $Q_{-kbe}$ を求める.

$k = -kbe$ のとき,  $a_{-kbe} = 0$ であるから,

$$P_{-kbe} = \frac{c_{-kbe}}{b_{-kbe}}, \quad Q_k = \frac{d_{-kbe}}{b_{-kbe}}$$

**STEP2** :  $k = -kbe + 1$ から $k = 0$ までの $P$ ,  $Q$ を関係式の利用により順番に求めていく.

$$P_k = \frac{-c_k}{a_k P_{k-1} + b_k}, \quad Q_k = \frac{d_k - a_k Q_{k-1}}{a_k P_{k-1} + b_k}$$

**STEP3** :  $k = 0$ のときの $B_{i,j,0}^{n+1}$ を求める.

$k = 0$ のとき $c_0 = 0$ であり, すなわち $B_{i,j,1}^{n+1} = 0$ を意味する.

$$B_{i,j,0}^{n+1} = P_0 B_{i,j,1}^{n+1} + Q_0$$

であるから,

$$B_{i,j,0}^{n+1} = Q_0$$

ここから後退代入が始まる.

**STEP4** :  $k = -1$ から $k = -kbe$ まで順番に,  $B_{i,j,k-1}^{n+1} = P_{k-1} B_{i,j,k}^{n+1} + Q_{k-1}$ の関係式より $B_{i,j,k}^{n+1}$ を求めていく.

#### 3-4-4-5 生成項

水質モデルと同様に差分式は4次のルンゲクッタ法で解かれる.

#### 有機炭素

有機炭素濃度の時間変化とそれに関わる諸プロセスの詳細を記す. それぞれの記号については巻頭のリストを参照されたい. なお, 実際のモデル内では易分解性有機物, 難分解性有機物, 非分解性有機物の3種類が用いられているが, 各定数の値が異なるだけで生成項の中身は全て等しいものである. 従ってここでは区別せずに扱う.

$$\frac{dB_{poc}}{dt} = -R_{dec_{poc}} - R_{denit_{poc}} - R_{adec_{poc}} \quad (3.4.141)$$

[酸素存在下]

$$R_{dec_{poc}} = k_{dec_{poc}} \times \theta_{dec_{poc}} \times B_{poc} \quad (3.4.142)$$

好気性分解は DO によって制限されるので,

$$R_{dec_{poc}} = k_{dec_{poc}} \times \theta_{dec_{poc}} \times \frac{B_{dox}}{K_{O_2} + B_{dox}} \times B_{poc} \quad (3.4.143)$$

[無酸素下]

$$R_{denit_{NO_3}} = k_{denit_{poc}} \times \theta_{denit_{poc}} \times MIN\left(\frac{B_{dox}}{K_{O_2} + B_{dox}}, \frac{B_{poc}}{K_{NO_3} + B_{poc}}\right) \times B_{NO_3} \quad (3.4.144)$$

$$R_{denit_{poc}} = k_{denit_{poc}} \times \theta_{denit_{poc}} \times MIN\left(\frac{B_{dox}}{K_{O_2} + B_{dox}}, \frac{B_{poc}}{K_{NO_3} + B_{poc}}\right) \times B_{NO_3} \quad (3.4.145)$$

$$\times r_{CN_{denit}}$$

## リン

リン濃度の時間変化を以下に記す.

$$\frac{dB_{PO_4}}{dt} = \left\{ \begin{array}{l} \sum R_{dec_{pocL}} \\ + \sum R_{denit_{pocL}} \\ + \sum R_{adec_{pocL}} \end{array} \right\} \times r_{PC_{dec}} \quad (3.4.146)$$

## アンモニア

アンモニア濃度の時間変化

$$\frac{dB_{NH_4}}{dt} = \left\{ \begin{array}{l} \sum R_{dec_{pocL}} \\ + \sum R_{denit_{pocL}} \\ + \sum R_{adec_{pocL}} \end{array} \right\} \times r_{NC_{dec}} \quad (3.4.147)$$

$$- R_{nitri_{NH_4}}$$

硝化フラックス速度はアンモニア濃度と溶存酸素濃度によって制限されるので以下のように定式化できる.

$$R_{nitri_{NH_4}} = k_{nitri_{NH_4}} \times B_{NH_4} \times \frac{B_{NH_4}}{K_{nitri_{NH_4}} + B_{NH_4}} \times \frac{B_{dox}}{K_{O_2_{NH_4}} + B_{dox}} \quad (3.4.148)$$

### 硝酸態窒素

硝酸態窒素の濃度の時間変化を以下に示す.

$$\frac{dB_{NO_3}}{dt} = R_{\text{nitri}_{NH_4}} - \sum R_{\text{denit}_{NO_3}} \quad (3.4.149)$$

### 粒子態シリカ

\_\_粒子態にシリカ濃度の時間変化

$$\frac{dB_{PSi}}{dt} = -R_{Si_{pro}} \times r_{Si_{PSi}} \quad (3.4.150)$$

ここで,

$$R_{Si_{pro}} = k_{Si} \times \theta_{Si} \times \frac{B_{PSi}}{K_{Si} + C_{PSi}} \times (B_{Si_{sat}} - B_{Si}) \quad (3.4.151)$$

### 溶存態シリカ

溶存態シリカ濃度の時間変化を以下に記す.

$$\frac{dB_{Si}}{dt} = R_{Si_{pro}} \quad (3.4.152)$$

### 硫化物

硫化物濃度の時間変化を記す.

$$\frac{dB_{H_2S}}{dt} = \sum R_{\text{adec}_{poc}} \times r_{CS_{dec}} - R_{H_2S_{oxi}} \quad (3.4.153)$$

### 溶存酸素

\_\_溶存酸素濃度の時間変化を記す.

$$\begin{aligned} \frac{dC_{dox}}{dt} = & \left\{ - \sum R_{\text{dec}_{pocL}} \right\} \times r_{OC_{dec}} \\ & - R_{\text{nitri}_{NH_4}} \times r_{ON_{nit}} \\ & - R_{H_2S_{oxi}} \times r_{CS_{oxi}} \end{aligned} \quad (3.4.154)$$

### 3-4-5 埋没速度の評価

堆積や侵食は底質の最上層で起こると仮定し, 埋没速度は上向きを正にとる.

$$\omega = - \frac{[Flux_{ss} \times 10^{-3} + (Flux_{poc} + Flux_{psi} Flux_{phy}) \times 10^{-6}]}{\rho_{bulk}} \quad (3.4.157)$$

ここで、バルク密度はコントロールボリューム内にある全物質の質量（水も含む）をバルク堆積で割ったものである．

$$\rho_{bulk} = \frac{m_s + m_{poc} + m_{psi} + m_w}{V_b} \quad (3.4.158)$$

また、状態変数の濃度はバルク体積の中に含まれる該当物質の質量と定義されていたので、

$$\rho_{bulk} = \frac{B_{ss} \times 10^{-3} V_b + (B_{poc} V_b + B_{psi} V_b) \times 10^{-6} + \phi V_b \rho_w}{V_b} \quad (3.4.159)$$

$$\Leftrightarrow \rho_{bulk} = B_{ss} \times 10^{-3} + (B_{poc} + B_{psi}) \times 10^{-6} + \phi \rho_w$$

したがって、モデル内で埋没速度は次の式のように計算される．

$$\omega = - \frac{[Flux_{ss} \times 10^{-3} + (Flux_{poc} + Flux_{psi} Flux_{phy}) \times 10^{-6}]}{B_{ss} \times 10^{-3} + (B_{poc} + B_{psi}) \times 10^{-6} + \phi \rho_w} \quad (3.4.160)$$



### 3.5 境界面フラックスの設定および水底質統合方法

この章では3種類の境界フラックスについて述べていく．一つ目は海水面でのフラックス，二つ目は水底質間のフラックス，三つ目は底質底層でのフラックスである．海水面でのフラックスは酸素と全炭酸濃度以外はゼロである水底質間では溶存態酸素や溶存態栄養塩が，濃度差によって生じる拡散による交換を行っている．さらに，栄養塩の底質から水中への拡散フラックスは海底の酸素濃度によっても制限される．粒子態物質に関しては水底質間の拡散はゼロである．埋没の効果による移流フラックスは溶存態，粒子態ともに適用される．底質底層においてはすべての状態変数に関して拡散フラックスはゼロであるとし，移流フラックスのみ溶存態，粒子態の両方に適用される．

#### 3-5-1 海面での酸素フラックス

海面での酸素フラックスは海表面の溶存酸素濃度と空気中の酸素濃度の差によって生じる曝気によるものである．

拡散項を考えると

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial z}\left(K_z \frac{\partial C_{dox}}{\partial z}\right) &= \frac{1}{\Delta z} \left\{ \left[ -K_z \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta z} \right]_t - \left[ -K_z \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta z} \right]_b \right\} \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{\Delta z} \{ Flux_t - Flux_b \}\end{aligned}\quad (3.5.1)$$

曝気は(Ji, 2008)により以下のように定式化されている．

$$Flux_t = -K_{reaeration}(C_{sat} - C_{dox_{i,j,ke}}^{n+1}) \quad (3.5.2)$$

$$\left[ -K_z \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta z} \right]_t = \frac{1}{D^{n+1}} \left[ -K_\sigma \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta \sigma} \right] = -K_{reaeration}(C_{sat} - C_{dox_{i,j,ke}}^{n+1}) \quad (3.5.3)$$

よって

$$\begin{aligned}\frac{1}{D^{n+1}} \frac{1}{\Delta \sigma} \left[ -K_\sigma \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta \sigma} \right] &= -\frac{1}{\Delta \sigma} K_{reaeration}(C_{sat} - C_{dox_{i,j,ke}}^{n+1}) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{D^{n+1}} \frac{1}{\Delta \sigma} \left[ K_\sigma \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta \sigma} \right] &= \frac{1}{\Delta \sigma} K_{reaeration}(C_{sat} - C_{dox_{i,j,ke}}^{n+1})\end{aligned}\quad (3.5.4)$$

#### 3-5-2 水底質間のフラックス

##### 3-5-2-1 溶存態

##### 3-5-2-1-1 拡散フラックス

$$Diffusion\ Flux\ s2w = \left[ -K_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}}{\partial \sigma} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right] \times flag1\_0 \quad (3.5.9)$$

$$Diffusion\ Flux\ s2w = \left[ -K_{i,j,0+\frac{1}{2}}^n \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1}}{\frac{\Delta z_0^n}{2}} \phi_{i,j,0+\frac{1}{2}}^n \right] \times flag1\_0 \quad (3.5.10)$$

今までと同様に隣接する2つの間隙率のうち小さいほうを採用するとして、

$$\phi_{i,j,0+\frac{1}{2}}^n = MIN(\phi_{i,j,1}^n, \phi_{i,j,0}^n)$$

$$Diffusion\ Flux\ s2w = \left[ -K_{i,j,0+\frac{1}{2}}^n \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1}}{\frac{\Delta z_0^n}{2}} MIN(\phi_{i,j,1}^n, \phi_{i,j,0}^n) \right] \times flag1\_0 \quad (3.5.11)$$

ここで $\phi_{i,j,1}^n = 1$ と仮定すると

$$Diffusion\ Flux\ s2w = \left[ -K_{i,j,0+\frac{1}{2}}^n \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1}}{\frac{\Delta z_0^n}{2}} \phi_{i,j,0}^n \right] \times flag1\_0 \quad (3.5.12)$$

$$\Leftrightarrow \left[ -(f_p D_p + f_d D_d)_{i,j,0+\frac{1}{2}}^n \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - B_{i,j,k}^{n+1}}{\frac{\Delta z_0^n}{2}} \phi_{i,j,0}^n \right] \times flag1\_0$$

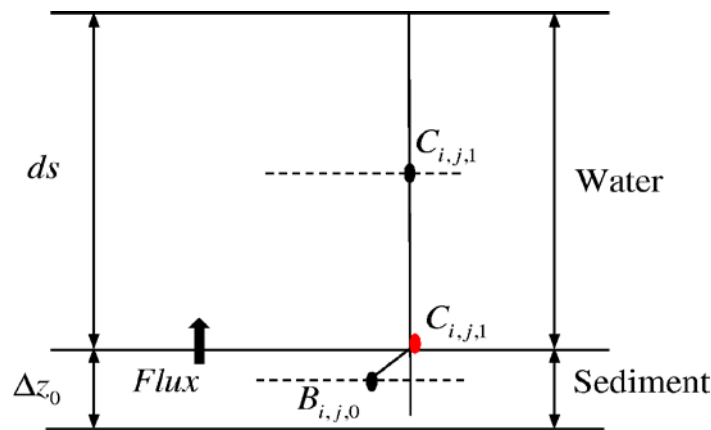


図 3.2 1 水底質間の濃度勾配

### 3-5-2-1-2 移流フラックス

$$flux\ s2w = \left[ \omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \right] \times flag1\_0 \quad (3.5.13)$$

風上差分法により

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0] \quad (3.5.14)$$

したがって

$$flux\ s2w = [B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k+1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]] \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \times flag1\_0 \quad (3.5.15)$$

ここで  $B_{i,j,k}^{n+1} \times flag1\_0 = C_{i,j,1}^{n+1}$  であるから

$$flux\ s2w = [B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - C_{i,j,1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]] \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \times flag1\_0 \quad (3.5.16)$$

コントロールボリューム今までと同様に隣接する 2 つの間隙率のうち小さいほうを採用するとして、

$$\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n = MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n)$$

$$flux\ s2w = [B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - C_{i,j,1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]] MIN(\phi_{i,j,k+1}^n, \phi_{i,j,k}^n) \times flag1\_0 \quad (3.5.17)$$

ここで  $\phi_{i,j,k+1}^n = 1$  と仮定すると

$$flux\ s2w = [B_{i,j,k}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - C_{i,j,1}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]] \phi_{i,j,k}^n \times flag1\_0 \quad (3.5.18)$$

### 3-5-3 底質底層

#### 3-5-3-1 溶存態

$$flux\ b2s = [\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n] \times flag1\_(-kbe) \quad (3.5.19)$$

ここで  $flag1\_(-kbe)$  は  $k = -kbe$  のとき 1, それ以外は 0 をとる.

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-1}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]$$

であるから、

$$flux\ b2s = [B_{i,j,k-1}^{n+1} [\omega_{i,j}^n, 0] - B_{i,j,k}^{n+1} [-\omega_{i,j}^n, 0]] \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \times flag1\_(-kbe) \quad (3.5.20)$$

と書き換えられる. ここで  $B_{i,j,k-1}^{n+1} \times flag1\_(-kbe) = B_{i,j,k}^{n+1} \times flag1\_(-kbe)$  と仮定すると、

$$flux\ b2s = [[\omega_{i,j}^n, 0] - [-\omega_{i,j}^n, 0]] B_{i,j,k}^{n+1} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \times flag1\_(-kbe) \quad (3.5.21)$$

コントロールボリューム今までと同様に隣接する 2 つの間隙率のうち小さいほうを採用するとして、

$$\begin{aligned}\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n &= MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \\ flux\ b2s &= [\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket] B_{i,j,k}^{n+1} MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \\ &\quad \times flag1_{-}(kbe)\end{aligned}\tag{3.5.22}$$

と書き換えられる．ここで  $\phi_{i,j,k-1}^n \times flag1_{-}(kbe) = \phi_{i,j,k-1}^n \times flag1_{-}(kbe)$  と仮定すると、

$$flux\ b2s = [\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket] B_{i,j,k}^{n+1} \phi_{i,j,k}^n \times flag1_{-}(kbe)\tag{3.5.23}$$

### 3-5-3-2 粒子態

$$flux\ b2s = \left[ \omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \left( 1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n \right) \right] \times flag1_{-}(kbe)\tag{3.5.24}$$

ここで  $flag1_{-}(kbe)$  は  $k = -kbe$  のとき 1、それ以外は 0 をとる．

$$\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} = B_{i,j,k-1}^{n+1} [\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket]$$

であるから、

$$flux\ b2s = [B_{i,j,k-1}^{n+1} \llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - B_{i,j,k}^{n+1} \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket] (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n) \times flag1_{-}(kbe)\tag{3.5.25}$$

と書き換えられる．ここで  $B_{i,j,k-1}^{n+1} \times flag1_{-}(kbe) = B_{i,j,k}^{n+1} \times flag1_{-}(kbe)$  と仮定すると、

$$flux\ b2s = [\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket] B_{i,j,k}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n) \times flag1_{-}(kbe)\tag{3.5.26}$$

コントロールボリューム今までと同様に隣接する 2 つの間隙率のうち小さいほうを採用するとして、

$$\begin{aligned}\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n &= MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \\ flux\ b2s &= [\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket] B_{i,j,k}^{n+1} \left( 1 - MIN(\phi_{i,j,k}^n, \phi_{i,j,k-1}^n) \right) \\ &\quad \times flag1_{-}(kbe)\end{aligned}\tag{3.5.27}$$

と書き換えられる．ここで  $\phi_{i,j,k-1}^n \times flag1_{-}(kbe) = \phi_{i,j,k-1}^n \times flag1_{-}(kbe)$  と仮定すると、

$$flux\ b2s = [\llbracket \omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket - \llbracket -\omega_{i,j}^n, 0 \rrbracket] B_{i,j,k}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k}^n) \times flag1_{-}(kbe)\tag{3.5.28}$$

### 3-5-4 水底質統合

水底質の統合は水中の最下層と底質の最上層の間でのフラックスのやりとりによって行われる．すべてのフラックス項は陽的に解かれ，TDMA 法の陽的項の係数に含められる．

#### 3-5-4-1 水中における境界フラックスの取り扱い

##### 3-5-4-1-1 溶存態

まず，鉛直拡散項は以下のように表されていた．

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[ K_z \frac{\partial C_{i,j,k}^{n+1}}{\partial z} \right] = \frac{1}{\Delta z} \left[ \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_t - \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_b \right]$$

これまでの移流拡散の計算では， $k = 1$ における $\left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_b$ はゼロであると仮定して進められてきた．しかし実際には溶存態の状態変数に関して $\left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_b$ はゼロではないので，ここで

計算をし，鉛直拡散の陽的項を修正することになる．また，このフラックスの項は陽的に計算されて，生成項に付け加える方法をとってもほとんど違いはないことが確かめられたので後者を適用する．

$k = 1$ （水中の最下層）では放出フラックス，吸収フラックスの両方とも起こりうる．ここで $\sigma$ 座標系における鉛直拡散は次のように表される．

$$\frac{1}{D^{n+1}} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ K_\sigma \frac{\partial C_{i,j,k}^{n+1}}{\partial \sigma} \right] = \frac{1}{D^{n+1}} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[ \left( K_\sigma \frac{\partial C}{\partial \sigma} \right)_t - \left( K_\sigma \frac{\partial C}{\partial \sigma} \right)_b \right]$$

また，フィックの法則によると， $\left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_b = -(Influx \ s2w)$

$$\begin{aligned} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_b &= \frac{1}{D^{n+1}} \left( K_\sigma \frac{\partial C}{\partial \sigma} \right) \\ \Leftrightarrow \left( K_\sigma \frac{\partial C}{\partial \sigma} \right) &= D^{n+1} \left( K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)_b \end{aligned}$$

従って水底質間のフラックスは

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{D^{n+1}} \frac{\partial}{\partial \sigma} (-D^{n+1} (Influx \ s2w)) \times flag1\_1 \\ & \Leftrightarrow \frac{1}{\Delta \sigma} (Influx \ s2w) \times flag1\_1 \end{aligned} \tag{3.5.29}$$

##### 3-5-4-1-2 粒子態

溶存態の場合と全く同様の手順で計算される．

### 3-5-4-2 底質中における境界フラックスの取り扱い

#### 3-5-4-2-1 溶存態

$$\text{修正項} = \frac{(K_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\partial z}) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n}{\Delta z_k^n \phi_{i,j,k}^n} \times \text{flag1\_0} \quad (3.5.30)$$

ここで

$$\text{diffusion flux s2w} = (-K_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \frac{\partial B_{i,j,k+\frac{1}{2}}^{n+1}}{\partial z}) \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n \times \text{flag1\_0} \quad (3.5.31)$$

従って

$$F_{dif,s} = (-\text{Diffusion flux s2w}) \quad (3.5.32)$$

$k = -kbe$ における移流は

$$\text{flux b2s} = [\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n] \times \text{flag1\_}(-kbe) \quad (3.5.33)$$

従って,

$$F_{adv,s} = \text{flux b2s} \quad (3.5.34)$$

#### 3-5-4-2-2 粒子態

溶存態の場合と同様の手順で求められる。

$$F'_{adv,s} = -\text{Flux b}(1 - \phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}) \quad (3.5.35)$$

$k = -kbe$ における移流は

$$\text{flux b2s} = [\omega_{i,j}^n B_{i,j,k-\frac{1}{2}}^{n+1} (1 - \phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n)] \times \text{flag1\_}(-kbe) \quad (3.5.36)$$

$$F'_{adv,b} = \text{flux b2s} \quad (3.5.37)$$

## 第4章 炭素モデル

### 4-1 全炭酸濃度 (DIC), 全アルカリ度 (TA)

本モデルでは4種の炭酸系パラメータ (DIC, TA, pH, pCO<sub>2</sub>) を計算する. このうち状態変数として解かれるのは DIC と TA のみであり, pH と pCO<sub>2</sub> は化学平衡の関係式から導かれる.

### 4-2 DIC, TA の生成項

#### 4-2-1 水質

移流拡散項は第3章で述べた式と等しいため, ここでは生成項のみを取り扱う.

### 全炭酸濃度

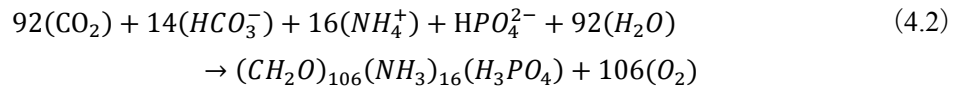
全炭酸濃度は本モデルで新たに追加した状態変数である. ここで改めて全炭酸濃度の定義を示す.

$$\text{DIC} = [\text{CO}_2^*] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] \quad (4.1)$$

表 3.2 に示す化学反応式の中で DIC を変動させるものについて個別に確認をしていく.

#### (a) 光合成によるCO<sub>2</sub>吸収

・[アンモニア態窒素を使用する場合]

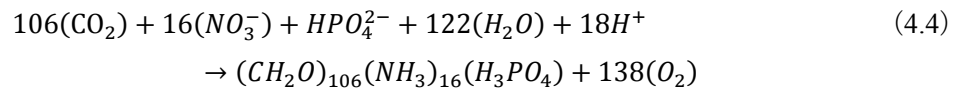


これを DIC に関してモデル内で使用する従属変数を用いて書き直すと

$$106C_{\text{DIC}} + 16C_{\text{NH}_4^+} + C_{\text{PO}_4} + 92\text{H}_2\text{O} \rightarrow 106C_{\text{poc}} + 106C_{\text{dox}} \quad (4.3)$$

となる.

・[硝酸態窒素を使用する場合]



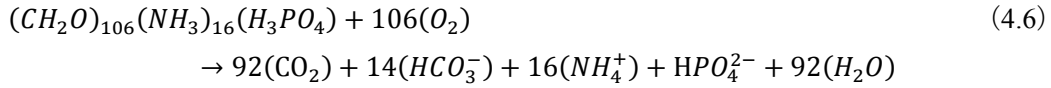
これを DIC に関してモデル内で使用する従属変数を用いて書き直すと

$$106C_{\text{DIC}} + 16C_{\text{NO}_3^-} + C_{\text{PO}_4} + 122\text{H}_2\text{O} + 18\text{H}^+ \rightarrow 106C_{\text{poc}} + 138C_{\text{dox}} \quad (4.5)$$

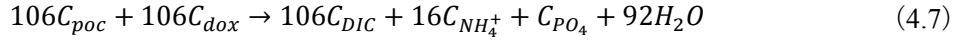
となる.

#### (b), (c), (d): 植物プランクトン, 動物プランクトンの代謝, 好気性分解

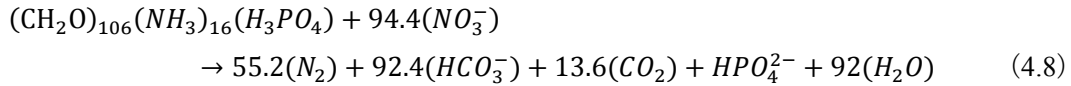
これらは光合成の逆反応に等しいので



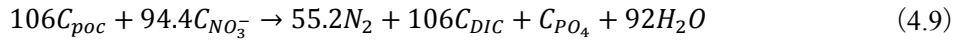
DIC に関する従属変数を用いて表すと



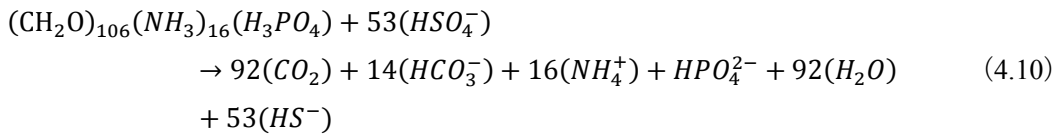
(e) 窒素を使用する嫌気性分解



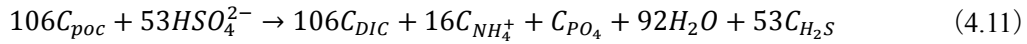
DIC に関する従属変数を用いて表すと,



(f) 硫酸イオンを使用する嫌気性分解



DIC に関する従属変数を用いて表すと



(g) 大気と海面でのCO<sub>2</sub>フラックス

第1章ですでに述べたように大気-海面における二酸化炭素フラックスは次のように計算される.

$$Flux = k \times K_0 \times (pCO2_{air} - pCO2_{sw}) \quad (4.12)$$

ここに,

$$k = 0.31 \times \left( \frac{660}{S_c} \right)^{0.5} \times (wind\ speed)^2 \times \frac{0.01}{3600} \quad [m/s]$$

$$S_c = 2073.1 - 125.62T + 3.6276T^2 - 0.043219T^3$$

$K_0$ は二酸化炭素の平衡定数

である.

以上の結果を表4.1にまとめる



表 4.1 DIC に関わる化学反応式

生化学プロセス	関係する従属変数で書き直した反応式	比
光合成(NH <sub>4</sub> )	$106M_{DIC} + 16M_{NH_4^+} + M_{PO_4} + 92H_2O$ $\rightarrow 106M_{poc} + 106M_{DO}$	POC : DIC = 1 : 1
光合成(NO <sub>3</sub> )	$106M_{DIC} + 16M_{NO_3^-} + M_{PO_4} + 122H_2O$ $+ 18H^+$ $\rightarrow 106M_{poc} + 138M_{DO}$	POC : DIC = 1 : 1
好気性分解	$106M_{poc} + 106M_{DO}$ $\rightarrow 106M_{DIC} + 16M_{NH_4^+} + M_{PO_4} + 92H_2O$	POC : DIC = 1 : 1
脱窒	$106M_{poc} + 94.4M_{NO_3^-}$ $\rightarrow 55.2N_2 + 106M_{DIC} + M_{PO_4} + 92H_2O$	NO <sub>3</sub> : DIC = 94.4 : 106
嫌気性分解	$106M_{poc} + 53HSO_4^{2-}$ $\rightarrow 106M_{DIC} + 16M_{NH_4^+} + M_{PO_4} + 92H_2O$ $+ 53M_{H_2S}$	POC : DIC = 1 : 1
硝化	なし	
硫化水素の酸化	なし	

DIC の時間変化を数式を用いて表現すると、次のようになる

$$\begin{aligned}
 \frac{dC_{DIC}}{dt} = & \left\{ \begin{array}{l} -\sum R_{PP_{phy}} \\ +\sum R_{Met_{phy}} \\ +R_{Met_{zoo}} \\ +\sum R_{dec_{poc}} \\ +\sum R_{adec_{poc}} \end{array} \right\} \times rDIC_{POC} \\
 & + \sum R_{denit_{poc}} \times rPOC_{NO_3} \\
 & + \frac{1}{\Delta\sigma} kK_0(pCO_{2sea} - pCO_{2air})
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

### 全アルカリ度

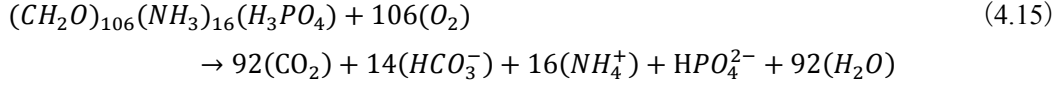
ここで、改めて全アルカリ度の定義を示す.

$$\begin{aligned}
 TA = & [HCO_3^-] + 2[CO_3^{2-}] + [B(OH)_4^-] + [OH^-] + [HPO_4^{2-}] + 2[PO_4^{3-}] + [H_3SiO_4] \\
 & + [NH_3] + [HS^-] - [H^+] - [HSO_4^-] - [HF] - [H_3PO_4]
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

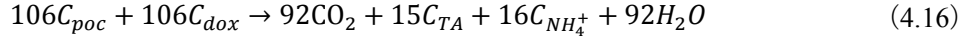
### 化学反応式

(A), (B), (C) 呼吸と分解

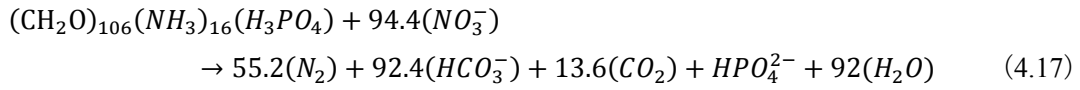
これらは光合成の逆反応に等しいので



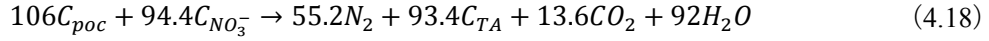
TA に関する従属変数を用いて表すと



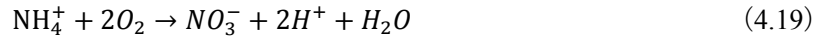
(D) 窒素を使用する嫌気分解



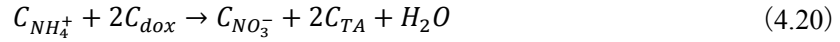
TA に関する従属変数を用いて表すと,



(E) 硝化

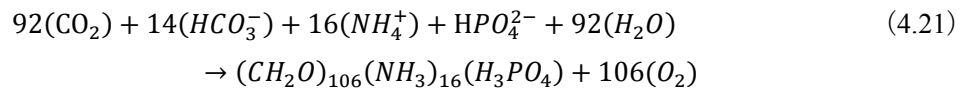


TA に関する従属変数を用いて表すと

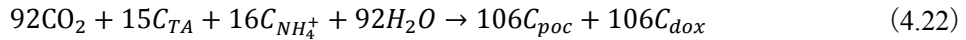


(F) 光合成

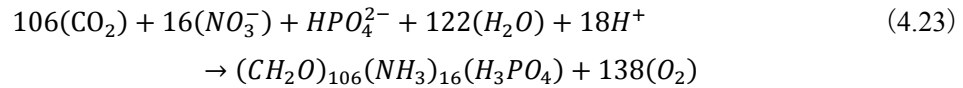
・ [アンモニア態窒素を使用する場合]



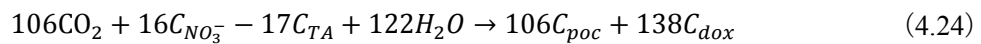
これらをモデル内で使用する従属変数を用いて TA に関して書き直すと



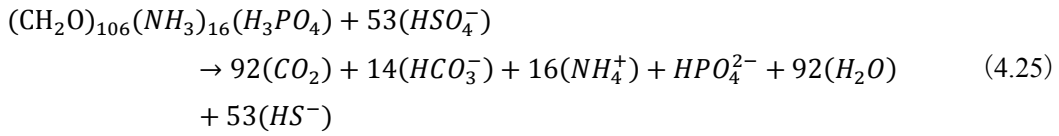
・ [硝酸態窒素を使用する場合]



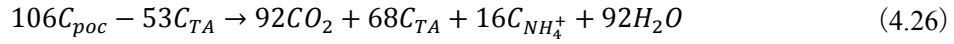
これらをモデル内で使用する従属変数を用いて TA に関して書き直すと



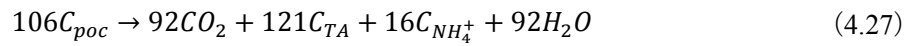
(G) 硫酸イオンを用いた嫌気性分解



従属変数を用いて表すと



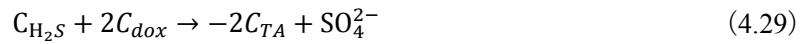
すなわち



(H)  $\text{H}_2\text{S}$ の酸化



従属変数を用いて表すと



以上の結果を表 4.2 にまとめる.

表 4.2 TA に関わる化学反応式

生化学プロセス	関係する従属変数で書き直した反応式	比
光合成( $\text{NH}_4$ )	$92\text{CO}_2 + 15M_{TA} + 16M_{\text{NH}_4^+} + 92H_2O$ $\rightarrow 106M_{poc} + 106M_{DO}$	POC : TA = 106 : 15
光合成( $\text{NO}_3$ )	$106\text{CO}_2 + 16M_{\text{NO}_3^-} - 17M_{TA} + 122H_2O$ $\rightarrow 106M_{poc} + 138M_{DO}$	POC : TA = 106 : -17
好気性分解	$106M_{poc} + 106M_{O_2}$ $\rightarrow 92\text{CO}_2 + 15M_{TA} + 16M_{\text{NH}_4^+} + 92H_2O$	POC : TA = 106 : 15
脱窒	$106M_{poc} + 94.4M_{\text{NO}_3^-}$ $\rightarrow 55.2N_2 + 93.4M_{TA} + 13.6\text{CO}_2 + 92H_2O$	POC : TA = 106 : 93.4
嫌気性分解	$106M_{poc} \rightarrow 92\text{CO}_2 + 121M_{TA} + 16M_{\text{NH}_4^+}$ $+ 92H_2O$	POC : TA = 106 : 121
硝化	$M_{\text{NH}_4^+} + 2M_{O_2} \rightarrow M_{\text{NO}_3^-} + 2M_{TA} + H_2O$	$\text{NH}_4$ : TA = 1 : 2
硫化水素の酸化	$M_{\text{H}_2\text{S}} + 2M_{DO} \rightarrow -2M_{TA} + \text{SO}_4^{2-}$	$\text{H}_2\text{S}$ : TA = 1 : -2

TA の時間変化を数式で表現すると次のようになる.

$$\begin{aligned}
\frac{dC_{TA}}{dt} = & \left\{ \begin{array}{l} + \sum R_{Met_{phy}} \\ + R_{Met_{zoo}} \\ + \sum R_{dec_{poc}} \\ + \sum R_{adec_{poc}} \end{array} \right\} \times rTA_{POC} \\
& + \sum R_{denit_{poc}} \times rTA_{NO_3} \\
& - R_{nitri_{NH_4}} \times rTA_{NH_4} \\
& + \sum R_{PP_{phy}} \times r_f \times rTA_{POC_{NO_3}} \\
& - \sum R_{PP_{phy}} \times (1 - r_f) \times rTA_{POC_{NH_4}} \\
& + R_{H_2S_{oxi}} \times rTA_{H_2S}
\end{aligned} \tag{4.30}$$

#### 4-2-2 底質

移流方程式は第3章で述べたものと等しいので、ここでは生成項のみを取り扱う。

##### 全炭酸濃度

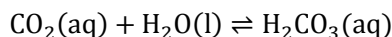
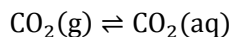
$$\begin{aligned}
\frac{dC_{DIC}}{dt} = & \left\{ \begin{array}{l} + \sum R_{dec_{poc}} \\ + \sum R_{adec_{poc}} \end{array} \right\} \times rDIC_{POC} \\
& + \sum R_{denit_{poc}} \times rDIC_{NO_3}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

##### 全アルカリ度

$$\begin{aligned}
\frac{dC_{TA}}{dt} = & \left\{ \begin{array}{l} + \sum R_{dec_{poc}} \\ + \sum R_{adec_{poc}} \end{array} \right\} \times rTA_{POC} \\
& + \sum R_{denit_{poc}} \times rTA_{NO_3} \\
& - R_{nitri_{NH_4}} \times rTA_{NH_4} \\
& + R_{H_2S_{oxi}} \times rTA_{H_2S}
\end{aligned} \tag{4.32}$$

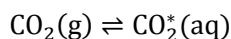
#### 4-3 pH, 二酸化炭素分圧 (pCO<sub>2</sub>)

本節では DIC, TA から pH, pCO<sub>2</sub> を計算する方法を解説する. 海水中の炭酸系を記述する式 Dickson, A.G., Sabine, C.L. and Christian, J.R. (Eds.) 2007. Guide to best practices for ocean CO<sub>2</sub> measurements. PICES Special Publication 3, 191 pp. を参考にした. CO<sub>2</sub> は水に溶解すると以下の反応式に示される通り, まず H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> になる.



ここに, (g) が気体, (l) が液体, (aq) が水溶液に溶けた状態を表している.

初めの式は気体状の CO<sub>2</sub> と水溶液に溶けて水和した CO<sub>2</sub> との間の化学平衡を表す. 2 番目の式で表されるのは, 水和した CO<sub>2</sub> と H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> との間の化学平衡である. この化学平衡は大きく左辺に偏っており, CO<sub>2</sub>(aq) と H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(aq) の濃度比はおよそ 1000:1 になっている. しかし, これらは酸塩基平衡を考える上で識別する必要がないことから, CO<sub>2</sub>(aq) と H<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(aq) を合わせて次のように表すのが一般的である.



次の情報が得られれば, 理論的には, ある特定の温度や圧力における海水サンプルの炭酸系を完全に記述することができる.

- ・ 海水中の CO<sub>2</sub> の溶解度,  $K_0$
- ・ 溶液中に存在すると仮定される個々の酸-塩基対の平衡定数
- ・ CO<sub>2</sub> 以外のすべての酸-塩基対の総濃度
- ・ CO<sub>2</sub> に関連するパラメータ ( $C_T, A_T, f\text{CO}_2, [\text{H}^+]$ ) のうち少なくとも 2 つの数値

#### 質量保存の式

ここで添え字 T は Total を意味し, 対象物質の総濃度をあらわす. 例えば,  $C_T$  は全炭酸濃度,  $A_T$  は全アルカリ度,  $P_T$  は全リン濃度である.

$$C_T = [\text{CO}_2^*] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}]$$

$$A_T = [\text{HCO}_3^-] + 2[\text{CO}_3^{2-}] + [\text{B}(\text{OH})_4^-] + [\text{OH}^-] + [\text{HPO}_4^{2-}] + 2[\text{PO}_4^{3-}] + [\text{SiO}(\text{OH})_3^-] \\ + [\text{NH}_3] + [\text{HS}^-] - [\text{H}^+] - [\text{HSO}_4^-] - [\text{HF}] - [\text{H}_3\text{PO}_4]$$

$$B_T = [\text{B}(\text{OH}_3)] + [\text{B}(\text{OH})_4^-]$$

$$S_T = [\text{HSO}_4^-] + [\text{SO}_4^{2-}]$$

$$F_T = [\text{HF}] + [\text{F}^-]$$

$$P_T = [\text{H}_3\text{PO}_4] + [\text{H}_2\text{PO}_4^-] + [\text{HPO}_4^{2-}] + [\text{PO}_4^{3-}]$$

$$\text{Si}_T = [\text{Si}(\text{OH})_4] + [\text{SiO}(\text{OH})_3^-]$$

$$\text{NH}_{3T} = [\text{NH}_4^+] + [\text{NH}_3]$$

$$\text{H}_2\text{S}_T = [\text{H}_2\text{S}] + [\text{HS}^-]$$

平衡定数

$$\begin{aligned}
 K_0 &= [\text{CO}_2^*]/f(\text{CO}_2) \\
 K_1 &= [\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]/[\text{CO}_2^*] \\
 K_2 &= [\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]/[\text{HCO}_3^-] \\
 K_B &= [\text{H}^+][\text{B}(\text{OH})_4^-]/[\text{B}(\text{OH}_3)] \\
 K_w &= [\text{H}^+][\text{OH}^-] \\
 K_S &= [\text{H}^+][\text{SO}_4^{2-}]/[\text{HSO}_4^-] \\
 K_F &= [\text{H}^+][\text{F}^-]/[\text{HF}] \\
 K_{1P} &= [\text{H}^+][\text{H}_2\text{PO}_4^-]/[\text{H}_3\text{PO}_4] \\
 K_{2P} &= [\text{H}^+][\text{HPO}_4^{2-}]/[\text{H}_2\text{PO}_4^-] \\
 K_{3P} &= [\text{H}^+][\text{PO}_4^{3-}]/[\text{HPO}_4^{2-}] \\
 K_{Si} &= [\text{H}^+][\text{SiO}(\text{OH})_3^-]/[\text{Si}(\text{OH})_4] \\
 K_{NH_3} &= [\text{H}^+][\text{NH}_3]/[\text{NH}_4] \\
 K_{H_2S} &= [\text{H}^+][\text{HS}^-]/[\text{H}_2\text{S}]
 \end{aligned}$$

各濃度は質量保存則の式と平衡定数を代入することで以下のようにも表すことができる。

$$\begin{aligned}
 [\text{HCO}_3^-] &= \frac{C_T K_1 [\text{H}^+]}{[\text{H}^+]^2 + K_1 [\text{H}^+] + K_1 K_2} \\
 [\text{CO}_3^{2-}] &= \frac{C_T K_1 K_2}{[\text{H}^+]^2 + K_1 [\text{H}^+] + K_1 K_2} \\
 [\text{B}(\text{OH})_4^-] &= B_T / (1 + [\text{H}^+]/K_B) \\
 [\text{OH}^-] &= K_w / [\text{H}^+] \\
 [\text{H}_3\text{PO}_4] &= \frac{P_T [\text{H}^+]^3}{[\text{H}^+]^3 + K_{1P} [\text{H}^+]^2 + K_{1P} K_{2P} [\text{H}^+] + K_{1P} K_{2P} K_{3P}} \\
 [\text{H}_2\text{PO}_4^-] &= \frac{P_T K_{1P} [\text{H}^+]^2}{[\text{H}^+]^3 + K_{1P} [\text{H}^+]^2 + K_{1P} K_{2P} [\text{H}^+] + K_{1P} K_{2P} K_{3P}} \\
 [\text{HPO}_4^{2-}] &= \frac{P_T K_{1P} K_{2P} [\text{H}^+]}{[\text{H}^+]^3 + K_{1P} [\text{H}^+]^2 + K_{1P} K_{2P} [\text{H}^+] + K_{1P} K_{2P} K_{3P}} \\
 [\text{PO}_4^{3-}] &= \frac{P_T K_{1P} K_{2P} K_{3P}}{[\text{H}^+]^3 + K_{1P} [\text{H}^+]^2 + K_{1P} K_{2P} [\text{H}^+] + K_{1P} K_{2P} K_{3P}} \\
 [\text{SiO}(\text{OH})_3^-] &= Si_T / (1 + [\text{H}^+]/K_{Si}) \\
 [\text{NH}_3] &= NH_{3T} / (1 + [\text{H}^+]/K_{NH_3}) \\
 [\text{HS}^-] &= H_2S_T / (1 + [\text{H}^+]/K_{H_2S}) \\
 [\text{H}^+]_F &= [\text{H}^+] / (1 + S_T/K_S) \\
 [\text{HSO}_4^-] &= S_T / (1 + K_S/[\text{H}^+]_F) \\
 [\text{HF}] &= F_T / (1 + K_F/[\text{H}^+])
 \end{aligned}$$

### $A_T$ と $C_T$ からその他のパラメータを求める方法

この2つを用いて解く最も簡単な方法は、 $A_T$ の表現式を全炭酸濃度と $[H^+]$ の項で書き直すことである。

$$A_T = \frac{C_T K_1 [H^+]}{[H^+]^2 + K_1 [H^+] + K_1 K_2} + \frac{2C_T K_1 K_2}{[H^+]^2 + K_1 [H^+] + K_1 K_2} + B_T / (1 + [H^+] / K_B) + K_w / [H^+] \\ + \frac{P_T K_{1P} K_{2P} [H^+]}{[H^+]^3 + K_{1P} [H^+]^2 + K_{1P} K_{2P} [H^+] + K_{1P} K_{2P} K_{3P}} \\ + \frac{2P_T K_{1P} K_{2P} K_{3P}}{[H^+]^3 + K_{1P} [H^+]^2 + K_{1P} K_{2P} [H^+] + K_{1P} K_{2P} K_{3P}} + Si_T / (1 + [H^+] / K_{Si}) \\ + NH_{3T} / (1 + [H^+] / K_{NH_3}) + H_2S_T / (1 + [H^+] / K_{H_2S}) - [H^+] - S_T / (1 \\ + K_S / [H^+]_F) - F_T / (1 + K_F / [H^+]) \\ - \frac{P_T [H^+]^3}{[H^+]^3 + K_{1P} [H^+]^2 + K_{1P} K_{2P} [H^+] + K_{1P} K_{2P} K_{3P}}$$

この式をニュートン-ラフソン法か単純な反復法を使って $[H^+]$ について解く。海水の計算において適切な初期値は $[H^+] = 10^{-8} \text{mol kg}^{-1}$ である。

$[H^+]$ が求まった後、

$$[HCO_3^-] = \frac{C_T K_1 [H^+]}{[H^+]^2 + K_1 [H^+] + K_1 K_2} \\ [CO_3^{2-}] = \frac{C_T K_1 K_2}{[H^+]^2 + K_1 [H^+] + K_1 K_2}$$

を計算し、その結果と

$$[CO_2^*] = \frac{[H^+][HCO_3^-]}{K_1}$$

から $[CO_2^*]$ を求め、

$$f(CO_2) = \frac{[CO_2^*]}{K_0}$$

から $f(CO_2)$ を求める。

## 4-4 大気海面フラックス

### 4-4-1 大気中二酸化炭素濃度の定式化

浦和で観測された大気中二酸化炭素濃度の時系列データを分析し、変動傾向を調査した。使用したデータは温室効果ガス世界資料センター

([http://ds.data.jma.go.jp/gmd/wdcgg/jp/wdcgg\\_j.html](http://ds.data.jma.go.jp/gmd/wdcgg/jp/wdcgg_j.html)) から入手した。

まず、日変動の傾向を調べるため、2000 年、2001 年の 2 年分の時系列データから各時間帯における二酸化炭素濃度の大きさを分析した結果を図 4.1 に示す。

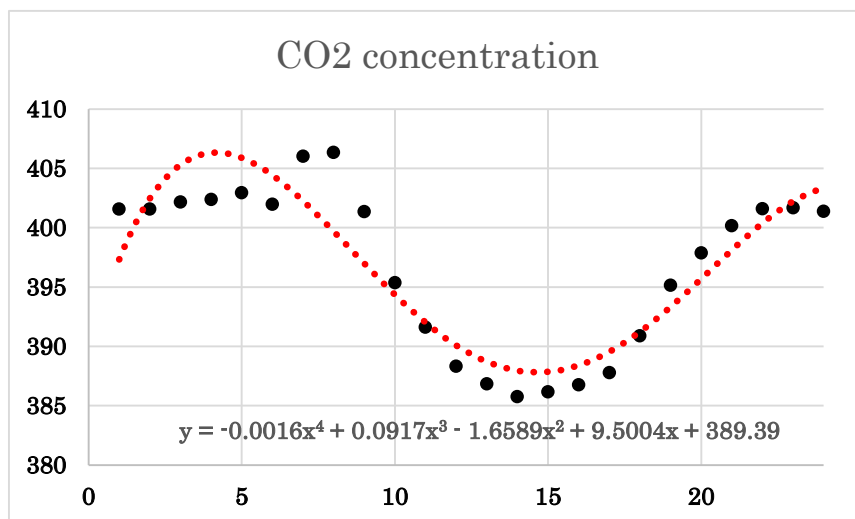


図 4.1 二酸化炭素濃度の季節変動

ここで横軸は 0 時から 24 時までの時間を表す。これを多項式近似すると

$$\begin{aligned} \text{CO}_2\text{濃度} = & -0.0016 \times (\text{hour})^4 + 0.0917 \times (\text{hour})^3 - 1.6589 \times (\text{hour})^2 \\ & - 1.6589 \times (\text{hour})^2 + 9.5004 \times (\text{hour}) + 389.39 \end{aligned} \quad (4.33)$$

と表された。

続いて統計分析ソフト R を用いて、1 年間の季節変動の傾向を分析した結果を図 4.2 に示す。

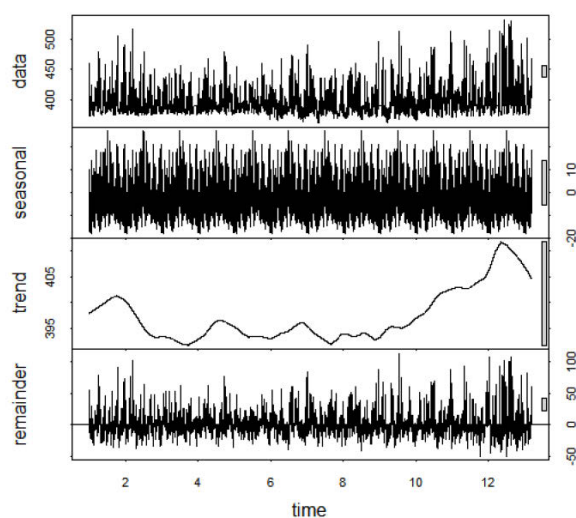


図 4.2 二酸化炭素濃度の日変動



ここで、図 4.2 の横軸は月を表しており、data カラムが入力元データ、seasonal カラムが周期的な季節パターン、trend カラムが傾向成分、remainder カラムが残りの不規則成分を表している。ここで、trend カラムの結果を 2 次式で近似したところ 1 年間のトレンドは

$$\text{CO}_2\text{濃度} = 6 \times 10^{-7} \times (\text{total\_hour})^2 - 4.6 \times 10^{-3} \times (\text{total\_hour}) + 400.86 \quad (4.34)$$

と表されることがわかった。ここで total\_hour は 1 月 1 日をゼロとした時の総経過時間 (hour) を表す。

以上から、本研究では日変動の式の定数部分を年間変動の式で置き換え

$$\begin{aligned} \text{CO}_2\text{濃度} = & -0.0016 \times (\text{hour})^4 + 0.0917 \times (\text{hour})^3 - 1.6589 \times (\text{hour})^2 \\ & - 1.6589 \times (\text{hour})^2 + 9.5004 \times (\text{hour}) \\ & + \{6 \times 10^{-7} \times (\text{total\_hour})^2 - 4.6 \times 10^{-3} \times (\text{total\_hour}) + 400.86\} \end{aligned} \quad (4.35)$$

と定義した。

#### 4-4-2 海面での二酸化炭素フラックス

3-5-1 で述べた酸素の場合と同様に考えることができる。拡散項を考えると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z \frac{\partial C_{dox}}{\partial z} \right) &= \frac{1}{\Delta z} \left\{ \left[ -K_z \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta z} \right]_t - \left[ -K_z \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta z} \right]_b \right\} \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{\Delta z} \{ Flux_t - Flux_b \} \end{aligned} \quad (4.36)$$

二酸化炭素フラックスは以下のように定式化されている。

$$Flux_t = -kK_0(pCO2_{sea} - pCO2_{air}) \quad (4.37)$$

$$\left[ -K_z \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta z} \right]_t = \frac{1}{D^{n+1}} \left[ -K_\sigma \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta \sigma} \right] = -kK_0(pCO2_{sea} - pCO2_{air}) \quad (4.38)$$

よって

$$\begin{aligned} \frac{1}{D^{n+1}} \frac{1}{\Delta \sigma} \left[ -K_\sigma \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta \sigma} \right] &= -\frac{1}{\Delta \sigma} kK_0(pCO2_{sea} - pCO2_{air}) \\ \Leftrightarrow \frac{1}{D^{n+1}} \frac{1}{\Delta \sigma} \left[ K_\sigma \frac{\Delta C_{dox}}{\Delta \sigma} \right] &= \frac{1}{\Delta \sigma} kK_0(pCO2_{sea} - pCO2_{air}) \end{aligned} \quad (4.39)$$

#### 4-5 水底質フラックス

本モデルでは底質内の DIC, TA を全て溶存態として扱っているため、3-5-2-1 で述べた溶存態の定式化に等しい。

### 5-1 流動場の妥当性検討

従って、検証の流れとして、初めに水温、塩分を指標として流動場の妥当性を検証する．続いて DO, pCO<sub>2</sub> を指標として水質モデルの妥当性検証を行うこととする．



図 5.1 東京湾水質連続観測地点  
(<http://www.tbeic.go.jp/MonitoringPost/index.asp>) より引用

流動場の再現の際には河川流入量が大きく影響を与えることが知られている．そこでまずは河川流入量を実測データの1倍，1.5倍，2倍，2.5倍に変えたときの水温，塩分計算結果を図9.2，図9.3に示し，千葉港口第一号灯標の観測値と比較する．

表層水温に関してはいずれも概ね整合性が取れているが、底層水温に関しては季節変化が小さくなっている。表層塩分に関しては河川流量2倍の時が最も現実に近い値を示して

いる．全アルカリ度は準保存量であり，塩分との相関が非常に高いことは第3章の分析結果でも述べた．従ってここでは河川流量2倍を採択する．

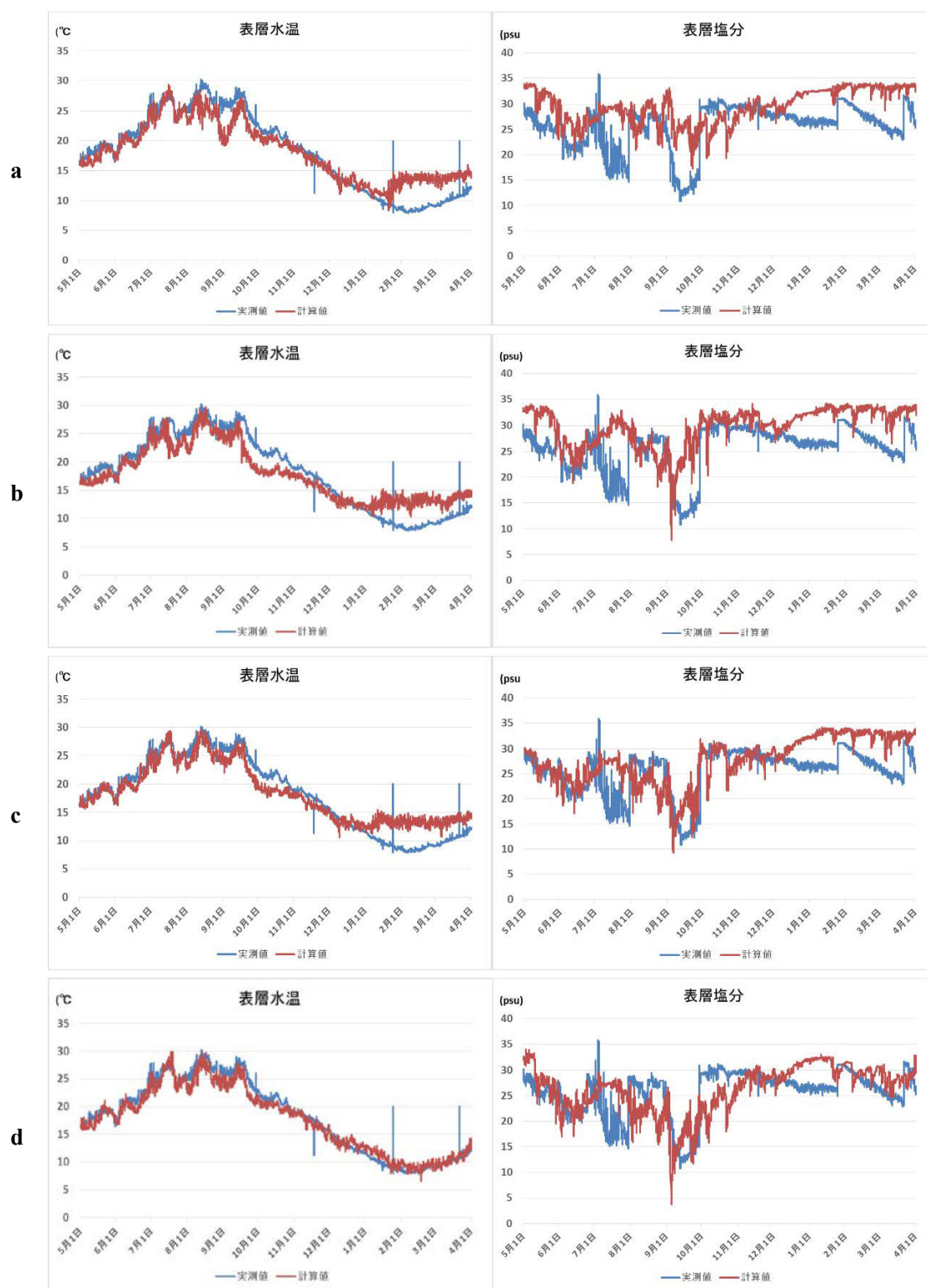


図 5.2 (a)河川1倍, (b)1.5倍, (c)2倍, (d)2.5倍の表層水温, 塩分の実測値と計算値

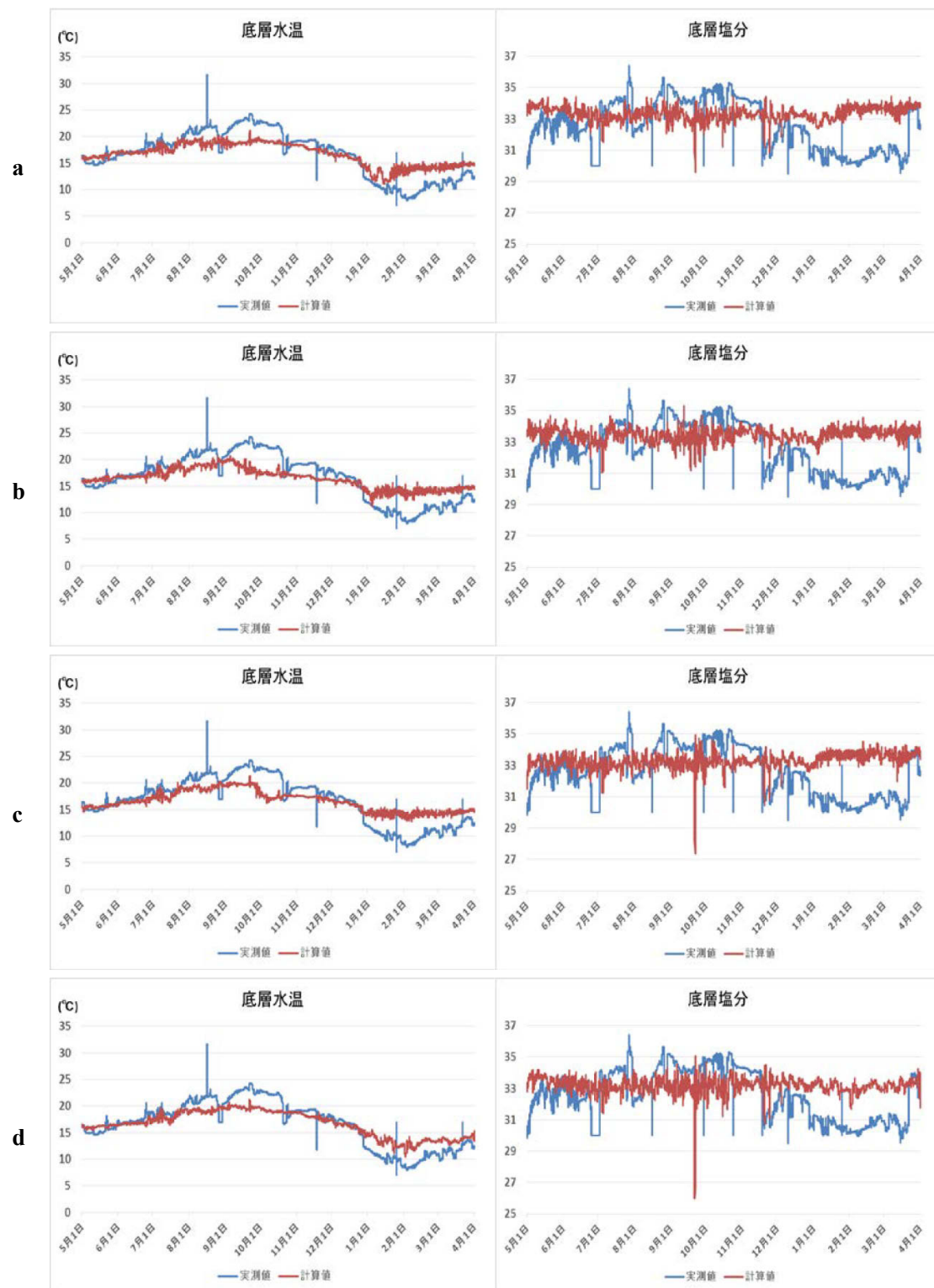


図 5.3 河川(a)1 倍, (b)1.5 倍, (c)2 倍, (d)2.5 倍の底層水温, 塩分の実測値と計算値

### 5-1-2 風速

先の河川流量の検討結果を基に，これ以降は河川流量 2 倍を用いて数値計算を行っていく．流動場の再現の際には河川流入のほかにも風速が大きく影響を与える．また，二酸化炭素フラックスは風速の 2 乗に比例するので詳細に検討していく必要がある．使用している風速は千葉气象台で測定された風速である．一般的に海上では陸上よりも風速が大きいので，実測データの 1.25 倍，1.5 倍，1.75 倍，2.0 倍を適用した時の水温，塩分の計算結果を図 9.4，図 9.5 に示し，千葉港口第一号灯標の観測値と比較する．

水温に関してはいずれのケースにおいても大きな差は見られなかったが，塩分に関しては風速を大きくしていくと表層塩分の再現性が低下していく傾向があった．従って，ここでは風速 1.0 倍と風速 1.25 倍，風速 1.5 倍を候補として残すことにして，次節で DO と  $\text{pCO}_2$  の再現性を確認していく．

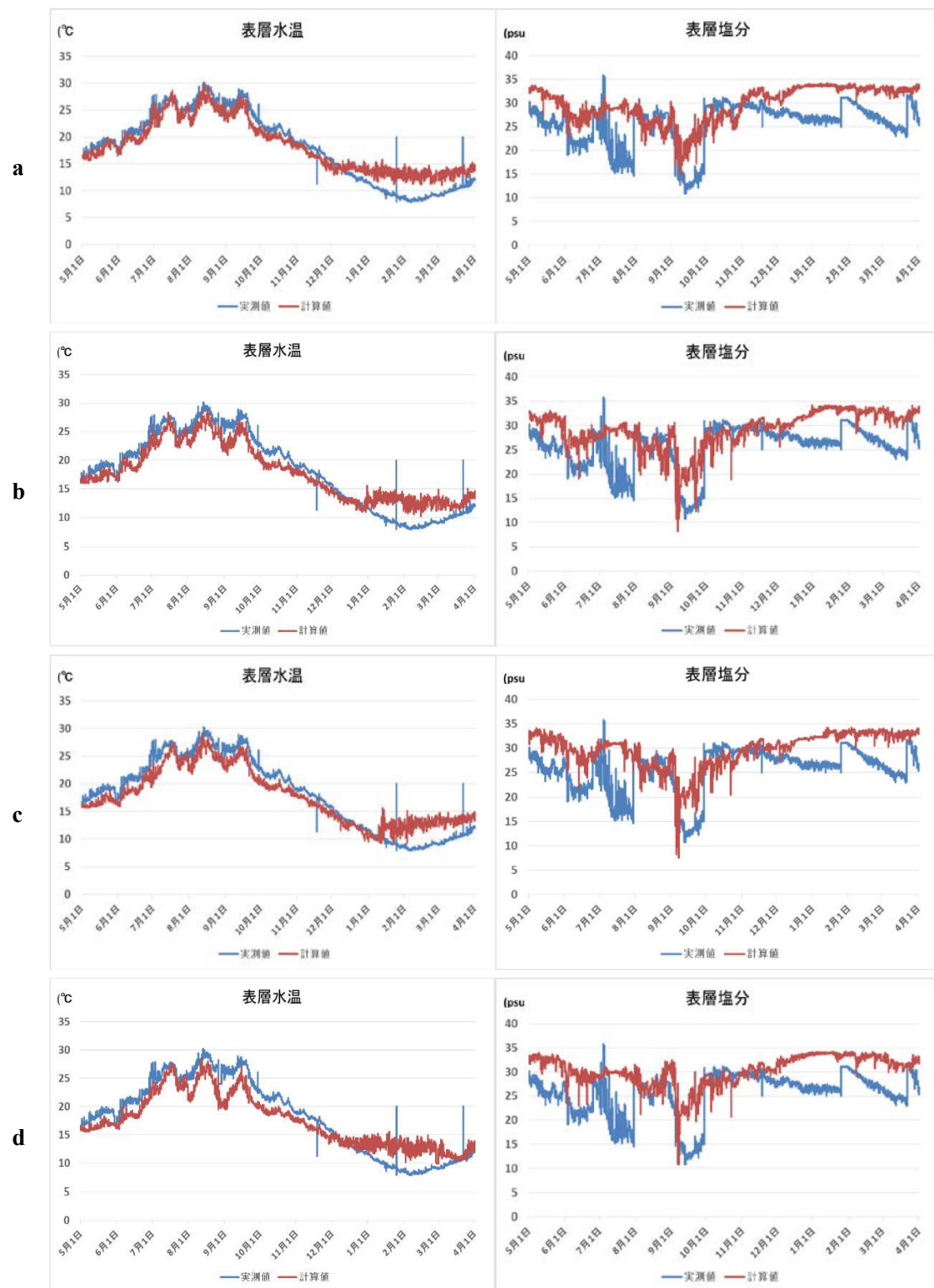


図 5.4 風速(a)1.25 倍, (b)1.5 倍, (c)1.75 倍, (d)2.0 倍の底層水温, 塩分の実測, 計算値



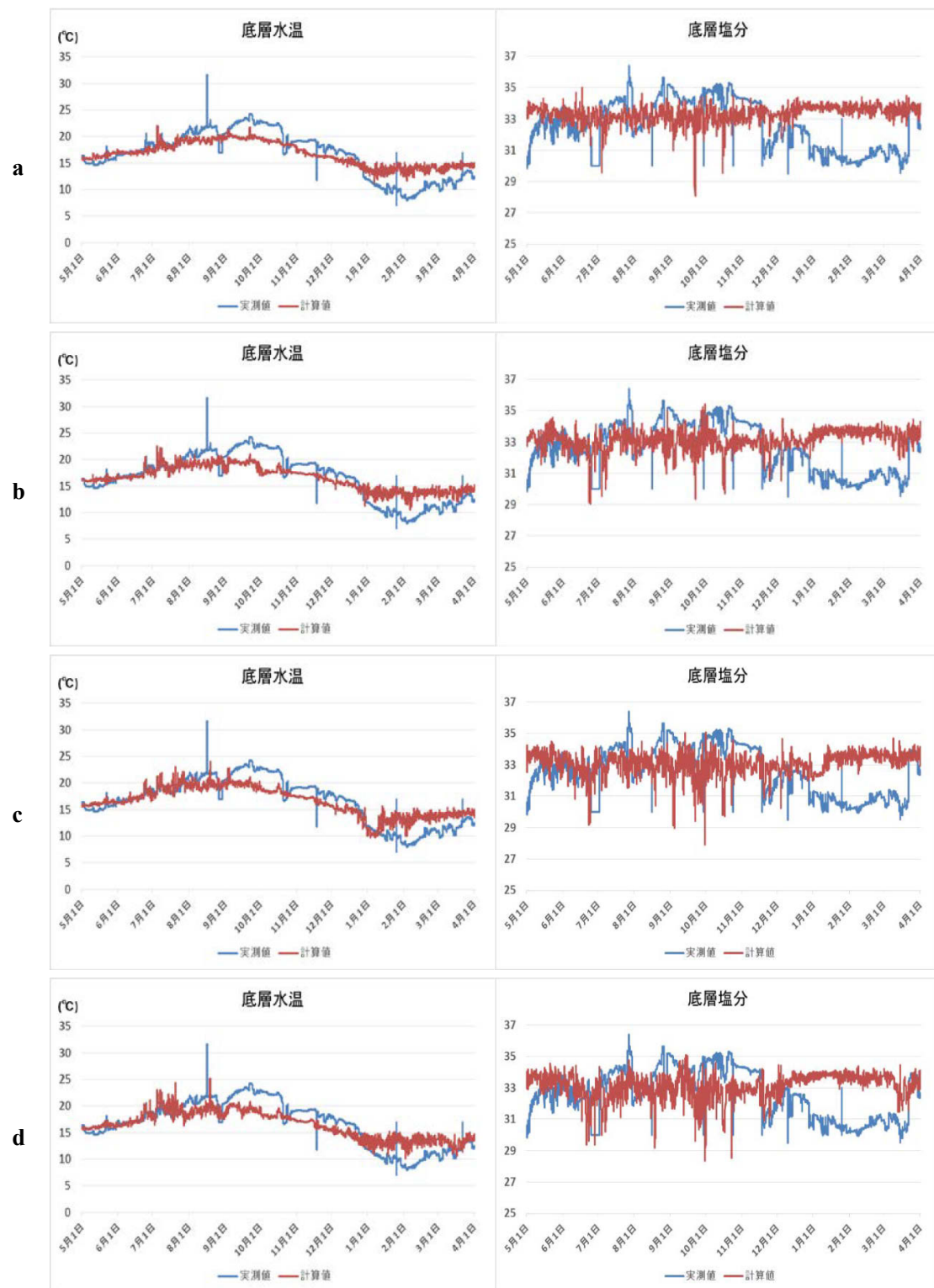


図 5.5 風速(a)1.25 倍, (b)1.5 倍, (c)1.75 倍, (d)2.0 倍の底層水温, 塩分の実測, 計算値

## 5-2 水質モデルによる DO, $p\text{CO}_2$ の妥当性検討

計算値の比較をする前に、数値計算で用いた諸条件について述べておく。一般的には水質、底質ともに実測される妥当な値を初期条件として与え、スピナップ期間を設けて計算を進めることが多い。水質に関しては流れによる変動が大きいのでさほど問題はないが、底質に関しては数年から数十年かけて堆積物が貯留されていくので再現は困難である。そこで本モデルでは底質内の状態変数の初期値をゼロ、また POCC を 2% と仮定して初期値を与え、約 40 年間の計算を行うことで底質内の分布を再現する方法を用いた。(図 9.7 左) が初期条件、(図 9.7 右) が約 40 年後の底質状況であり、概ね実測値 (図 9.6) と一致している。

水底質間の溶出フラックスは底質の間隙率に大きく左右されるので、間隙率の変化と対応している有機炭素含有率を正しく再現することは、非常に重要である。

また、本研究で新たに追加した状態変数である全炭酸濃度と全アルカリ度の底質中の観測地はほとんど存在しないため、やはり長期計算を経て現実に近い状況を再現していくというアプローチが不可欠である。図 9.7 に底質内の全アルカリ度と全炭酸濃度の経年変化を示す。

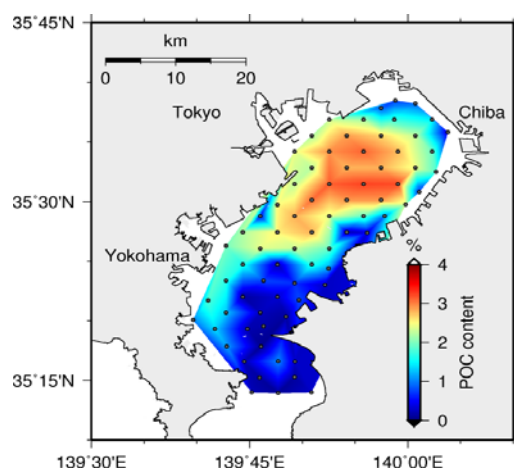


図 5.6 POCC 実測値 (岡田・古川, 2005)



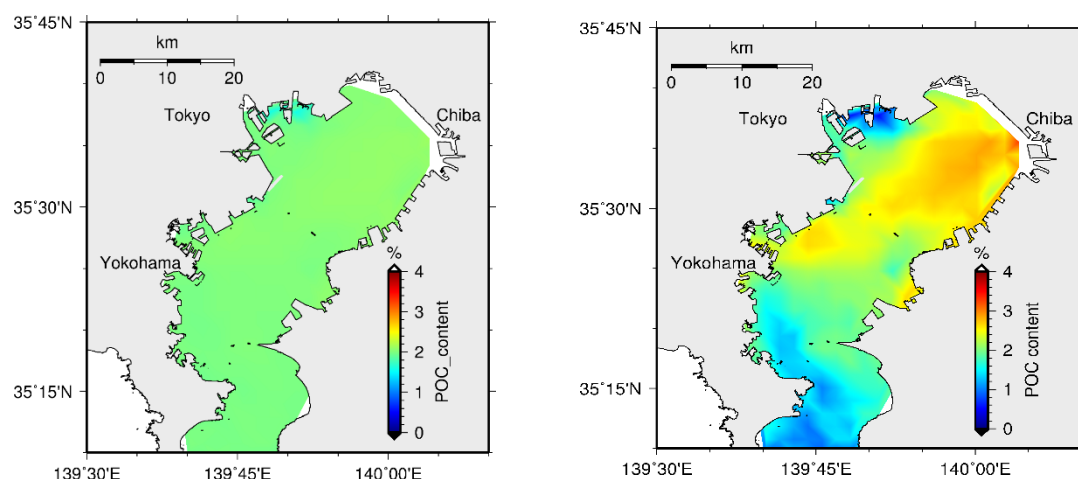
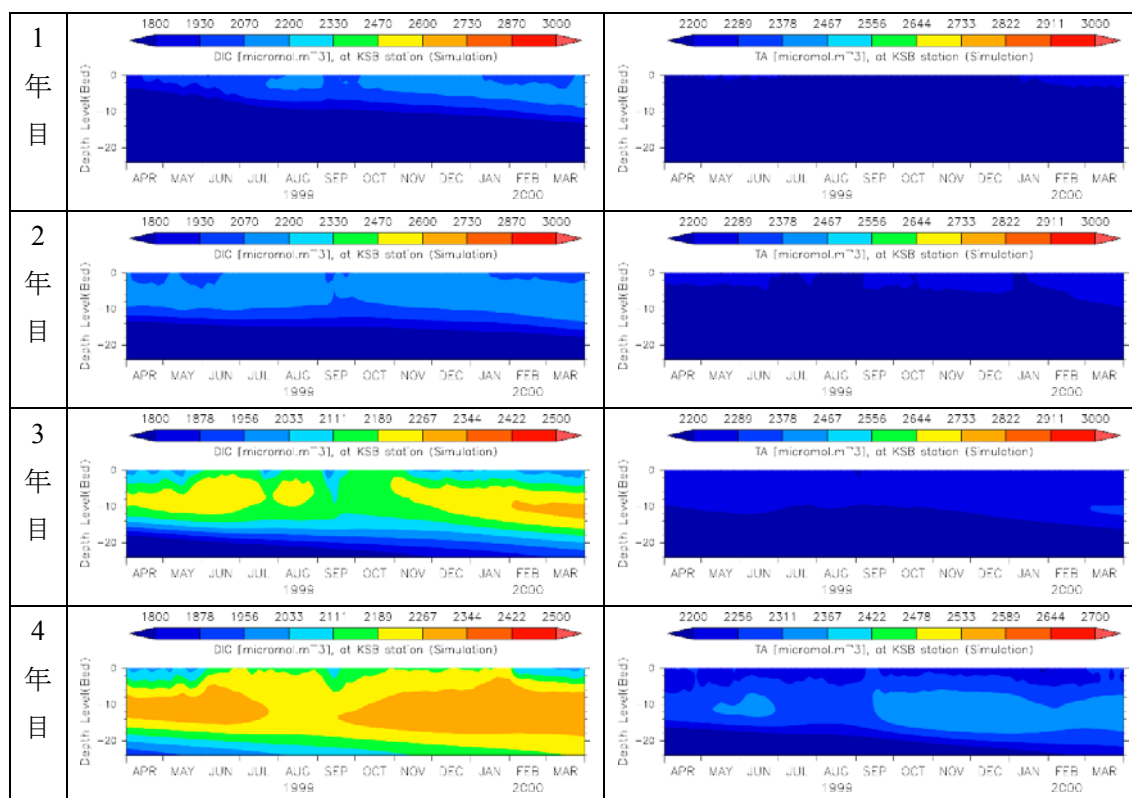


図 5.7 POCC の初期値 (左), 長期計算後の POCC 計算結果 (右)

同様にその他の流動場、水質、底質の初期条件に関しても長期計算を行った後の値を適用している。ここでは一例として底質の全炭酸濃度、全アルカリ度の経年変化を図に示す。



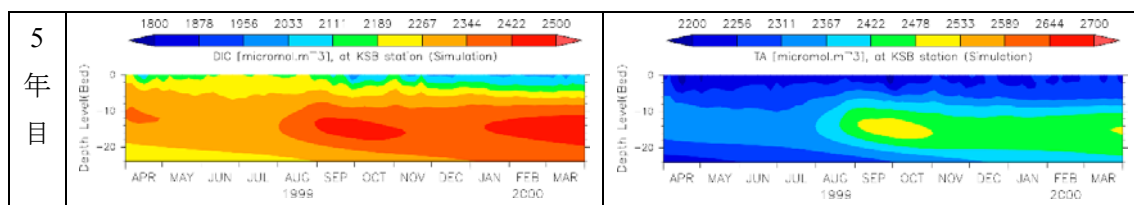


図 5.8 1~5 年目の計算による底質 DIC, TA の変化

DIC が大幅に増加したため 6 年目以降はレジェンドの幅を変更している。

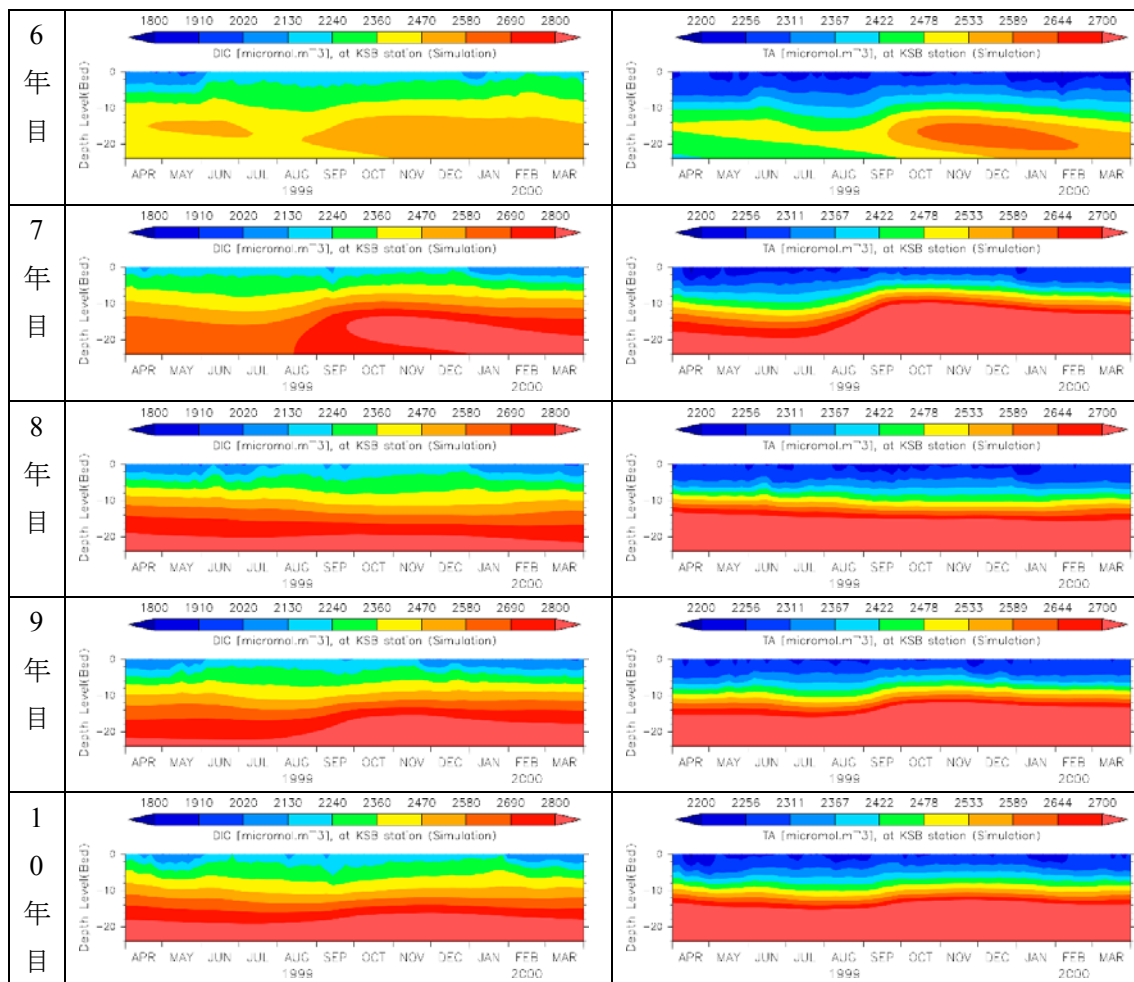


図 5.9 6~10 年目の計算による底質 DIC, TA の変化

図 9.7 を見ると底質表層では水中底層とほぼ等しい値を取るが、深部へ向かうにつれて濃度が高くなっていることが分かる。図 9.10 は間隙水中の物質濃度分布を示した例 (Di Toro, 2001) である。全アルカリ度は海域によって大きく変動するため大きさこそ違うものの、深部へ向かうにつれて徐々に増加している傾向は、本研究で得た結果と同様であることが確認された。

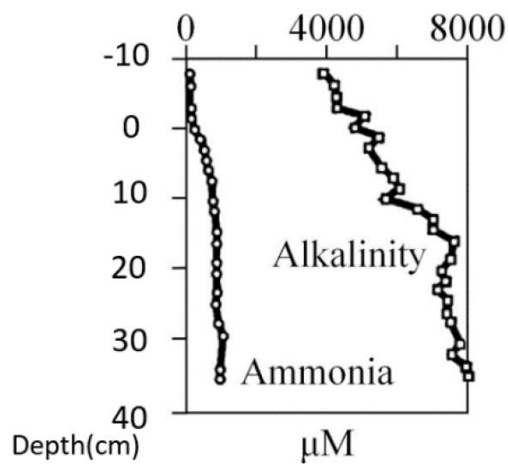


図 5.10 間隙水中の全アルカリ度濃度 (右) (Di Toro, 2001)

ここで、9-1-2 で候補として残した風速 1.0 倍，風速 1.25 倍，風速 1.5 倍の 3 ケースにおける DO の計算結果と千葉港口第一号灯標実測結果を示す．飽和溶存酸素濃度の理論値は海水で約 8.0mg/L であり，それを超える実測値が観測されているのは植物プランクトンによる光合成が集中して行われていることに由来すると考えられる．表層では年間を通してほぼ飽和状態が再現できていることが分かるが，風速による違いはほとんどない．また，冬季のクロロフィル $a$ 実測値は異常に高い値を示しているが，一般的に冬季の数 10 $\mu\text{g/L}$ ほどであるため，本モデルの再現性としては十分であると判断した．

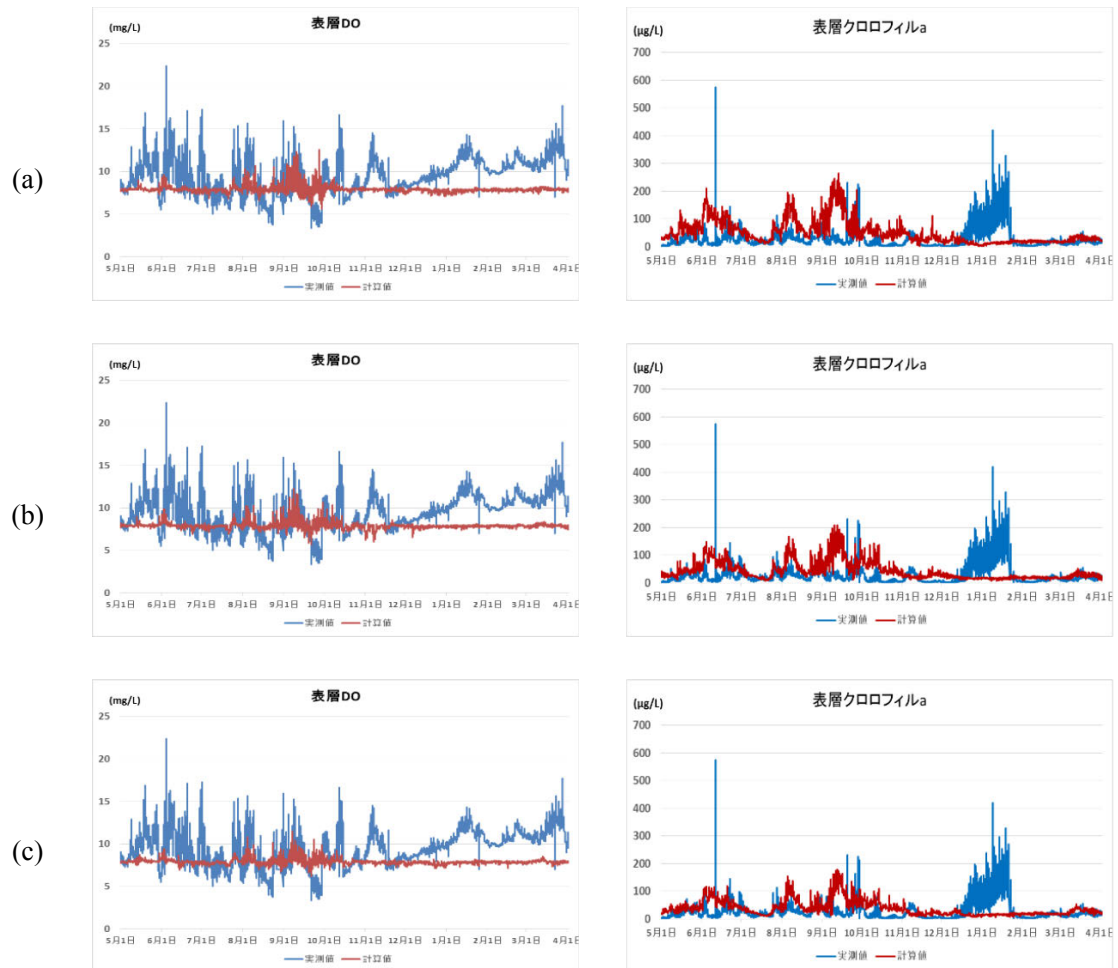


図 5.1 1 表層 DO, クロロフィル $a$ の計算値と実測値の比較

クロロフィル $a$ は十分量存在しても DO の値が過小評価であったので曝気に関するガス交換係数を半分の値、すなわち大気と海面における酸素交換速度を半分にしたところ図 9.10 のような結果が得られ、精度が大きく改善された。

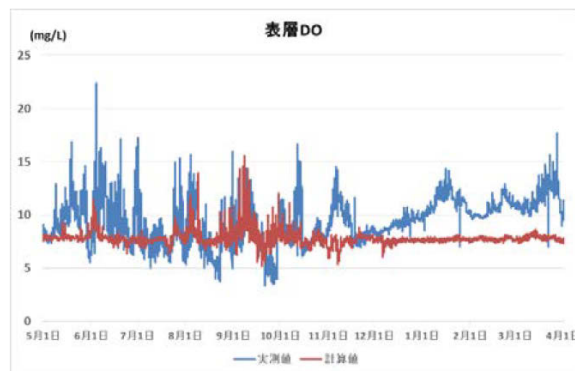
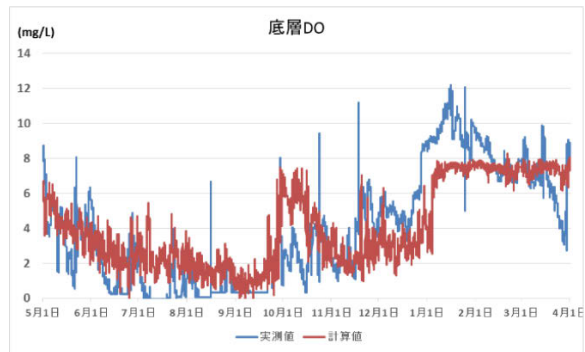


図 5.1 2 曝気に関するガス交換係数として 0.3 (m/s) を使用した結果

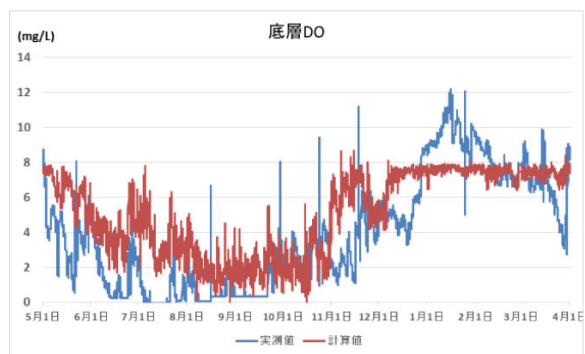
この係数に関しては今後もさらなるチューニングが必要と考えられるが、本研究では以後、酸素のガス交換係数として 0.3 を使用する。

続いて底層の DO 値を確認する。底層 DO は夏季に貧酸素化、無酸素化が起きやすく、急激に DO が減少する。この結果から、風速 1.5 倍のケースでは混合が起きやすくなり底層の DO 再現性が低下することが分かった。風速 1.0 倍と風速 1.25 倍のケースを用いて更に  $pCO_2$  の再現結果を評価する。

(a)



(b)



(c)

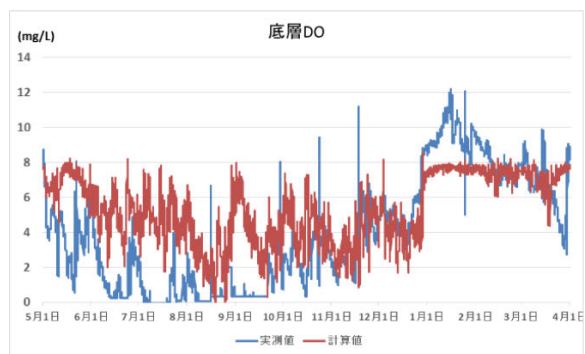


図 5.1 3 風速(a)1.0 倍, (b)1.25 倍, (c)1.5 倍のときの底層 DO の実測値と計算値

図 9.12 に計算結果出力地点を，また 3 地点における $p\text{CO}_2$ 鉛直分布の季節変動を図 9.13 に示す．ここで TLH=東京灯標，CLH=千葉灯標，KSB=京葉シーバースを意味する．計算結果より，風速 1.0 倍のケースと風速 1.25 倍のケースでは傾向は似ているものの，値の大きさに差があることが分かる．また図 9.14 に同地点における DO の鉛直分布を示すが，DO の低下と $p\text{CO}_2$ の増加はほぼ対応していることがわかる．このことから DO と同様に底質からの溶出フラックスが $p\text{CO}_2$ に大きく影響を与えていると理解できる．

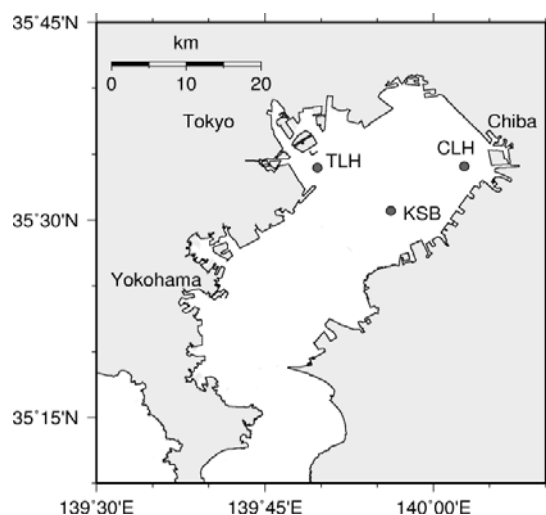


図 5.1 4 計算結果出力地点

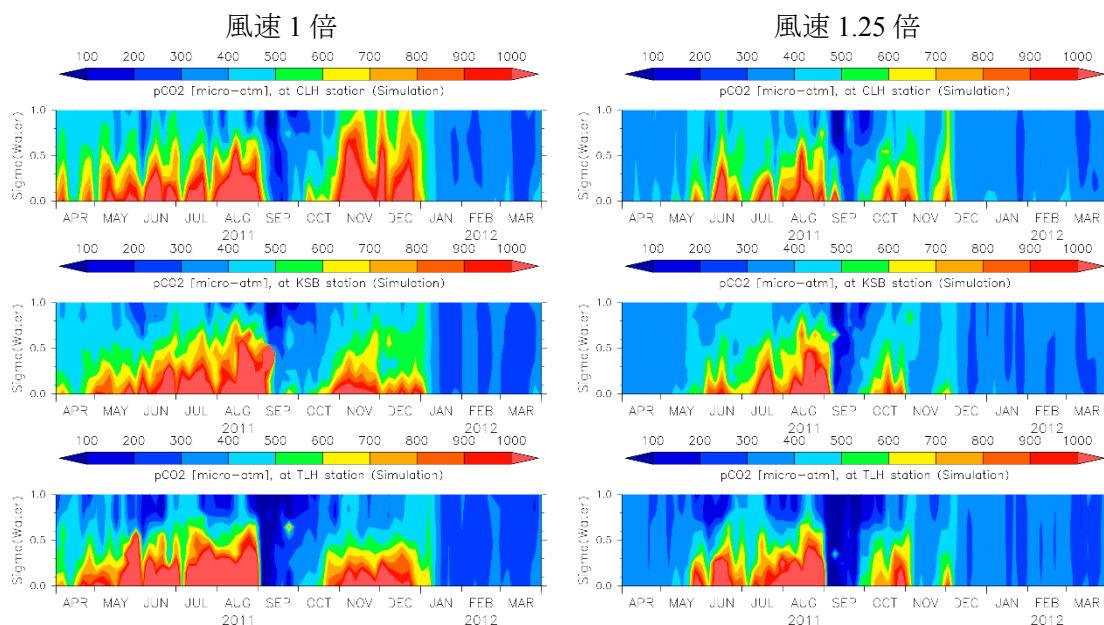


図 5.1 5 上：CLH，中：KSB，下：TLH における  $p\text{CO}_2$  計算結果

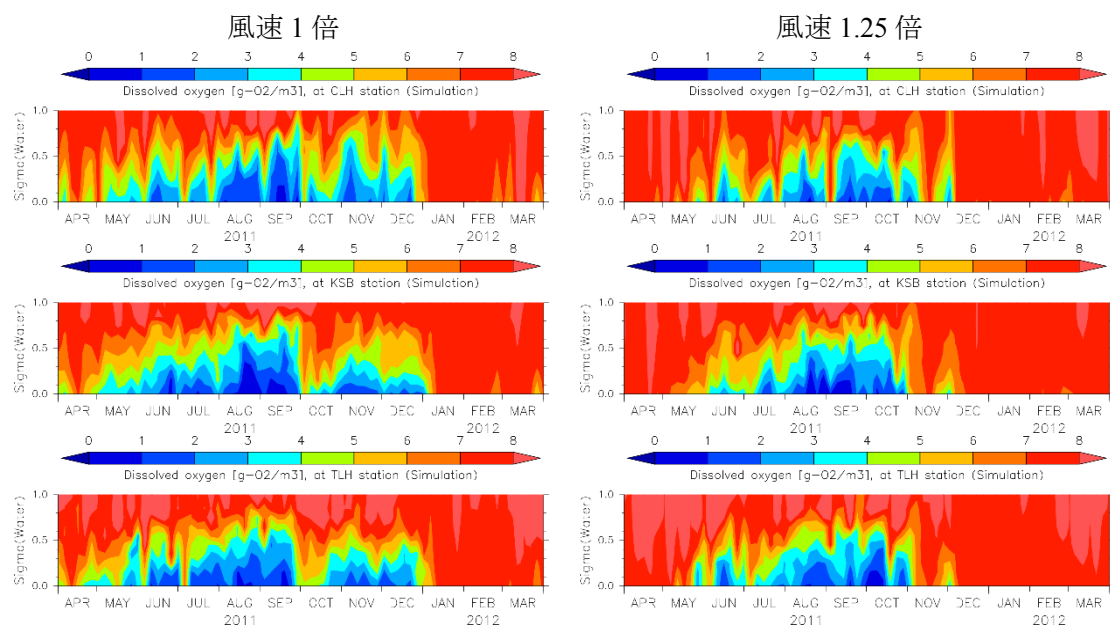


図 5.16 上 : CLH, 中 : KSB, 下 : TLH における DO 計算結果

これらの結果を評価するために既往の研究の観測結果と比べていく．2011 年の東京湾を対象とした炭酸系測定 of 既往研究として，Yamamoto-Kawai et al.. (2015) と古屋 (2014) の測定結果を引用する．これらの研究はともに海水サンプルから DIC と TA を測定し，二酸化炭素分圧を計算により導き出したものである．



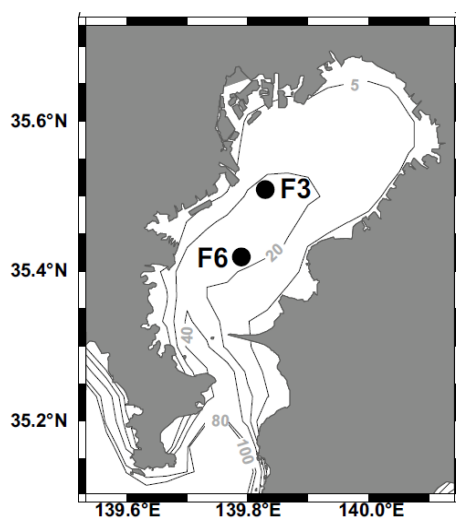


図 5.17 Yamamoto-Kawai et al. (2015) による測定地点

(Yamamoto-Kawai Michiyo, Kawamura Natsuko, and Ono Tsuneo, “Calcium carbonate saturation and ocean acidification in Tokyo Bay, Japan,” *J. Oceanogr.*, vol. 71, no. 4, pp. 427–439, 2015.より引用)

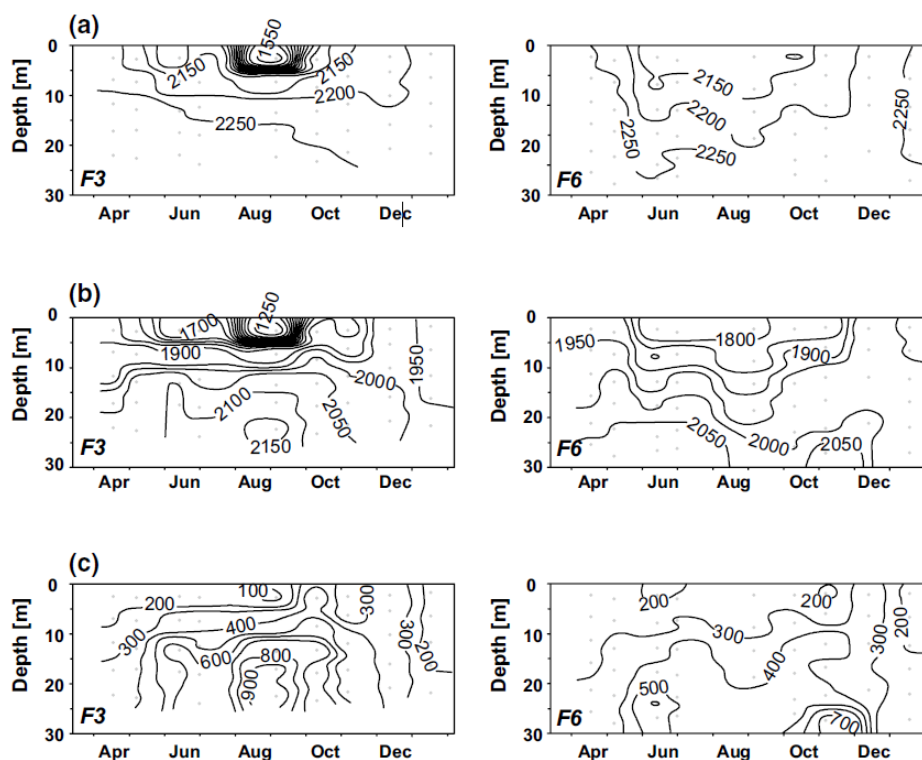


図 5.18 Yamamoto-Kawai et al. (2015) による測定結果, (a)TA, (b)DIC, (c)pCO<sub>2</sub>

(Yamamoto-Kawai Michiyo, Kawamura Natsuko, and Ono Tsuneo, “Calcium carbonate saturation and ocean acidification in Tokyo Bay, Japan,” *J. Oceanogr.*, vol. 71, no. 4, pp. 427–439, 2015.より引用)

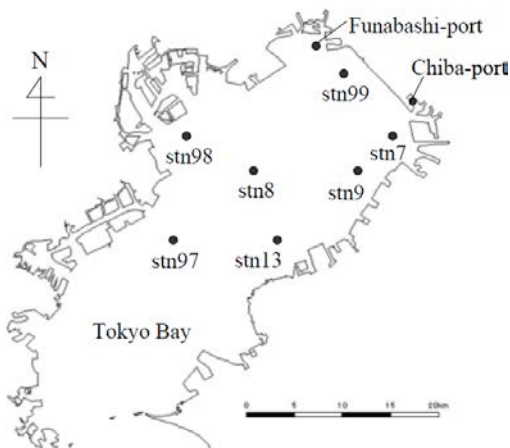


図 5.1 9 古屋 (2014) による測定地点

(古屋 秀基, ”東京湾湾奥部における二酸化炭素収支の変動特性に関する研究”, 2014 年度東京大学大学院 新領域創成科学研究科 修士論文より引用)

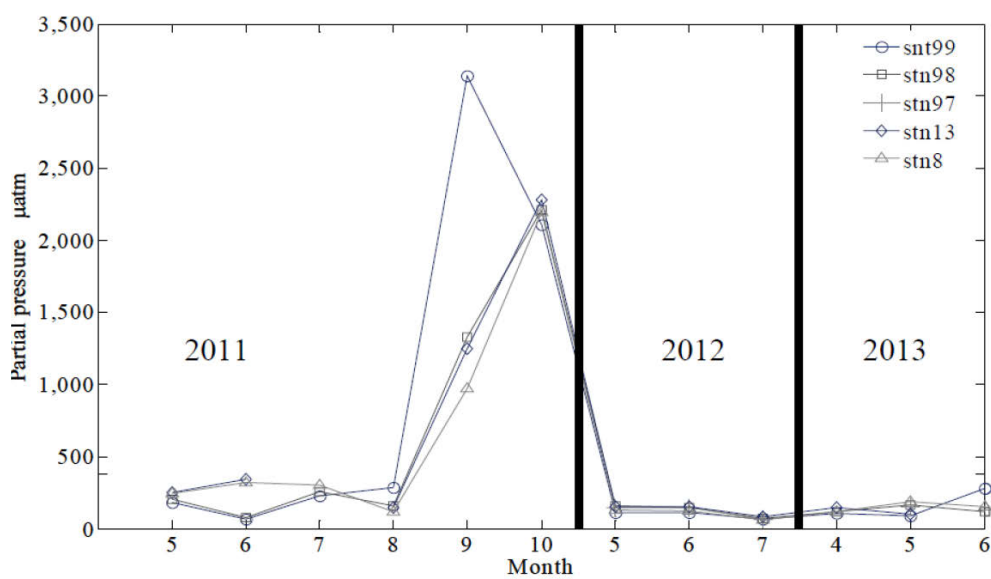


図 5.2 0 古屋 (2014) による二酸化炭素分圧測定結果

(古屋 秀基, ”東京湾湾奥部における二酸化炭素収支の変動特性に関する研究”, 2014 年度東京大学大学院 新領域創成科学研究科 修士論文より引用)

既往の研究の観測結果から、特徴的であるのは夏季の湾奥底層において二酸化炭素分圧が  $1000\mu\text{atm}$  付近まで高くなり、冬に向かうにつれて鉛直一様な値になっていくということ、また表層においては年間を通して大気中の二酸化炭素分圧よりも低いことが多いということである。この実測結果を参考にすると、図 9.8 に示す本モデルの計算結果は、風速 1.25 倍を適用したケースのほうが現実に近い値を示しているが、それでもなお  $\text{pCO}_2$  は過大評価であるといえる。次章で感度分析を行い、チューニングをしていく。

また、生成項の定義より、全炭酸濃度と全アルカリ度はその他の状態変数の増減に影響を与えない。従って 4 種の炭酸系パラメータ以外の結果は今後不変であるので、ここで水質、底質の計算結果一覧を示しておく。

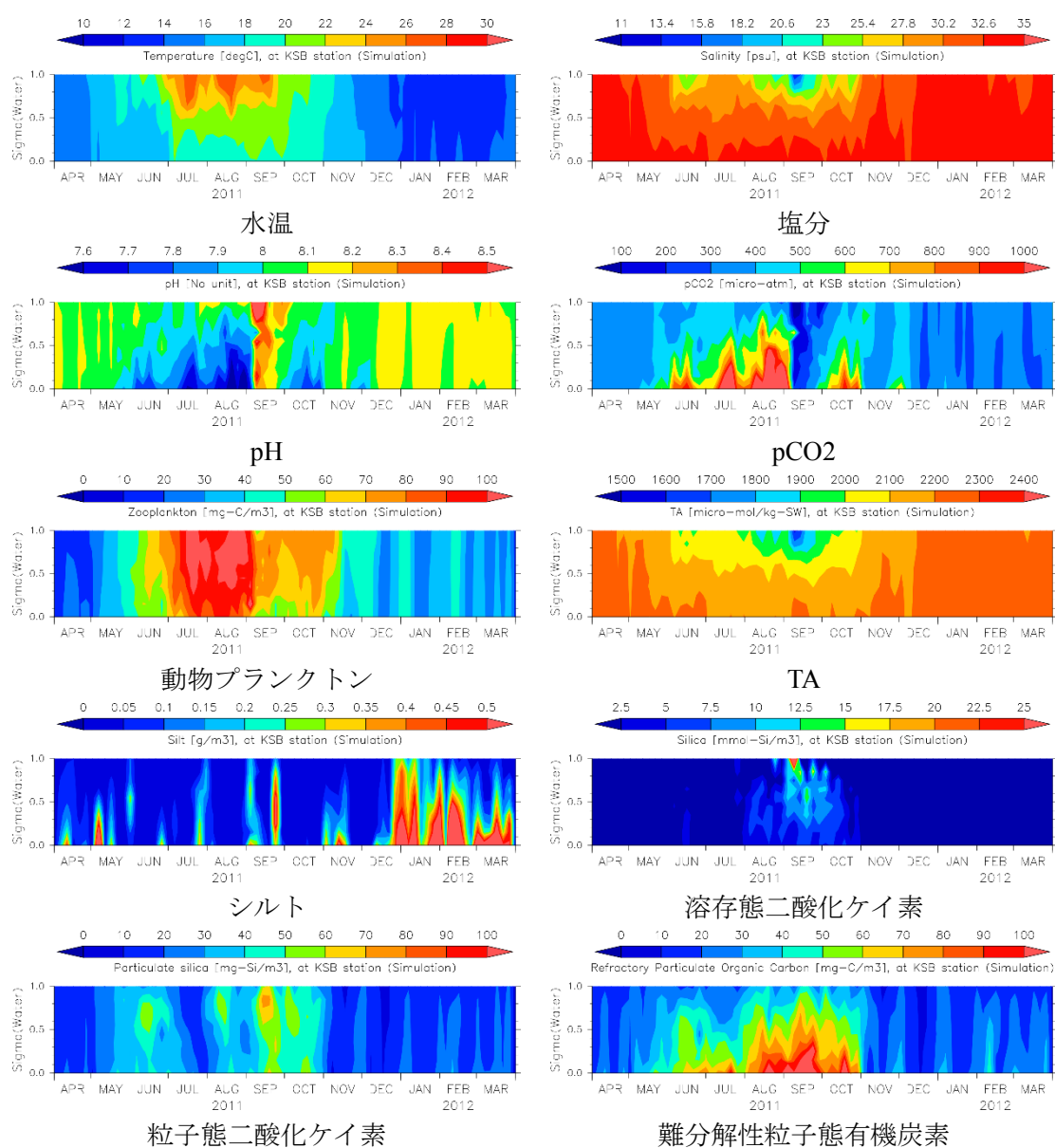


図 5.21 2011 年 4 月～2012 年 3 月の水質の計算結果一覧①

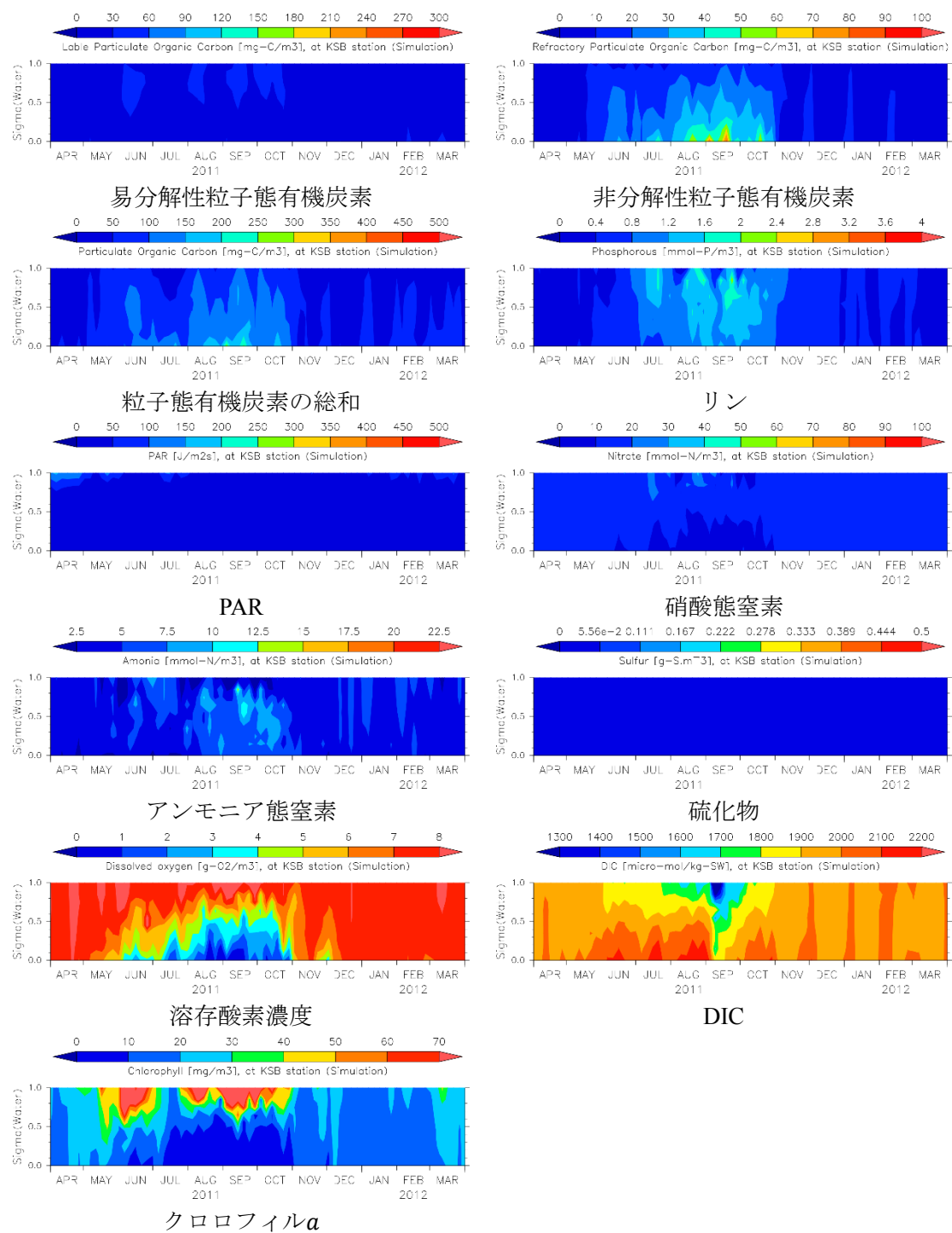


図 5.2 2 2011 年 4 月～2012 年 3 月の水質の計算結果一覧②

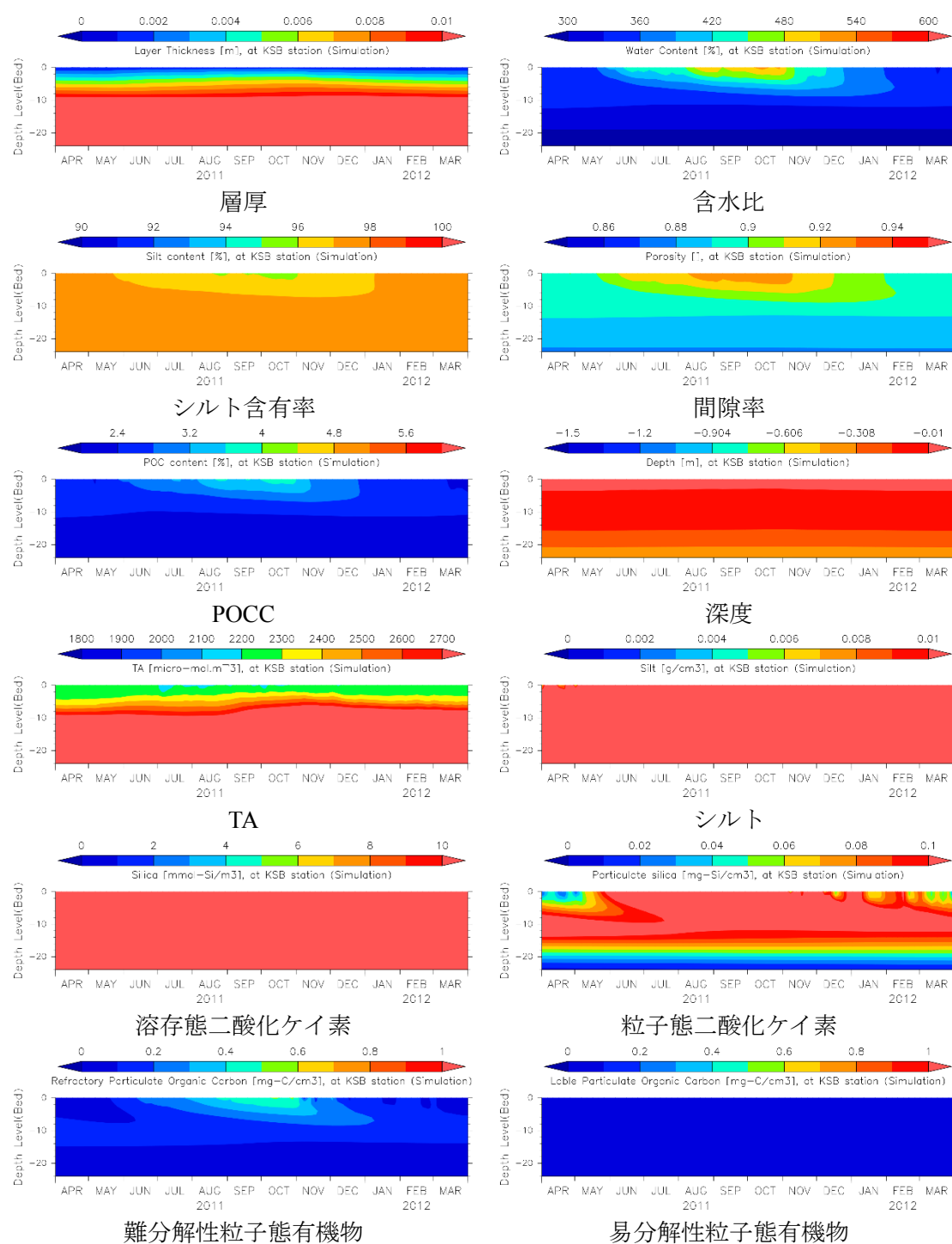


図 5.23 2011 年 4 月～2012 年 3 月の底質の計算結果一覧①

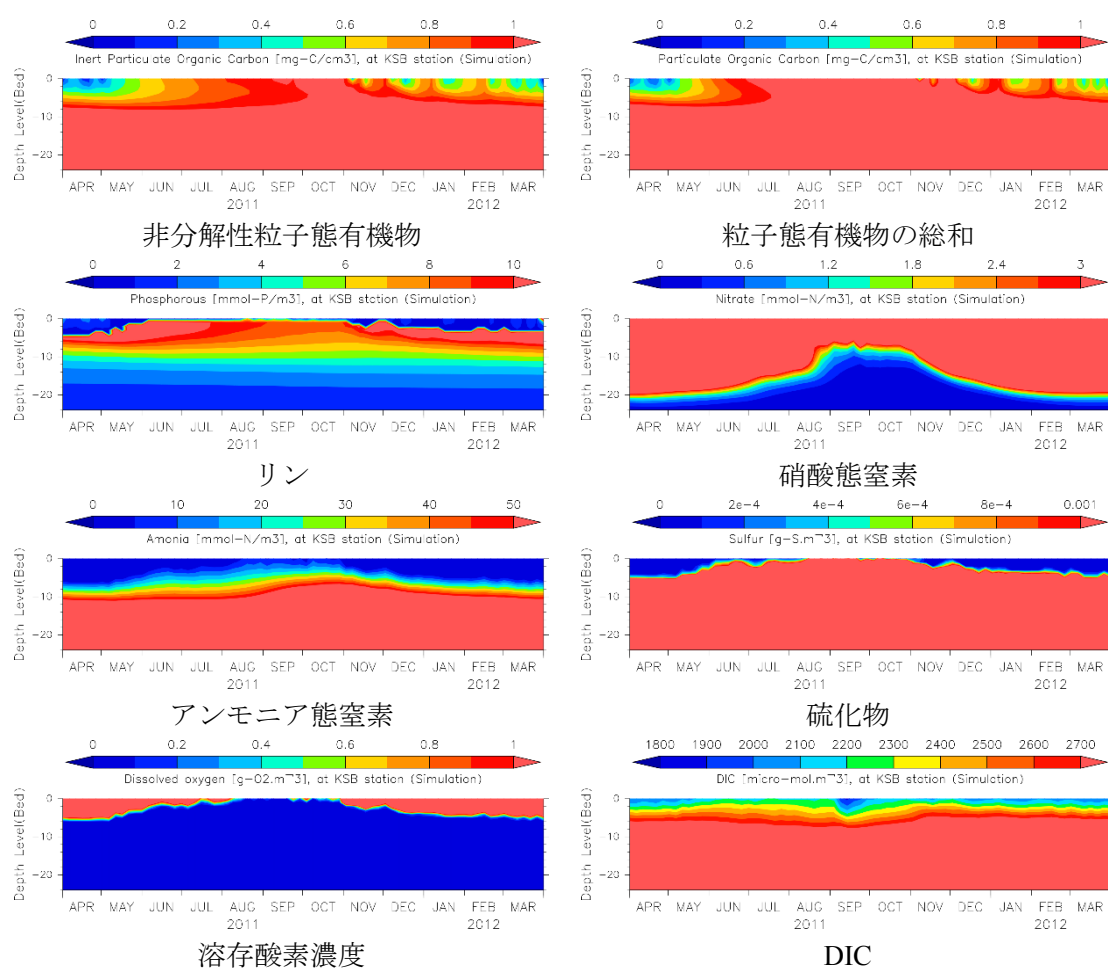


図 5.24 2011 年 4 月～2012 年 3 月の底質の計算結果一覧②

## 第6章 感度分析

### 6-1 大気海面フラックス、水底質間フラックスの影響

pCO<sub>2</sub>は底質からの DIC, TA の溶出フラックスに大きく影響を受けることは先ほど述べたが、ここでは仮想的に大気海面フラックス、水底質間フラックスのそれぞれをゼロである状況における DIC, TA, pCO<sub>2</sub>の計算結果を図 10.1 に示す。

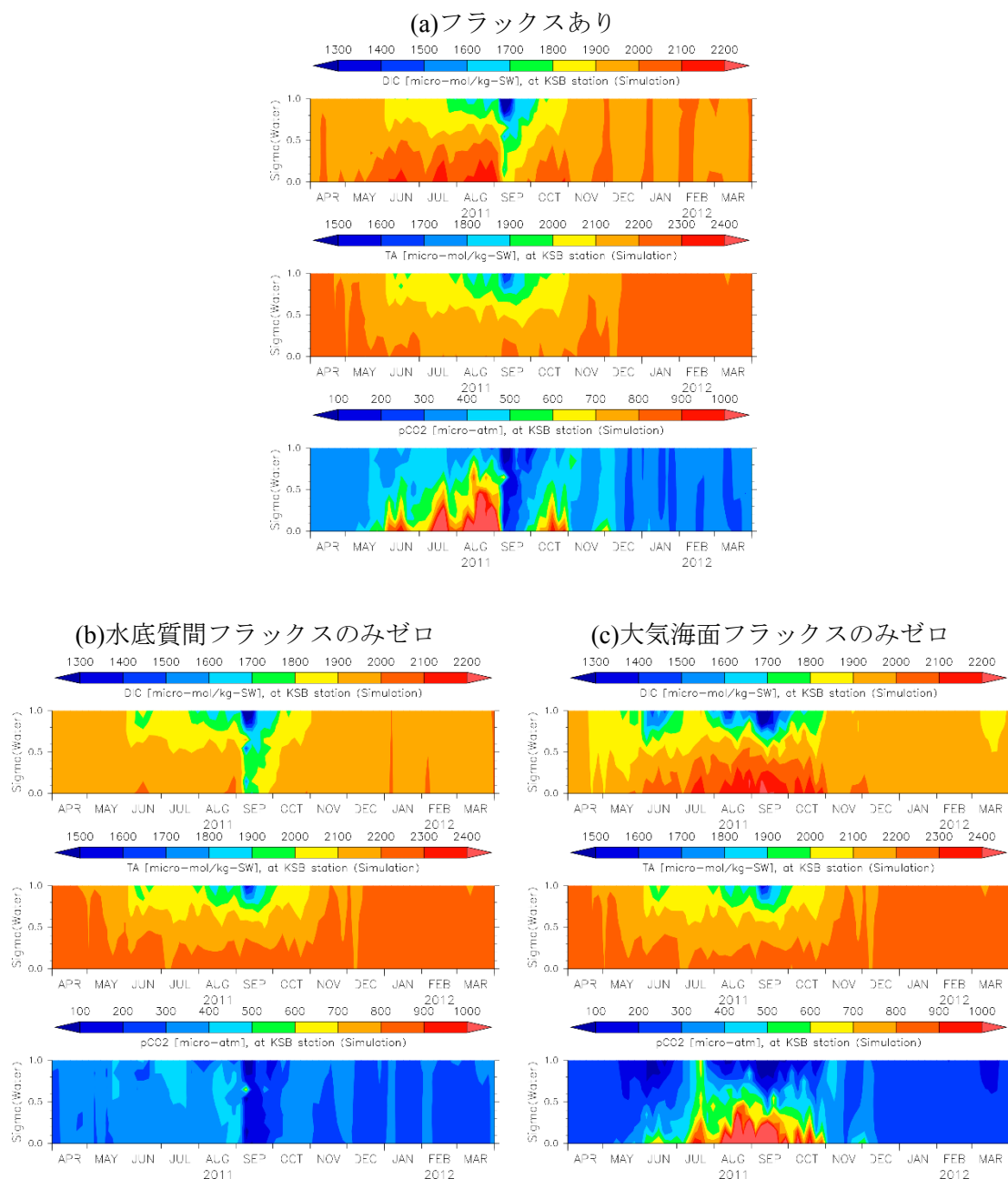


図 6.1 大気海面フラックス、水底質間フラックスの影響

この結果から TA の変動は比較的少なく，一方 DIC に関しては大気からは $\text{CO}_2$ を吸収している傾向が強く，また底層からの DIC の溶出が多いために結果として $\text{pCO}_2$ が高くなっていることが読み取れる．これは DO に関して貧酸素化が起こる現象の裏返しととらえることができる．底質内で有機物の分解が促進されると酸素が消費され，二酸化炭素が増加するからである．



## 6-2 外洋の変動による影響

本節では外洋の開境界条件について検討していく。一般的に外洋表層では全アルカリ度は  $2200\mu\text{mol/kg}$ ，全炭酸濃度は  $2000\mu\text{mol/kg}$  付近の値を取ることが知られているが，これまでの計算結果から  $\text{pCO}_2$  はやや過剰な値を示しているのを，それを緩和する方向で TA と DIC の差を広げて値を設定した。

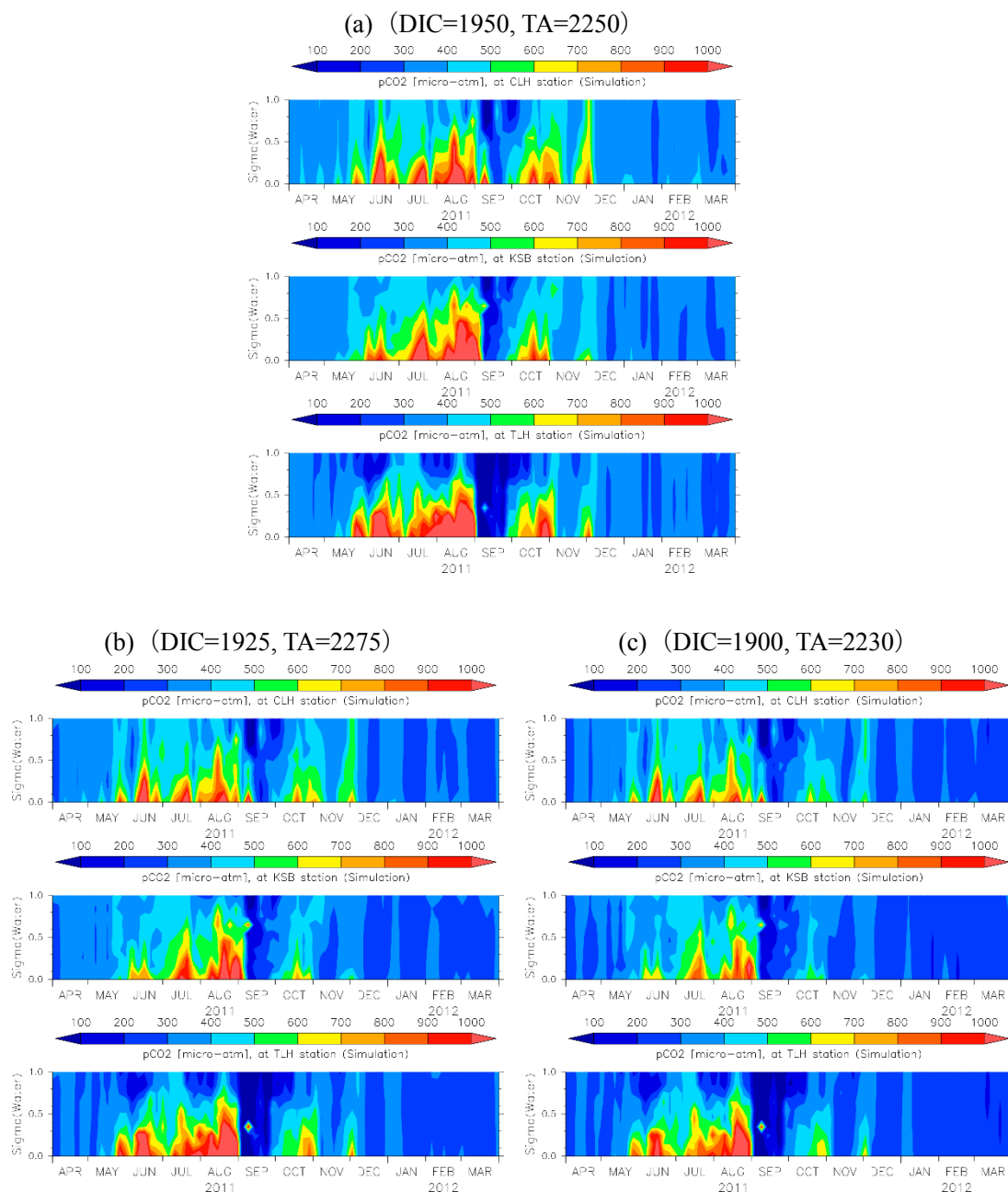


図 6.2 外洋の DIC, TA 開境界条件を変化させたときの  $\text{pCO}_2$

図 10.2 の結果から、外洋の境界条件を変化させると大きく  $p\text{CO}_2$  の値が変動することが分かった。特に冬季は生物活動の影響が少ないため、相対的に外洋との海水交換の影響が大きくなる。本研究ではこれらの結果から  $\text{DIC}=1925$ ,  $\text{TA}=2300$  という値を用いて今後の計算を行っていく。

### 6-3 河川流入負荷量の変動による影響

前節までは  $p\text{CO}_2$  の鉛直分布によって妥当性を検討してきたが、本節では表層の  $p\text{CO}_2$  平面分布から再現性を検討する。第 3 章の分析結果や、神田 (2011) らの観測結果から、東京湾の大部分では年間平均で二酸化炭素を吸収する傾向にあるが、港や河口付近では二酸化炭素を放出する傾向にあることが分かっている。これは陸域から流入する有機物の分解により生じる二酸化炭素の量が、植物プランクトンの光合成による吸収量を上回っているためであると解釈できる。

本モデルでは炭素として粒子態有機炭素と溶存態無機炭素のみを使用しており、溶存態有機炭素と粒子態無機炭素は前者に含めてしまうと考える。すなわち、モデル内で河川から流入する DIC は現実における  $(\text{DIC}+\text{DOC})$  とする。ここで、一般的な日本の河川では  $\text{DIC}=500$  ( $\mu\text{mol/kg}$ ),  $\text{TA}=600$  ( $\mu\text{mol/kg}$ ) 程度であるが、地域特性によつての変動幅が非常に大きい。小林 (1960) によると荒川では  $\text{TA}=930$  ( $\mu\text{mol/L}$ ) が測定されており、日本の河川の中でも特に高い値である。そこで本研究では  $\text{TA}=930$  を採用し、 $(\text{DIC}+\text{DOC})$  の量を変動させて平面分布を評価することにより適切な DIC 量を設定した。先に述べたようにこの節で用いる  $\text{DIC}=(\text{DIC}+\text{DOC})$  とみているため、値が大きくなっている。実際に東京湾に流れ込む DOC は約  $400$  ( $\mu\text{mol/L}$ ) である (国立環境研究所, 2010) と計算できるので  $(\text{DIC}+\text{DOC})=900$  ( $\mu\text{mol/L}$ ) ほどであると推察できる。

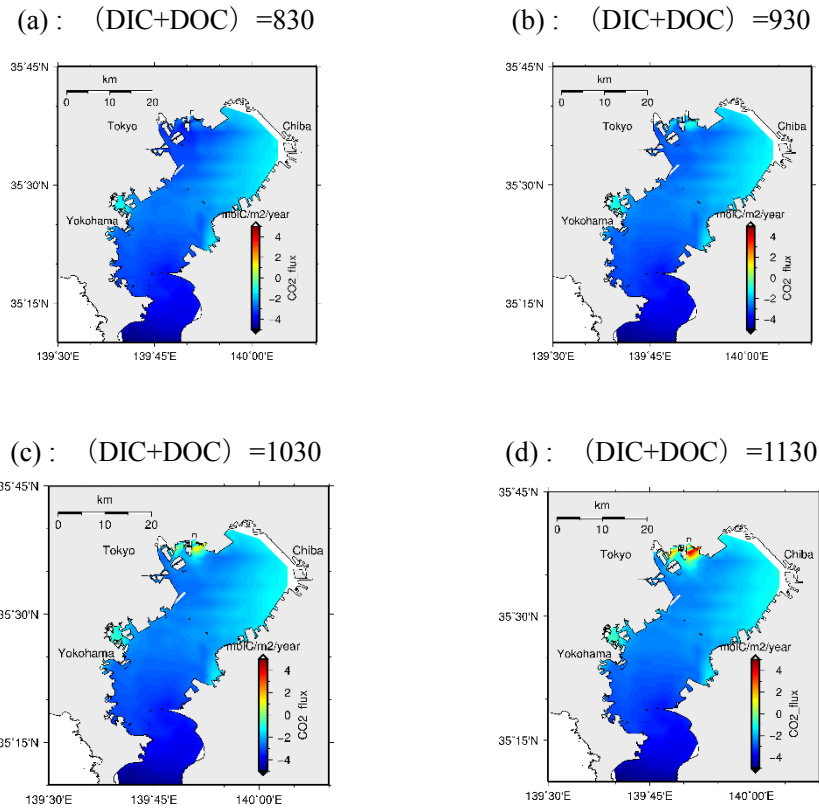


図 6.3 河川から流入する DIC を変化させたときの CO<sub>2</sub> フラックス年間収支

図 10.3 より多摩川河口付近に注目すると、河川から流入する DIC が 830 (μmol/L), 930 (μmol/L) の場合は年間トータルで吸収であるが、DIC が 1030 (μmol/L), 1130 (μmol/L) のケースでは年間トータルで放出傾向になっていることがわかる。従って河川から流入する DIC として 1130 (μmol/L) を採用する。

#### 6-4 二酸化炭素フラックス算定式の検討

二酸化炭素フラックスの計算式は様々な定式化が提案されており、ここではそれらを適用した時の結果を比較する。改めて今まで使用していた式を記す。

二酸化炭素フラックス  $F$  は式 (6.1) のように表される。

$$F = kK_0(p\text{CO}_{2\text{SW}} - p\text{CO}_{2\text{air}}) \quad (6.1)$$

ここで  $k$  はピストン速度と呼ばれる風速の関数であり、式 (6.2) で表される。(Wanninkhof, 1992)

$$k = 0.39 \times U_{10}^2 \times \left( \frac{S_c}{660} \right)^{-0.5} \quad (6.2)$$

ここで、 $U_{10}$ は海面 10m の風速、 $S_c$ はシュミット数で式 (6.3) で表される。0.39 は経験則から得られる次元を持つ定数であり、全体で(cm/h)の単位をもつ。

$$S_c = 2073.1 - 125.62T + 3.6276T^2 - 0.043219T^3 \quad (6.3)$$

$pCO_{2sw}$ は海表面の二酸化炭素分圧、 $pCO_{2air}$ は大気中の二酸化炭素分圧である。

フラックスの式を適用する際には単位の確認が最重要である。それぞれの単位は  $k$  が

(cm/h)、二酸化炭素の溶解平衡定数 $K_0$ が (mol/atm・kg)、 $pCO_2$ が (μatm) である。そのため実用上は

$$F(\mu\text{mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}) = k \times \frac{0.01}{3600} (\text{m}/\text{s}) \times K_0 (\text{mol}/\text{atm} \cdot \text{kg}) \times \rho_w (\text{kg}/\text{m}^3) \times \Delta pCO_2 (\mu\text{atm})$$

のように単位の変換をして計算する。 $\rho_w$ は海水の密度である。

さて、今まで適用していた waninnkohf (1992) の式の風速関数については式 (6.4) のように定数を変更した場合も提唱されている。

$$k = 0.31 \times U_{10}^2 \times \left( \frac{S_c}{660} \right)^{-0.5} \quad (6.4)$$

また Liss and Marlivat (1983) によって式 (6.5) が提案されている

$$\begin{aligned} k &= 0.17 \times U_{10} \times \left( \frac{S_c}{660} \right)^{-\frac{2}{3}}, [U_{10} \leq 3.6] \\ k &= (2.85 \times U_{10} - 9.65) \times \left( \frac{S_c}{660} \right)^{-\frac{1}{2}}, [3.6 < U_{10} \leq 13.0] \\ k &= (5.95 \times U_{10} - 49.3) \times \left( \frac{S_c}{660} \right)^{-\frac{1}{2}}, [13.0 < U_{10}] \end{aligned} \quad (6.5)$$

さらに、Tans et al. (1990) による式 (6.6) も使用されることが多い。

$$CO_2 Flux = E \times pCO_2$$

ここで、

$$E(\text{moles of } CO_2 \text{ m}^{-2}\text{year}^{-1}\mu\text{atm}^{-1}) = (0.016 \times U_{10} - 3), [U_{10} \geq 3] \quad (6.6)$$

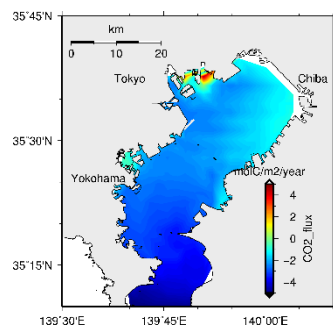
$$E(\text{moles of } CO_2 \text{ m}^{-2}\text{year}^{-1}\mu\text{atm}^{-1}) = 0, [U_{10} < 3]$$

である

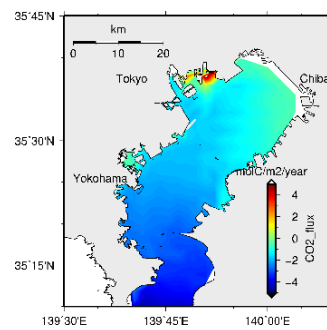
以上の式を用いたときの二酸化炭素フラックスの年間収支を図 6.4 に示す。

海表面全体での年間収支の結果は (a) が 2.59(molC/year)の吸収、(b) が 2.28(molC/year)の吸収、(c) が 1.56(molC/year)の吸収、(d) が 2.45(molC/year)の吸収であった。Tans et al.の式を用いた場合は吸収量が大きく減少したが、それ以外の式では大きな変化は見られなかった。また、いずれの式を用いても吸収傾向であることには変わりなかった。

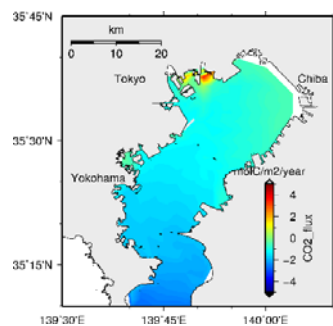
(a) Wanninkhof の式 (6.2) を適用



(b) Wanninkhof の式 (6.2) を適用



(c) Liss and Marlivat の式 (6.5)



(d) tans et al による式 (6.6)

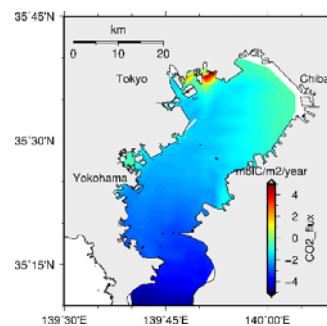


図 6.4 様々な二酸化炭素フラックスの式を適用した時の年間収支

#### 6-5 湾全体としての炭素収支

これまでの感度分析により境界条件の妥当な値を設定することができたので、底質も含めた東京湾全体における炭素収支を評価していく。炭素フラックスは大きく分けると図 10.4 に示すように①大気海面フラックス、②河川からの流入、③底質への沈降または底質からの溶出フラックス、④湾外への流出または湾外からの流入、に分類できる。

既往の研究では①の大気海面フラックスに着目しており、正味で吸収傾向にあるとされているが、その後の行方は不明確である。

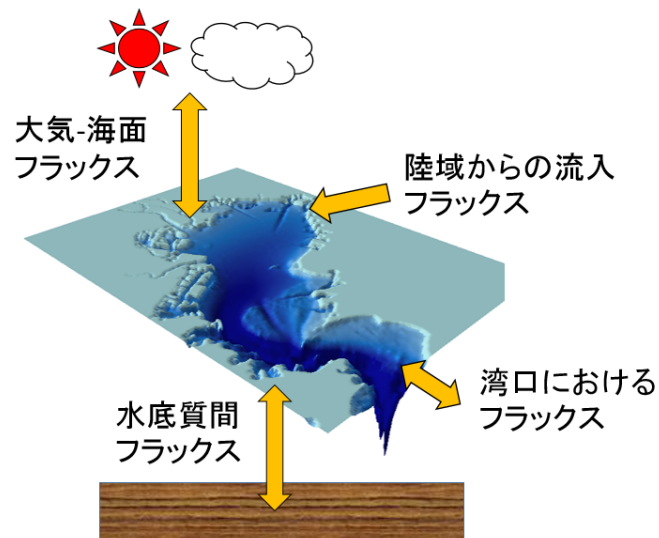


図 6.5 湾全体における炭素収支の概念図

先に述べた通り，本モデルでは底質の侵食，堆積は BSS の大きさと限界せん断応力  $\tau_D$ ， $\tau_E$  との大小で決まる．そこで  $\tau_D$ ， $\tau_E$  の値を変えたいくつかのケースにおける東京湾全体の炭素収支の計算結果を図 10.6 に示す．図 10.6 において数値は絶対値であり矢印の方向に炭素が移動しているとみなす．

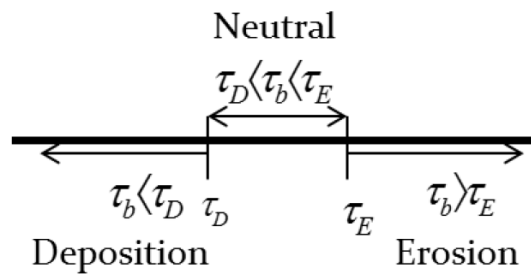


図 6.6 BSS の大きさによる侵食と堆積

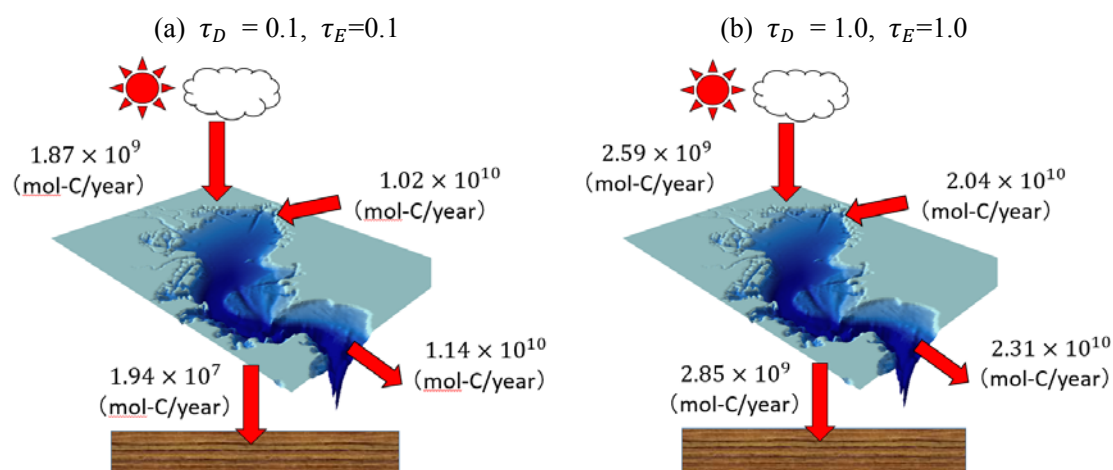


図 6.7  $\tau_D, \tau_E$ を変化させたときの炭素収支の結果

図 10.6 より， $\tau_D, \tau_E$ の値が大きくなる，すなわち堆積が起こりやすくなるにつれて水中から底質への堆積フラックスが増加していることが分かるが，ケース(a)では年間トータルで底質は侵食傾向であった一方ケース(b)では堆積傾向であったため，(b)のほうが現実にと整合していると考え，以後の計算でも $\tau_D = 1.0, \tau_E = 1.0$ を使用している．いずれのケースにおいても河川と大気から炭素が湾内に流入し，一部が底質へ堆積し固定され，大部分は湾外へ流出しているといえる．

#### 6-6 大気中二酸化炭素濃度の変動による影響

本節では気候変動が進行した場合，東京湾における炭素収支はどのようなものかを検討するために IPCC 第 5 次報告書で提唱されている RCP シナリオの 2100 年における状況を想定し，計算を行った．

図 10.7 に IPCC が発表した二酸化炭素濃度予測，表 10.1 に気温上昇予測を示す．

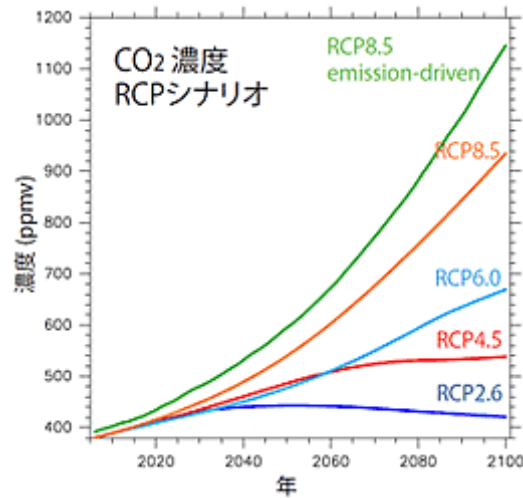


図 6.8 将来の大気中二酸化炭素濃度予測

([https://www.jamstec.go.jp/j/about/press\\_release/20110223/](https://www.jamstec.go.jp/j/about/press_release/20110223/)より引用)

表 6.1 1986～2005 を基準とした，21 世紀末の気温上昇予測  
(IPCC 第 5 次評価報告書を基に作成．環境省，2014)

シナリオ名称	温暖化対策	平均気温	可能性の高い変動幅
RCP8.5	対策なし	+3.7℃	+2.6℃～+4.8℃
RCP6.0	小	+2.2℃	+1.4℃～+3.1℃
RCP4.5	中	+1.8℃	+1.1℃～+2.6℃
RCP2.6	最大	+1.1℃	+0.3℃～+1.7℃

ここでは現在よりも二酸化炭素濃度が大きく上昇する(b)RCP4.5, (c)RCP6.0, (d)RCP8.5 の 3 つのケースを想定して計算を行う．海水温は気温に比べて変動しにくいため，上昇した気温の 50%分だけ海水温も上昇したと仮定する．

また，海水中の DIC も変動するが，その割合は式 (10.1) で表される Revelle factor に従うとされている．

$$Revelle\ factor = \frac{\left(\frac{\Delta pCO_2}{pCO_2}\right)}{\left(\frac{\Delta [DIC]}{[DIC]}\right)} = 8 \sim 13 \quad (10.1)$$

ここでは Revelle factor=10 とし，以下のようなケースを想定して境界条件，初期条件を調整した．



表 6.2 初期条件, 開境界条件の変更点

	RCP4.5 のケース	RCP6.0 のケース	RCP8.5 のケース
大気中CO <sub>2</sub> 濃度	500ppm	700ppm	900ppm
気温	+2.0℃	+3.0℃	+5.0℃
海水温	+1.0℃	+1.5℃	+2.5℃
外洋 DIC	+50 μmol/kg	+150 μmol/kg	+240 μmol/kg
河川 DIC	+25 μmol/kg	+75 μmol/kg	+120 μmol/kg

図 10.8 にそれぞれのケースの計算結果をまとめたものを示す.

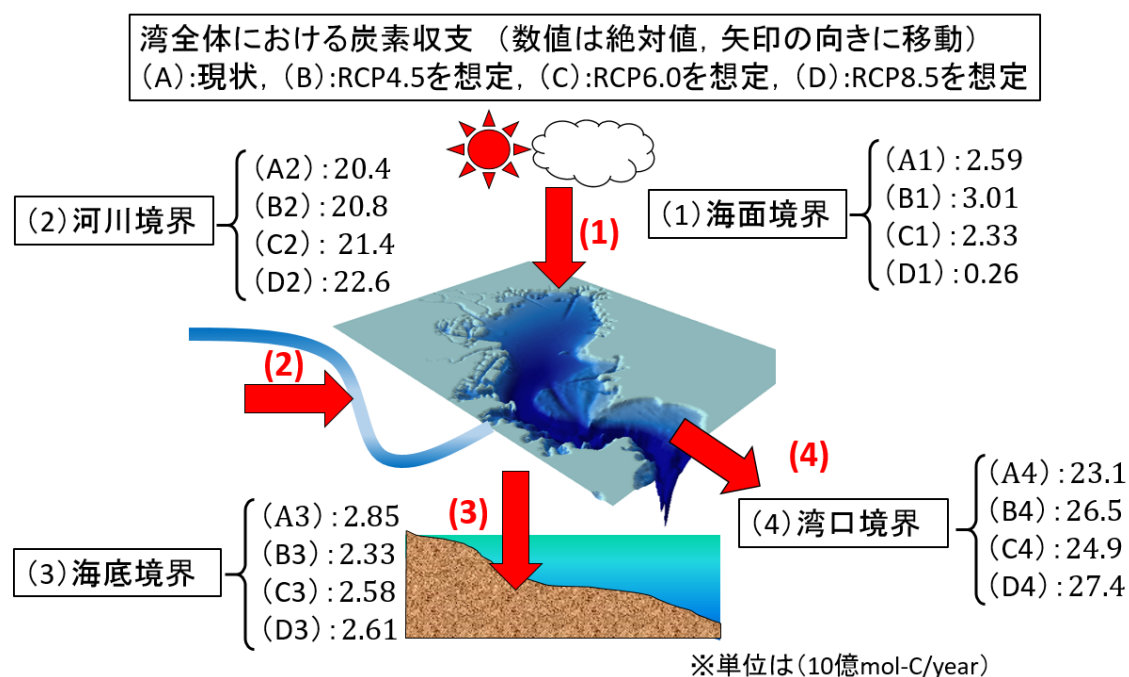


図 6.9 2100 年における東京湾の炭素収支予測

まず大気-海面フラックスに関してはケース(b), ケース(c)では現在の状況に比べて吸収量が増加しているが, ケース(d)では現在よりも減少している. 次に, 水底質間のフラックスに関してはケース(b), ケース(c), ケース(d)いずれにおいても侵食方向のフラックスとなっており, 温暖化対策が少ないほど侵食量が大きくなっていた. 外洋との交換に関してはケース(b), ケース(c), ケース(d)いずれにおいても湾内への流入となっており, 現在の状況とは逆向きのフラックスである.

この結果の解釈は様々であるが, 大気, 海面フラックスに関してはある程度平衡に近い状態へ近づいているため, 各ケースにおいて分圧差の違いはあまり大きくないと考えられるので, 水温の上昇率と外洋 DIC の上昇率が炭素収支に大きな影響を与えると推察でき

る。水温の上昇によって有機物の分解速度が大きくなり、今まで底質へ堆積していた有機物が底質へ届く前に分解されてしまったことなどが理由として考えられる。

外洋とのフラックスが流入方向へ変わってしまった理由は DIC の増加分を多く見積もってしまったためであると考えられるので、さらなる調整が必要である。

各ケースにおける炭酸系パラメータの計算結果を図 10.9～図 10.12 に示す。

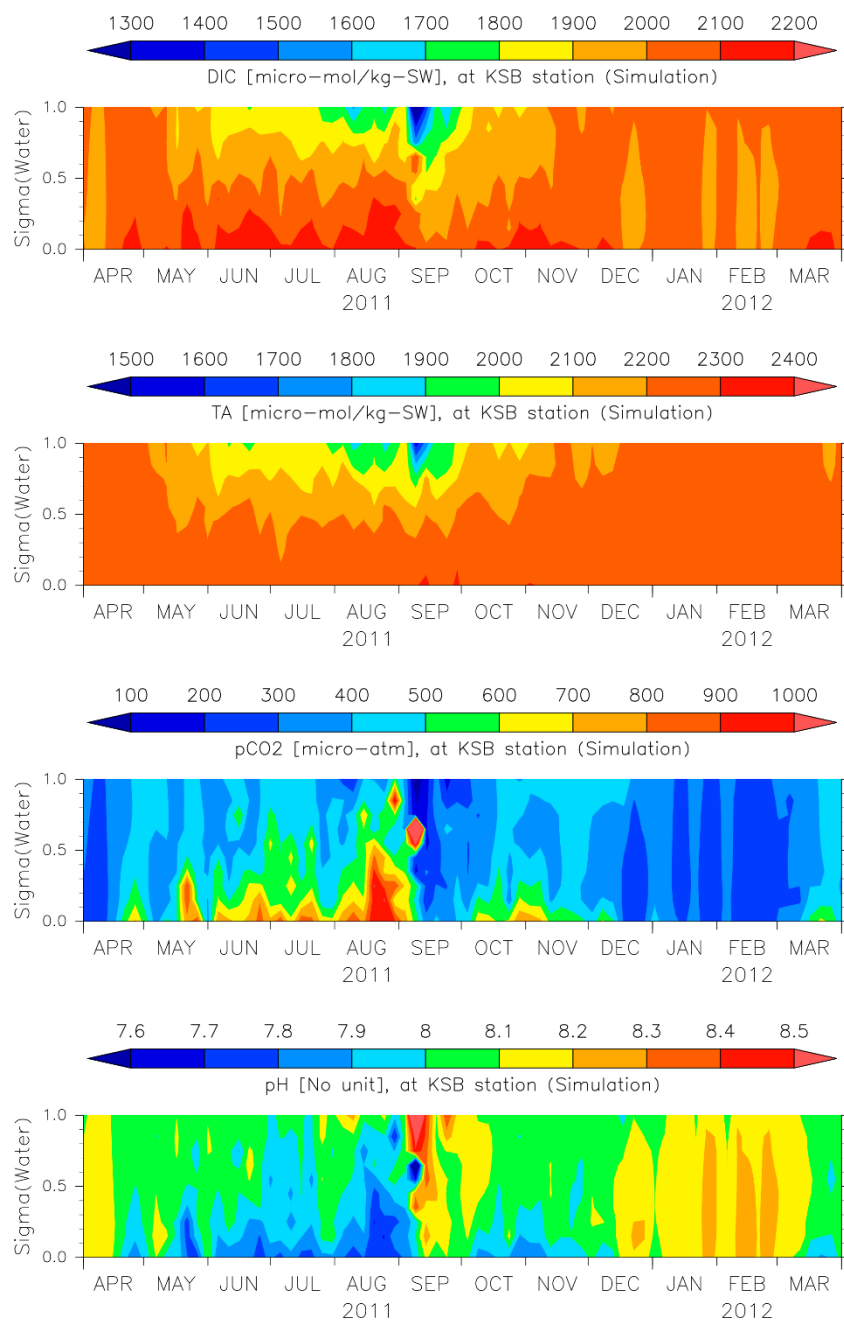


図 6.10 (a) 大気中二酸化炭素濃度 400ppm (現在) の炭酸系計算結果

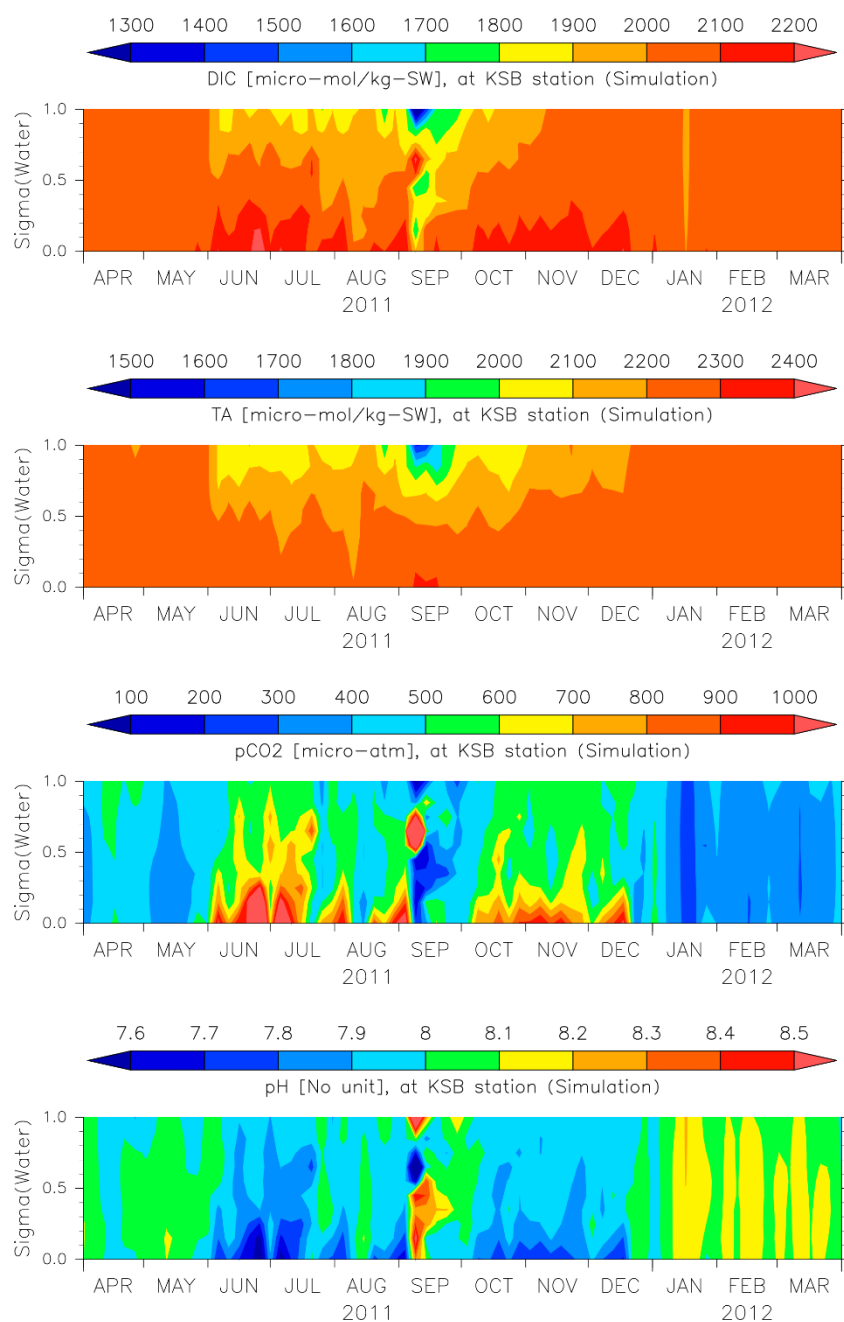


図 6.1 1 (b) RCP4.5 を想定した時の炭酸系計算パラメータ結果

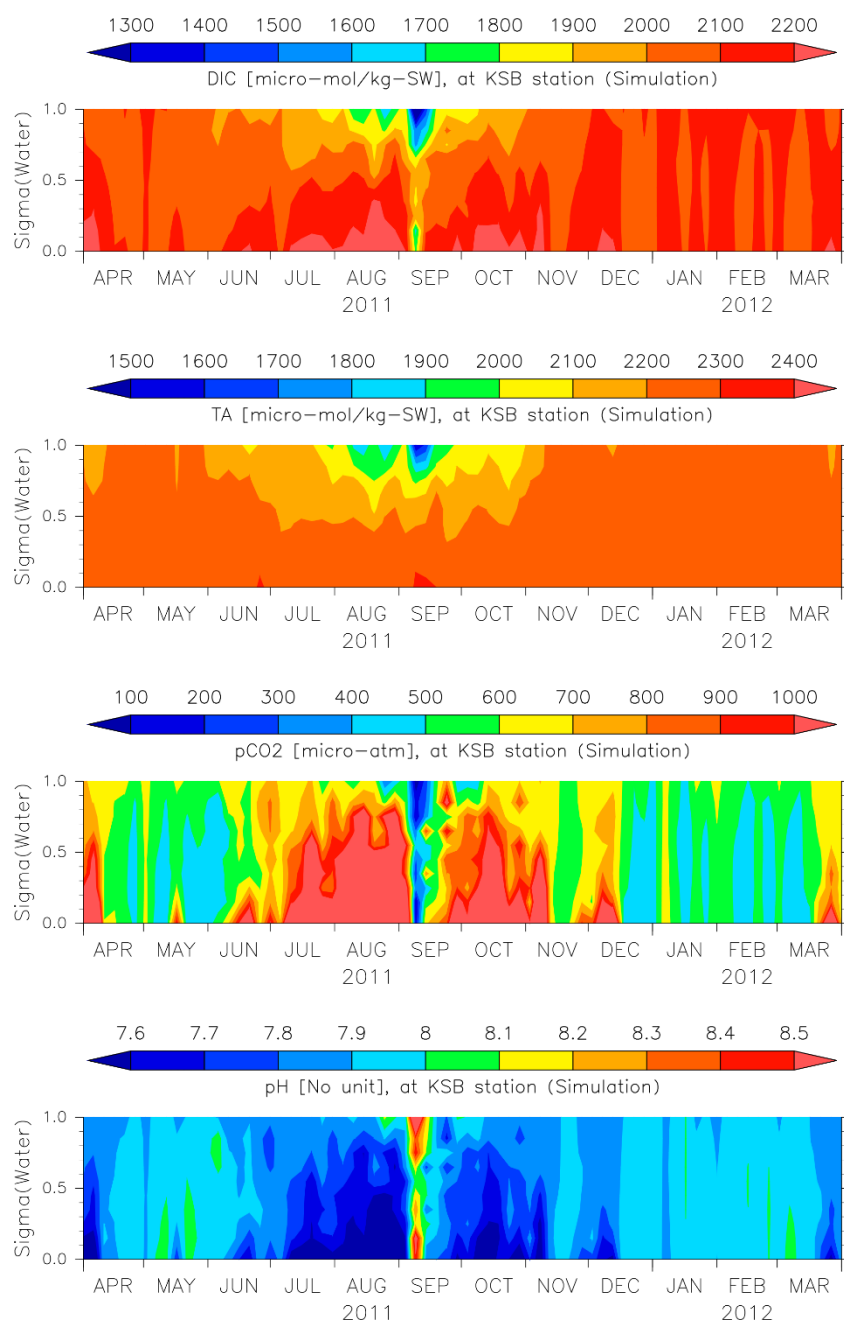


図 6.1 2 (c) RCP6.0 を想定した時の炭酸系計算パラメータ結果

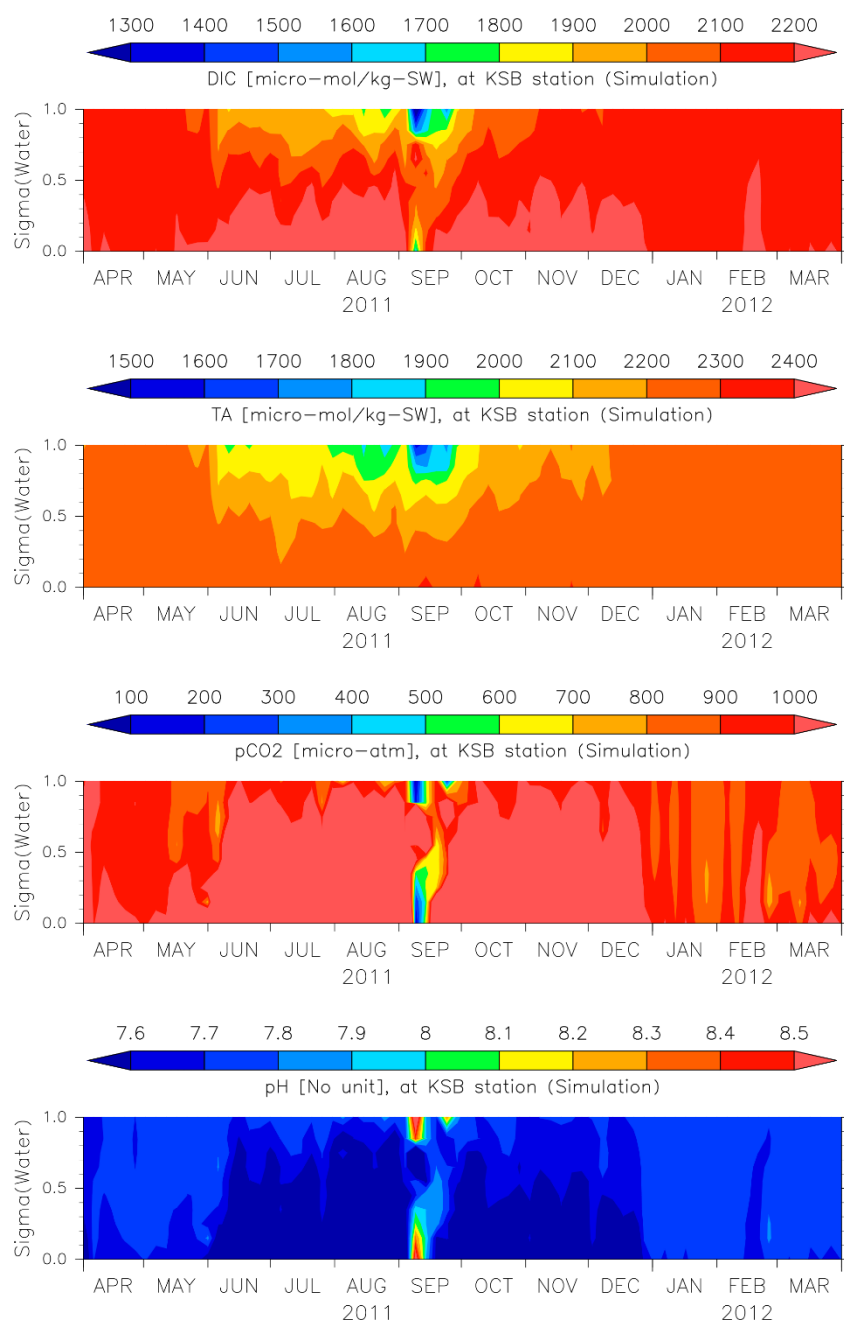


図 6.13 (d) RCP8.5 を想定した時の炭酸系計算パラメータ結果

## 第7章 結論

以上の炭酸系計算結果から、水中の二酸化炭素分圧は大気-海面フラックスはもちろんのこと、水底質間のフラックスの影響が大きいことが分かった。これには底質中有機物の分解により発生する二酸化炭素が水中に溶出するプロセスが強く影響しており、溶存酸素濃度が減少するメカニズムと同様の理解ができる。また、表層 $p\text{CO}_2$ は年間を通して観測値よりも過剰な値を取っていた。再現性向上のためには一次生産をより高い精度で再現することが重要である。底質内のDIC、TA濃度や、底質からの溶出フラックスに関してはキャリブレーションが不十分である可能性があるため、今後の現地観測や実験によるデータ収集が求められる。

海面の $p\text{CO}_2$ の再現性の不足に伴って、大気-海面フラックスの年平均値は若干低く見積もられていると考えられるが、そのオーダーは実測値と整合していた。また提唱されている様々な二酸化炭素フラックス推定式を適用したところ多少の値の違いはあったが、いずれも正味で吸収傾向であった。また河川流入による炭素の量を適切に見積もることで、河口域での二酸化炭素放出傾向を再現できた。

このモデルを用いて、湾全体としての炭素収支を推算したところ、湾内に流入する炭素は大部分が陸域由来であり、流入炭素の行方は1割強が底質内へ貯留され、残りは湾外へ流出するという結果になった。堆積量は有機物の沈降速度や、侵食/堆積を決定づける限界せん断応力の値により大きく左右されるが、フラックスの向きは変わらないと考えられる。

また気候変動を想定した2100年の東京湾における炭素収支を推算した結果、大気中の二酸化炭素濃度がある一定の値を超えると海水の二酸化炭素吸収量が急激に低下した。これは海水中の二酸化炭素分圧の増加および海水温の上昇により、本来海水が持つ酸に対する緩衝機能が低下したためであると考えられる。また、いずれのケースにおいても炭素流入分よりも流出分がやや多い結果となったが、これは外洋のDIC境界条件設定値によるものだと考えられる。

この結果から緩和策を実行しない場合は海洋に二酸化炭素濃度の大幅な増加とそれに伴う海洋酸性化の影響が顕著になり、サンゴや貝類などが殻を形成できなくなるなど海洋生態系へ大きな影響を与える可能性が高いことが示唆された。さらに海洋の二酸化炭素吸収機能の低下により、大気中二酸化炭素濃度の増加速度が現在よりも大きくなる可能性があるため、気候変動緩和策は必要不可欠である。

今後の展望として、豊富な実測データを蓄積しつつモデルのキャリブレーションを行い、二酸化炭素の大気-海面フラックスおよび水底質間フラックスの精度を向上することが求められる。また、藻場による二酸化炭素吸収やDIC、炭酸カルシウムの生成、溶解に伴う炭酸系の変化などもモデル化することにより、より精密な計算を行うことが求められる。

## 参考文献

- [1] 飯田 洋介, 小嶋 惇, 中野 俊也, “全球における大気-海洋間二酸化炭素交換量推定手法の開発 (海洋気象特集 海洋気象業務に関する最新の技術的動向),” 測候時報, Vol. 81, No. 0, pp. S1-25, 2014.
- [2] 石井 光廣, 長谷川 健一, 柿野 純, “千葉県データセットから見た東京湾における水質の長期変動,” 水産海洋研究, Vol. 72, No. 3, pp. 189-199, 2008.
- [3] 内山 雄介, 松山 真由子, 上平 雄基, “太平洋全域における海表面二酸化炭素フラックス変動 および海洋酸性化の評価,” 土木学会論文集b2 (海岸工学) Vol. 70, No. 2, pp. 1286-1290, 2014.
- [4] 岡田 知也, 吉田 潤, 古川 恵太, “現場型硫化物センサーを用いた硫化物の鉛直分布の測定およびその分布の特徴,” 土木学会論文集 B3 (海洋開発), Vol. 67, No. 2, pp. I\_334-I\_339, 2011.
- [5] 岡田 知也, 吉田 潤, 古川 恵太, “現場型硫化物センサーを用いた硫化物の鉛直分布の測定およびその分布の特徴,” 土木学会論文集B3 (海洋開発), Vol. 67, No. 2, p. I\_334-I\_339, 2011.
- [6] 片山 博之, 濱田 義勝, 烏谷 隆, “大村湾沿岸における大気海洋間の二酸化炭素交換量の測定,” 九州大学応用力学研究所所報, No. 117, pp. 65-69, 1999.
- [7] 蒲生俊敬, 海洋地球化学. 講談社, 2014.
- [8] 神田 譲太, “東京湾における二酸化炭素収支の時空間変動 (科学研究費補助金研究成果報告書)” 課題番号20510005, 2011
- [9] 杉本 裕之, 平石 直孝, 石井 雅男, 緑川 貴, “太平洋における大気-海洋間二酸化炭素フラックス推定手法”, 気象研究所技術報告, 第66号, 2012
- [10] 紀本電子工業株式会社. 全アルカリ度滴定装置ATT-05取扱説明書年号
- [11] 佐々木 淳, “3次元密度流としての内湾の流れのモデリング”, 1998年度 (第34回) 水工学に関する夏期研修会講義集, B-3, 20pp, 土木学会, 1998.
- [12] 鈴木 基之, 山田 敏雅, 宮崎 敏郎, 河添 邦太郎, “河川における汚染物質の拡散の研究,” 生産研究, Vol. 27, No. 3. pp. 108-112, 1975.
- [13] 国立環境研究所, “貧酸素水塊の形成機構と生物への影響評価に関する研究”, 国立環境研究所特別研究報告, 2010.
- [14] 小林純, 日本の河川の平均水質とその特徴に関する研究, 農学研究 (岡山大学農業生物研究所), 48, 63-106, 1960.
- [15] 高谷 祐介, 延与 和敬, 飯田 洋介, “海面力学高度データを用いた太平洋表面海水中の新たな全アルカリ度推定式 (海洋気象特集 海洋気象業務に関する最新の技術的動向),” 測候時報, Vol. 81, No. 0, pp. S27-37, 2014.



- [16] 田口 二三生, 藤原 建紀, 山田 佳昭, 藤田 弘一, 杉山 雅人. ” 沿岸海域のアルカリ度” , 沿岸海洋研究, 第47巻, 第1号, 71-75, 2009
- [17] 西村典子, 渡辺桂一郎, 岸田巧, 岩田徹, 大滝英治, “河川水中の二酸化炭素濃度(pCO<sub>2</sub>)の変動特性,” 環境科学会誌, Vol. 11, No. 3. pp. 297–304, 1998.
- [18] 根岸 敦規, “微生物を利用した水銀汚染土壌の浄化技術,” 地下水・土壌汚染とその防止対策に関する研究集会講演集, Vol. 21, pp. 444–449, 2015.
- [19] 藤井 智康, 駒井 幸雄, 藤原 建紀, 横井 貴範, “港湾等の強閉鎖性海域の貧酸素水塊の発生機構と動態,” 土木学会論文集B2(海岸工学), Vol. 66, No. 1, pp. 1046–1050, 2010.
- [20] 藤井 智康, 駒井 幸雄, 藤原 建紀, 横井 貴範, “港湾等の強閉鎖性海域の貧酸素水塊の発生機構と動態,” 土木学会論文集b2 (海岸工学) Vol.66, No.1 ,1046-1050, 2005.
- [21] 古屋 秀基, ” 東京湾湾奥部における二酸化炭素収支の変動特性に関する研究” , 2014年度東京大学大学院 新領域創成科学研究科 修士論文
- [22] S.V.パタンカー (水谷 幸夫, 香月 正司共訳) , ” コンピュータによる熱移動と流れの数値解析” , 森北出版株式会社, 1985.
- [23] Abhijit Mitra and Sufia Zaman. Carbon Sequestration by Coastal Floral Community: A ground zero observation Non blue carbon. The energy and Resources Institute, 2014
- [24] Achiari, H., Sasaki, J., Numerical analysis of wind-wave climate change and spatial distribution of bottom sediment properties in Sanbanze Shallows of Tokyo Bay, J.Coast.Res.50,343-347, 2007
- [25] Achiari, H., 2007, Computation of Wave-Current Field in Sanbanze Shallows of Tokyo Bay, PhD Dissertation, Yokohama National University, 102pp
- [26] Amunugama A.A.W.R.R.M.K., Development of a Benthic-Pelagic Coupled Numerical Model for Analyzing Water and Sediment Quality in Tokyo Bay, PhD Dissertation, Yokohama National University, 2015
- [27] Amunugama, A. A. W. R. R. M. K., Sasaki, J., Nakamura, Y. and Suzuki, T.: Spatial distribution of sediment quality in Tokyo Bay through benthic-pelagic coupled modeling approach, J. JSCE B2 (Coastal Eng.), Vol. 71 (2), I\_1399-I\_1404, 2015, doi:10.2208/kaigan.71.I\_1399.年号
- [28] Anders Omstedt, Guide to Process Based Modeling of Lakes and Coastal Seas. Springer, 2015
- [29] Arndt, S., P. Regnier, Y. Godd  ris, and Y. Donnadieu, “GEOCLIM reloaded (v 1.0): A new coupled earth system model for past climate change,” *Geosci. Model Dev.*, Vol. 4, No. 2, pp. 451–481, 2011.
- [30] Artioli, Y., Jeremy C. Blackford, Momme Butenschon, Jason T. Holt, Sarah L. Wakelin, Hwlmuth Thomas, Alberto V. Borges, J. Icarus Allen., “The carbonate system in the North Sea: Sensitivity and model validation,” *J. Mar. Syst.*, Vol. 102–104, pp. 1–13, 2012.

- [31] Attari, M.J., 2012, Numerical Modeling of Water Quality Considering Sediment Biochemical Processes in Tokyo Bay, PhD Dissertation, Yokohama National University, 154pp
- [32] Attari, M.J., Sasaki, J., 2012, Enhanced Numerical Model for Material Cycling and Dissolved Oxygen Dynamics in Tokyo Bay, Japan, ASCE, 12, 239-255, 2012
- [33] Attari, M.J., Sasaki, J., Others, Modeling of Light Intensity and Phytoplankton Dynamics in Tokyo Bay Using Modeling Dataset, in: The Twenty-Second International Offshore and Polar Engineering Conference. International Society of Offshore and Polar Engineers, 2012
- [34] Cai, Wei-Jun "Estuarine and coastal ocean carbon paradox: CO<sub>2</sub> sinks or sites of terrestrial carbon incineration?," *Ann. Rev. Mar. Sci.*, Vol. 3, pp. 123–45, 2011.
- [35] Dickson, A.G., Sabine, C.L. and Christian, J.R. (Eds.). Guide to best practices for ocean CO<sub>2</sub> measurements. PICES Special Publication 3, 191 pp, 2007
- [36] Dominic M. Ditoro. Sediment Flux Modeling, Wiley-Interscience, 2001
- [37] Edman, M. and A. Omstedt, "Modeling the dissolved CO<sub>2</sub> system in the redox environment of the Baltic Sea," *Limnol. Oceanogr.*, Vol. 58, No. 1, pp. 74–92, 2013.
- [38] Fagherazzi, S. *et al.*, "Numerical models of salt marsh evolution: Ecological, geomorphic, and climatic factors," *Rev. Geophys.*, Vol. 50, No. 2011, pp. 1–28, 2012.
- [39] Goda, Y., Random Seas and Design of Maritime Structures, 3rd edition. World Scientific Publishing Company, New Jersey, 2010
- [40] Hydes, D.J. and S. E. Hartman, "Seasonal and inter-annual variability in alkalinity in Liverpool Bay (53.5 N, 3.5 W) and in major river inputs to the North Sea," *Ocean Dyn.*, Vol. 62, No. 2, pp. 321–333, 2012.
- [41] Ingrosso, G. *et al.*, "Drivers of the carbonate system seasonal variations in a Mediterranean gulf," *Estuar. Coast. Shelf Sci.*, Vol. 168, pp. 58–70, 2016.
- [42] Ishii, M., K. Hasegawa, and K. Kakinoh, "Long-term fluctuations of the water quality in Tokyo Bay [Japan] judged from a data set of Chiba prefecture," *Bull. Japanese Soc. Fish. Oceanogr.*, Vol. 72, No. 3, pp. 189–199, 2008.
- [43] IPCC, "IPCC fourth assessment report", 2007
- [44] IPCC, "IPCC fifth assessment report", 2013
- [45] Johnson, Z.I., B. J. Wheeler, S. K. Blumberg, C. M. Carlson, C. S. Ward, and D. E. Hunt, "Dramatic variability of the carbonate system at a temperate coastal ocean site (Beaufort, North Carolina, USA) is regulated by physical and biogeochemical processes on multiple timescales," *PLoS One*, Vol. 8, No. 12, pp. 1–8, 2013.
- [46] Lantz, C.A., M. J. Atkinson, C. W. Winn, and S. E. Kahng, "Dissolved inorganic carbon and total alkalinity of a Hawaiian fringing reef: Chemical techniques for monitoring the effects of ocean acidification on coral reefs," *Coral Reefs*, Vol. 33, No. 1, pp. 105–115, 2014.

- [47] Marion.G.M, F. J. Millero, M. F. Camões, P. Spitzer, R. Feistel, and C. T. A. Chen, "PH of seawater," *Mar. Chem.*, Vol. 126, No. 1–4, pp. 89–96, 2011.
- [48] Melzner.F *et al.*, "Future ocean acidification will be amplified by hypoxia in coastal habitats," *Mar. Biol.*, Vol. 160, No. 8, pp. 1875–1888, 2013.
- [49] Michałowski.T and A. G. Asuero, "New Approaches in Modeling Carbonate Alkalinity and Total Alkalinity," *Crit. Rev. Anal. Chem.*, Vol. 42, No. 3, pp. 220–244, 2012.
- [50] Okamura.K *et al.*, "Potentiometric open-cell titration for seawater alkalinity considering temperature dependence of titrant density and Nernst response of pH electrode," *Geochem. J.*, Vol. 48, No. 2, pp. 153–163, 2014.
- [51] Pierrot.D, E. Lewis, and D. W. R. Wallace, "MS Excel program developed for CO<sub>2</sub> system calculations," *ORNL/CDIAC-105a. Carbon Dioxide Inf. Anal. Center, Oak Ridge Natl. Lab. US Dep. Energy, Oak Ridge, Tennessee*, No. 3, 2006.
- [52] Peter Schippers, Miquel Lurling and Marten Scheffer, Increase of atmospheric CO<sub>2</sub> promotes phytoplankton productivity, *Ecology Letters*, 7: p446-p451, 2004
- [53] Rasmeemasuang, T., 2007, Integrated Modeling of Multi-Class Sediment Dynamics in a Semi-Enclosed Coastal Sea, PhD Dissertation, Yokohama National University, 147pp
- [54] Rasmeemasuang, T., Sasaki, J., 2008, Modeling of mud accumulation and bed characteristics in Tokyo Bay, *Coast.Eng.* 50, 277-307
- [55] Regnier.P *et al.*, "Modelling Estuarine Biogeochemical Dynamics: From the Local to the Global Scale," *Aquat. Geochemistry*, Vol. 19, No. 5–6, pp. 591–626, 2013.
- [55] Tokoro.T *et al.*, "Net uptake of atmospheric CO<sub>2</sub> by coastal submerged aquatic vegetation," *Glob. Chang. Biol.*, Vol. 20, No. 6, pp. 1873–1884, 2014.
- [56] Richard G. Williams and Michael J.Follows. *Ocean Dynamics and the Carbon Cycle : Principles and Mechanisms*. Cambridge Univ. Press, 2011
- [57] Richard E.Zeebe and Dieter Wolf-Gladrow. *CO<sub>2</sub> in Seawater : Equilibrium, Kinetics, Isotopes* (Elsevier Oceanography Series), 2001
- [58] Tans,P, Inez, Y, Takahashi, T, "Observational Constrains on the Global Atomospheric CO<sub>2</sub> Budget", *Science*, Vol.247, 1990
- [59] UNEP, "Blue Carbon The Role of Healthy Oceans in Binding Carbon", 2009
- [60] Velo.A, F. F. Pérez, T. Tanhua, M. Gilcoto, A. F. Ríos, and R. M. Key, "Total alkalinity estimation using MLR and neural network techniques," *J. Mar. Syst.*, Vol. 111–112, pp. 11–18, 2013.
- [61] Visinelli.L, S. Masina, M. Vichi, A. Storto, and T. Lovato, "Impacts of data assimilation on the global ocean carbonate system," *J. Mar. Syst.*, Vol. 158, pp. 106–119, 2016.

- [62] Volta.C, S. Arndt, H. H. G. Savenije, G. G. Laruelle, and P. Regnier, “C-GEM (v 1.0): A new, cost-efficient biogeochemical model for estuaries and its application to a funnel-shaped system,” *Geosci. Model Dev.*, Vol. 7, No. 4, pp. 1271–1295, 2014.
- [63] Volta.C, G. Gildas Laruelle, S. Arndt, and P. Regnier, “Linking biogeochemistry to hydro-geometrical variability in tidal estuaries: A generic modeling approach,” *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, Vol. 20, No. 3, pp. 991–1030, 2016.
- [64] Wanninkhof.R, “Relationship Between Wind Speed and Gas Exchange,” *J. Geophys. Res.*, Vol. 97, No. 92, pp. 7373–7382, 1992.
- [65] Weiss.R.F, “Carbon dioxide in water and seawater: the solubility of a Non-ideal gas,” *Mar. Chem.*, Vol. 2, No. 3, pp. 203–215, 1974.
- [66] Yamamoto-Kawai Michiyo, Kawamura Natsuko, and ONo Tsuneo, “Calcium carbonate saturation and ocean acidification in Tokyo Bay, Japan,” *J. OceaNogr.*, Vol. 71, No. 4, pp. 427–439, 2015.
- [67] Zeebe, *CO2 in Seawater: Equilibrium, Kinetics, Isotopes*, Volume 65. Elsevier OceaNography Series, 2001
- [68] Zeebe.R.E, “History of Seawater Carbonate Chemistry, Atmospheric CO<sub>2</sub>, and Ocean Acidification,” *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, Vol. 40, No. 1, pp. 141–165, 2012