

VII-62

Two-Regionモデルのパラメータ推定法の提案と非定常流れ場への応用

信州大学工学部 正会員 ○棚橋秀行

岐阜大学工学部 正会員 佐藤 健

1. はじめに

Tailingのある破過曲線を不動水と可動水間の物質移動で表現したTwo-Regionモデル¹⁾を用いて土中の溶質輸送を検討した研究例が多くなってきている。しかしfittingによって推定されたパラメータは、推定対象の破過曲線を良く再現するものの実験条件との関連性が不明確である。本研究は、より精度の高いTwo-Regionモデルを開発するとともにパラメータ推定に関する問題点を解決し、非定常流れ場における室内実験結果に対して提案したTwo-Regionモデルを適用し、この方法の妥当性を検証することを目的に行ったものである。

2. イオン吸着競合を考慮したTwo-Regionモデルの構築

複数のイオン間の交換反応のモデル化に、本論文は $K_B^A = (y_A/x_A)/(y_B/x_B)$ で定義²⁾される分離係数 K_B^A を採用した。ここで、 K_B^A :イオンAのイオンBに対する分離係数(-), y_A, y_B :土に吸着したイオンA, イオンBの吸着分率(-), $y_i = S_i/CEC$ (-), S_i :イオンiの土lgあたりの吸着当量 (meq/g), CEC:土の陽イオン交換容量 (meq/g), x_A, x_B :液相中のイオンA, イオンBの濃度分率(-), $x_i = C_i/C_T$ (-), C_i :イオンiの液相中当量濃度 (meq/cm³), C_T :全イオンの液相中当量総濃度 (meq/cm³)である。系内に2つのイオン C_1, C_2 が存在する場合について、分離係数を用いたイオン交換反応のモデル化をTwo-Regionモデルに組み込むと以下ようになる。

$$\begin{aligned} \theta_m \frac{\partial C_{1m}}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial C_{1im}}{\partial t} + f \rho_d q_T \left\{ \frac{K_1^2 x_{2m}}{(K_1^2 x_{2m} + x_{1m})^2} \right\} \frac{1}{C_{Tm}} \frac{\partial C_{1m}}{\partial t} + f \rho_d q_T \left\{ \frac{-K_1^2 x_{1m}}{(K_1^2 x_{2m} + x_{1m})^2} \right\} \frac{1}{C_{Tm}} \frac{\partial C_{2m}}{\partial t} \\ + (1-f) \rho_d q_T \left\{ \frac{K_1^2 x_{2im}}{(K_1^2 x_{2im} + x_{1im})^2} \right\} \frac{1}{C_{Tim}} \frac{\partial C_{1im}}{\partial t} + (1-f) \rho_d q_T \left\{ \frac{-K_1^2 x_{1im}}{(K_1^2 x_{2im} + x_{1im})^2} \right\} \frac{1}{C_{Tim}} \frac{\partial C_{2im}}{\partial t} \\ - \theta_m D \frac{\partial^2 C_{1m}}{\partial z^2} + \theta_m v_m \frac{\partial C_{1m}}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \theta_{im} \frac{\partial C_{1im}}{\partial t} + (1-f) \rho_d q_T \left\{ \frac{K_1^2 x_{2im}}{(K_1^2 x_{2im} + x_{1im})^2} \right\} \frac{1}{C_{Tim}} \frac{\partial C_{1im}}{\partial t} \\ + (1-f) \rho_d q_T \left\{ \frac{K_1^2 x_{1im}}{(K_1^2 x_{2im} + x_{1im})^2} \right\} \frac{1}{C_{Tim}} \frac{\partial C_{2im}}{\partial t} - \alpha (C_{1m} - C_{1im}) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、各量の下付添字のm:可動水, im:不動水, q_T :陽イオン交換容量CEC(meq/g), z :距離 (cm), $C_{Tm} = C_{1m} + C_{2m}$, $x_{1m} = \frac{C_{1m}}{C_{Tm}}$, $x_{2m} = \frac{C_{2m}}{C_{Tm}}$, $C_{Tim} = C_{1im} + C_{2im}$, $x_{1im} = \frac{C_{1im}}{C_{Tim}}$, $x_{2im} = \frac{C_{2im}}{C_{Tim}}$, D :分散係数(cm²/min), v_m :可動水の平均実流速(cm/min, (= q/θ_m)), q :見かけの流速(cm/min), θ :体積含水率(-), α :物質移動係数(1/min), ρ_d :土の乾燥密度(g/cm³), f :可動水と接している部分の土全体に対する質量比((-), 以下、可動水接触分率と略)である。式(1),(2)はイオン1についての基礎式である。イオン2は各量の添字1と2を逆にしたものとなる。本論文では Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ と、実験で用いた吸着性溶質としての NH_4^+ の合計5成分のイオンのに対する

3. パラメータの決定

本論文では土試料として豊浦砂，汚染物質として NH_4^+ 、 Cl^- 溶液を用いた室内実験を行い， NH_4^+ と Cl^- の破過曲線について，以下の手順でパラメータを求めた。①まず重力排水実験の残存飽和度から不動水量(θ_{im})を求めた。②可動水接触分率(f)を等球モデル³⁾で算出した。③本研究で用いた水道水中・豊浦砂表面に存在する5成分の陽イオン間の分離係数を抽出実験によって実験的に測定した。その結果を表-1に示す。④非吸着性物質(Cl^-)の実測破過曲線とOne-Regionモデルのfittingから分散係数(D)を求める。⑤物質移動係数(α)は，①～④で求められたパラメータを用い，非吸着性物質(Cl^-)，吸着性物質(NH_4^+)の実測破過曲線とTwo-Regionモデルのfittingにより推定した。

4. 非定常流れ場へのTwo-Regionモデルの応用

推定したパラメータを用いて，非定常流れ場へのTwo-Regionモデルの適用を試みた。不飽和帯も含む鉛直1次元浸透流の式を風上重み付き残差法によって離散化し，分離係数を組み込んだTwo-Regionモデルとともに，非定常計算のプログラムに従って計算を行った。各実験における実測水分分布と計算結果の比較を図-1に示す。この比較より，計算飽和度分布は実測飽和度分布を良く再現しており，本解析における水分移動の妥当性を確認した。実験で得られた破過曲線と，分離係数を組み込んだTwo-Regionモデルの破過曲線を図-2に示す。3.で提案した方法で決定したTwo-Regionモデルのパラメータによって，実測破過曲線が非常に精度良く再現できることがわかった。

5. 結論

破過曲線に現れるtailing現象を説明するために開発されたTwo-Regionモデルを土中のイオン吸着競合を考慮して改良するとともに，モデルに含まれるパラメータの推定法を新たに提案した。提案した方法によってパラメータを推定し，非定常流れ場における溶質輸送と水分の運動の実験結果をシミュレートした。

参考文献

- 1) M.Th.van Genuchten, and P.J.Wierenga : Mass transfer studies in sorbing porous media, I, Analytical solutions, Soil Sci. Soc. Am. J., Vol.40, pp.473~480, 1976.
- 2) 加藤尚武・田坂広志 : 土壌環境における多成分系破過曲線の推算(Ⅱ), イオン交換平衡, 日本原子力学会誌, Vol.27, No.10, pp.963~967, 1985.
- 3) 三輪茂雄 : 粉体工学通論, 日刊工業新聞社, pp.45, 1991.

表-1 分離係数

分子例	A				
	Ca^{++}	Mg^{++}	Na^+	K^+	NH_4^+
K^+	1	0.917	3.042	7.958	0.972
Mg^{++}	1.091	1	3.318	8.682	1.061
Na^+	0.329	0.301	1	2.616	0.320
K^+	0.126	0.115	0.382	1	0.122
NH_4^+	1.029	0.943	3.129	8.186	1

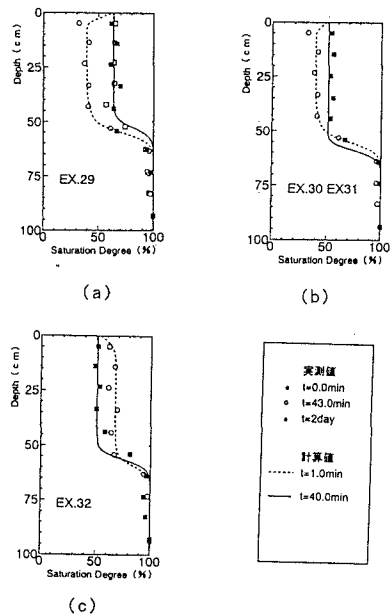


図-1 水分分布の時間変化

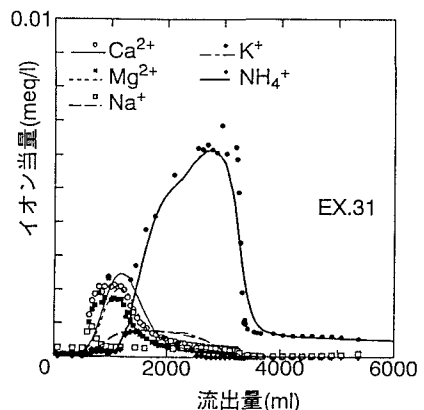


図-2 多成分破過曲線