

電気泳動・拡散モデルの解析解による検証

九州大学大学院農学研究院 正会員 中川啓 和田信一郎

1. はじめに

地下水・土壌汚染の浄化技術の一つに、通電による地下水・土壌の修復がある。これは、電極を土壌に設置して通電により起こる電気泳動と電気浸透を利用して汚染物質をそれぞれが帯電している電荷とは逆方向の電極に移動、濃縮させる技術である。本修復技術の現場適用にあたっては、事前に操作条件や最適な電極配置など数値計算によって十分に検討すべきである。著者らは、この電場土壌における汚染物質の移動モデルを作成することを目標として、溶液中での電気泳動と拡散を考慮した通電溶液中の物質輸送のモデル化を行い、化学種の挙動をシミュレーションした(中川ほか, 2000)。本研究では NaCl 点源瞬間注入の数値計算を実施して解析解との比較を行い、そのモデルの検証を行った。

2. 数値計算モデル

電気泳動と拡散のみを考慮した1次元電気泳動拡散方程式は；

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial(u_{ei}C_i)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(D_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + R_i \quad (1)$$

ここに、 C_i は濃度(mol/m³)、 D_i は拡散係数(m²/s)、 R_i は化学反応項(mol/(m³s))、 u_{ei} は電気泳動速度(m/s)で、次式で定義される；

$$u_{ei} = -v_i z_i F \frac{\partial \phi}{\partial y} \quad (2)$$

ここに、 v_i は移動度(m mol/(Ns))、 z_i は電荷、 F はファラデー定数(C/mol)、 ϕ は電位(V)である。なお添え字 i は、各化学種を意味する。電流密度の式は；

$$I = F \sum_{i=1}^N z_i \left(u_{ei} C_i - D_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) \quad (3)$$

ここに、 N は化学種の総数である。実際の(1)式の解析には、(4)式で示す保存量 k に対する輸送方程式((5)

式)を特性曲線法(初井, 1991)により解いた。

$$T_k = \sum_{i=1}^N \alpha_{ik} C_i \quad (4)$$

ここに、 α_{ik} はそれぞれの化学種 i の保存量 k に対する寄与を表す。 N は保存量の総数である。

$$\frac{\partial T_k}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \alpha_{ik} \frac{\partial}{\partial y} \left(u_{ei} C_i - D_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) = 0 \quad (5)$$

保存量的アプローチによる解法の詳細は Jacobs and Probstein(1996)を参照されたい。

3. 計算方法と計算条件

数値計算の手順は次のようにした。(1)濃度分布の初期値を与える。(2)電位分布の算定。(3)電気泳動速度の算定。(4)特性曲線法による濃度の算定。新しい時間ステップの濃度分布が分かれば(2)に戻って繰り返し、求める時間まで計算する。数値計算では、9.73 cmの領域に対し中心部に細かいメッシュを集める不等間格子を適用して(中心部の差分格子間隔は両端の1/20)、図1のような変数変換を行い等間隔領域に写像して解くように工夫した。両端の境界については、濃度勾配の無いように設定して、初期条件ではデルタ関数による注入は厳しいと考え、点源瞬間注入で解析解により3600 sまで計算して、それを初期の濃度分布として与えた。用いた解析解は次式である(Kinzelbach, 1990)。

$$C(y,t) = \frac{Q}{2\sqrt{\pi D(t-t_0)}} \exp \left[-\frac{(y-y_0)^2}{4D(t-t_0)} \right] \quad (6)$$

ここに、 Q : 単位面積あたりの注入強度(0.001 mol)、 t_0 : 注入時間(-3600 s)、 y_0 : 注入位置(4.735 cm)、 D : 拡散係数である。なお解析解に対する拡散係数 D は Jacobs(1995)にならい、次式を適用した。

$$D = D_{Na} \left(1 - \frac{D_{Na} - D_{Cl}}{D_{Na} + D_{Cl}} \right) = \frac{2D_{Na}D_{Cl}}{D_{Na} + D_{Cl}} \quad (7)$$

キーワード：電気泳動，拡散電位，数値計算

〒812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1 Tel & Fax 092-642-2845

表 1 数値計算に用いた諸定数

Species	Mobility (m mol/(Ns))	Diffusion Coefficient (m ² /s)
H+	3.756×10^{-12}	9.311×10^{-9}
OH-	2.127×10^{-12}	5.273×10^{-9}
Na+	5.379×10^{-13}	1.334×10^{-9}
Cl-	8.197×10^{-13}	2.032×10^{-9}

また、電位分布の解析解は拡散内部に対して次式で示される (Jacobs, 1995)。

$$\phi(y,t) = \frac{RT(D_{Na} - D_{Cl})(y - y_0)}{4FD(D_{Na} + D_{Cl})(t - t_0)} + K \quad (8)$$

ここに K は任意の定数で、 $K=0.0208$ を与えた。Na⁺ と Cl⁻ それぞれの保存量に対して輸送方程式である (5) 式を特性曲線法で解き、電気的中性条件と水の解離定数より H⁺、OH⁻ を代数的に算定した。電位分布は、電流密度の式から荷電収支を考慮してガウスの消去法により解いた。各化学種の移動度と拡散係数は表 1 に示す。

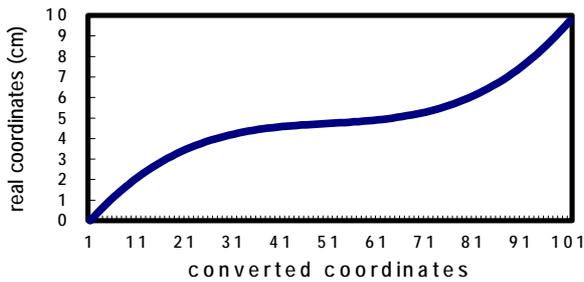


図 1 1次元座標変換

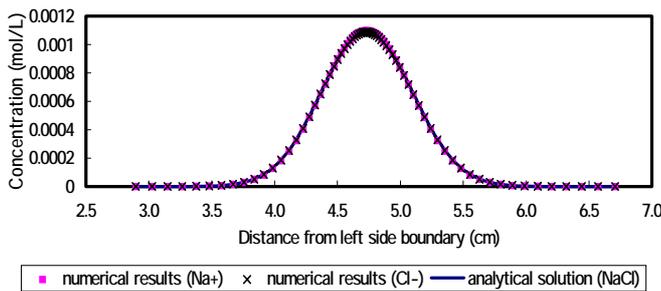


図 2 濃度分布の数値計算結果と解析解の比較

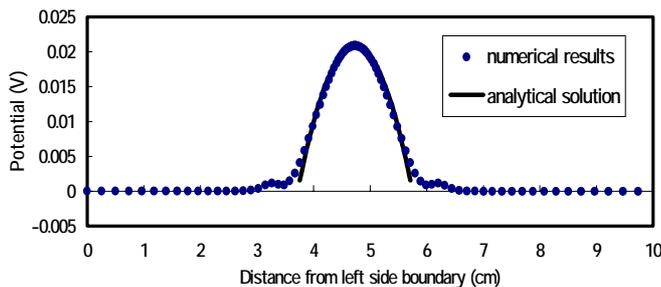


図 3 拡散電位の数値計算結果と解析解の比較

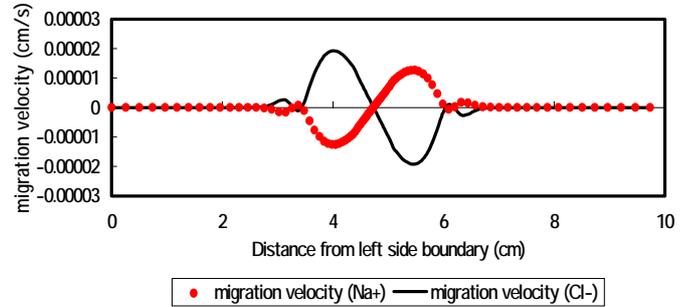


図 4 拡散電位による電気泳動速度

4. 結果

図 2 および図 3 に $t=500$ s の数値計算結果と解析解との比較を示す。濃度分布、電位分布ともに良好に一致している。図 4 には $t=500$ s の電気泳動速度の分布を示している。Cl⁻ が拡散内部に向かい移動していること、逆に Na⁺ が拡散の外側に向かって移動し拡散電位を形成する様子が明らかになった。

5. おわりに

本研究では、前報(中川ほか, 2000)で示したモデルの検証を行うため、NaCl の点源瞬間注入の数値計算を行い解析解と比較した。濃度分布、電位分布ともに良好に再現できた。また拡散電位の形成メカニズムを明らかにした。今後は土壌まで含めたモデルを完成し、室内実験との比較を行う予定である。

参考文献 ; Jacobs, R. A. (1995) PhD dissertation, Massachusetts Institute of Technology./ Jacobs, R. A. and Probstein R. F. (1996) AIChE Journal, Vol.42, No.6, pp.1685-1696./ Kinzelbach, W. [上田年比古監訳] (1990) パソコンによる地下水解析, 森北出版./ 中川・和田・龍(2000) 土木学会西部支部研究発表会講演概要集, pp.168-169./ 粕井和朗(1991) 地下水学会誌, 33(3), pp.177-184.