

粒子追跡法による物質移行解析法の2重空隙モデルへの適用

山下 亮*

2重空隙モデルでの地下水流れに伴う溶質の移流分散現象を粒子追跡法により解析する方法を提案した。1次元流れの単純なモデルを用いて有限要素法による解析結果との比較を行った結果、両者の結果は良く一致しており提案した手法の精度が確認された。また、原位置トレーサー試験のブレイクスルーカーブの解析を行い、本手法によって実測結果を良くシミュレートすることができることを示した。

Key Words : *underground water, fractured rock, solute transport, particle tracking method*

1. まえがき

放射性廃棄物の地層処分問題や化学物質による土壌汚染の問題は、環境問題への関心の高まりとともに大きくクローズアップされつつある。こうした問題においては、地盤中の地下水に溶け込んだ汚染物質が地下水の流れに伴って拡散することが懸念されており、それに対してどのような対策をたてるかが重要な検討課題となっている。したがって、地下水の動きや汚染物質の移行現象を予測するための方法を確立しておくことが必要であり、これまでも多くの実験的あるいは解析的研究がなされてきた。

地下水流れにともなう物質移行解析を行う場合、一般的に移流現象と分散現象を考慮した質量保存式が支配方程式として用いられる。通常、物質移行解析を行うということはこの支配式を与えられた初期条件、境界条件のもとで解くことを意味する。解析のための方法として(1)理論解、(2)有限要素法(FEM)あるいは差分法(FDM)、(3)粒子追跡法などがある。ここで、粒子追跡法という言葉は、多数の粒子を用いて移行現象を直接的にシミュレートする方法の総称的な意味で用いており、代表的な手法としてはランダムウォーク法などがある。この方法は流れとともに粒子を移動させることが基本的な考え方であるためにラグランジュ法とも呼ばれ、数値解析の手法としては解が安定であるといった長所がある。

一方、地盤中での地下水の動きとそれともなう物質(溶質)の移行現象は、地盤内の空隙の構造に大きく影響を受け、均質媒体での移流拡散とは異なった諸相を示すことが知られている。地下水中の物質移行問題について理解を深め、高い精度で予測を行うには地盤の特徴を

適切にモデル化することが重要である。本論文では、地盤モデルの1つである2重空隙モデルを取りあげ、このモデルについて粒子追跡法を用いた物質移行の解析を行うための方法と、解析例について述べる。

2. 既往の研究

地盤中の物質移行問題の解析法としては、さまざまな手法が研究され、発展してきた。その中で、理論解は最も厳密な解析結果を与えるものであると言えるが、適用範囲はかなり限定されたものとならざるを得ない。有限要素法などの空間的、時間的な離散化により近似解を得る方法は、今日最も多く利用されている方法であり、移流・分散以外の現象(溶質の吸着・脱着など)を考慮することが比較的容易であるといった多くの長所を有している。しかしながら、その一方で分散現象に比べて移流現象が卓越するような問題に対しては解が不安定になりやすく、そのため上流法やラグランジュ的方法を組み合わせるなどの工夫が試みられている¹⁾。粒子追跡法では、溶質を多くの粒子で表現し、それぞれの粒子の挙動にランダムな動きを与えることにより分散現象が表現される。一方、移流現象は粒子を流速場に応じて移動させることによりシミュレートされる。古市²⁾がまとめた結果によれば、支配方程式を空間的に離散化するオイラー的方法に比べると、数値拡散や解の安定条件に関して、ラグランジュ的方法は有利であるが、吸着現象を表現するための反応項の扱いなどでは不利であるとされている。

ところで、地盤中の地下水の流れをモデル化する場合、地盤を多孔質な連続体として近似することが多い。これは、解析が簡便になるためであるが、実際には地下水は地盤の空隙部分を一様に流れているのではなく、いわゆる「水みち」が形成されて空隙の一部を選択的に流れている場合が多いと考えられている。地下水の流れに関与

*正会員 (株)間組 技術研究所 研究第1部
(〒305 茨城県つくば市刈間字西向515-1)

しない空隙部分は、水分の貯留機能のみを有することになるが、非定常流れの問題においては無視することができない。したがって、地下水の流れに関与する空隙（1次空隙系）と貯留のみに関与する空隙（2次空隙系）を分けて考えることが、地盤中の地下水流れをより正確にモデル化するために必要となる。これは、地盤中の物質移行問題においても同様であって、貯留に関わる空隙と地下水流れに関わる空隙の間で拡散による溶質の移行が生じると考えられるため、地盤の空隙系を2つに分けて物質の移行を考える必要がある。2重空隙モデルは、このような地盤の空隙系についての捉え方から生まれてきた考え方であって、石油工学、土木工学の分野において実用上重要なモデル化手法となっている。

2重空隙モデルという言葉は広義には、地盤の空隙系を1次空隙系と2次空隙系に分けてモデル化するすべてのモデルが含まれると考えられる。例えば、Huyakornら³⁾は等価連続体の考え方を採らず、1次空隙系を球で表わすなどして空隙の幾何学的な構造をある程度明確にした形でモデル化を行っている。また、筆者⁴⁾やLeeら⁵⁾はネットワークモデルをベースに2重空隙系のメカニズムを考慮した解析を試みている。これに対して、狭義にはBarenblatt⁶⁾らによるoverlapping modelだけを2重空隙モデルと呼ぶこともある。このoverlapping modelは、地盤の空隙を地下水の貯留に関わる1次空隙系と流動に関わる2次空隙系のそれぞれを等価な連続体で置き換え、それらが重なりあって(overlap)いるとするものである。物質移行問題では、1次系と2次系の間で濃度差による溶質の拡散移行が生じると仮定され、2つの空隙系間の相互作用が考慮される。定式化が比較的簡便にできることから広く用いられており、例えば大西ら⁷⁾はこのモデルについて浸透問題と力学問題とのカップリング解析を行うことのできる有限要素法の解析コードを開発している。本論文では2重空隙モデルという言葉を用いることとする。

さて、2重空隙モデルによる過去の研究事例は、筆者の知る限りすべてFEMまたはFDMにより行われている。これは、2重空隙モデルの支配式に対して、通常のFEM(FDM)の移流分散コードをそれほど大幅な変更を行わずに適用することができるためであると考えられる。

一方、粒子追跡法は移流と拡散のみを考慮した問題や移流・拡散に加えて崩壊連鎖を考慮した核種移行問題への適用が試みられている^{8),9)}。しかし、移流・拡散以外の移行メカニズムである非平衡な収着現象や2重空隙系での漏出効果などを考慮することは試みられて来なかった。

本論文では、ランダムウォーク法を拡張した方法として、2重空隙モデルに適用することのできる数値解析法

を提案する。地盤の2重空隙性を考慮することが望ましいような移流拡散問題に対してランダムウォーク法(ラグランジュ的方法)に基礎をおく手法であるため常に数値振動のない安定した解析を行うことが可能となる。このことは、特に地盤中の流速分布の空間的変動が大きく、オイラー的解析方法では解が不安定になりやすい場合に重要なことと考えられる。

3. 数値解析法

簡単のために1次元の場合について説明を加える。物質(溶質)の固相への収着現象については、1次空隙系、2次空隙系のそれぞれにおいて固相と液相との間で常に平衡状態が成立していると仮定し、その効果を遅延係数で表わすこととする¹⁰⁾。また、初期条件として溶質は2次空隙系にのみ存在している場合について考える。

(1) 支配方程式

定常流れ場での2次空隙系についての溶質の移流分散方程式は式(1)のように書ける。

$$R_{f2}\phi_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} = D_f \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_2}{\partial x} - \Gamma \dots \dots \dots (1)$$

ここで、 c_2 は2次空隙系での溶質の濃度、 D_f は地盤中での分散係数、 ϕ_2 は2次空隙系の空隙率、 R_{f2} は2次空隙系での遅延係数、 v はダルシー流速である。また、 Γ は2次空隙系から1次空隙系への物質の拡散漏出を表す項であり、2次空隙系と1次空隙系の物質の濃度差に比例するとして次式により与えられる。

$$\Gamma = k(c_2 - c_1) \dots \dots \dots (2)$$

ここで、 c_1 は1次空隙系の濃度であり、 k は分子拡散係数や地盤の空隙系の幾何学的構造などによって決まる比例定数である。一方、1次空隙系での質量保存式は次のようになる。

$$R_{f1}\phi_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \Gamma \dots \dots \dots (3)$$

ここで、 ϕ_1 は1次空隙系の空隙率、 R_{f1} は1次空隙系での遅延係数である。式(1)~式(3)が、2重空隙モデルにおける支配式であり、粒子追跡法ではこれらを満たすように粒子を移動させて計算を進めることになる。

(2) 粒子追跡法による解析手順

ランダムウォークモデルでは、微小時間毎にそれぞれの粒子を追跡して行くことになる。以下の説明では計算の上で粒子を追跡して行くステップ*i*での時刻と注目している粒子の位置を(t_i, x_i)などと表現することにする。2重空隙系においては各粒子が1次空隙系に存在する場合と2次空隙系に存在する場合に分けて考える必要がある。以下の説明の参考のために粒子の動きを模式的に表したものをFig.1に示す。

溶質の初期条件として2次空隙系への生成を仮定して

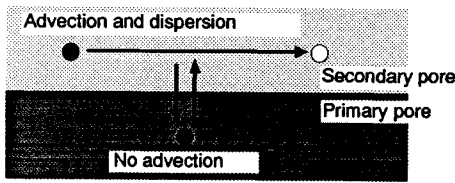


Fig.1 Schematic figure of particle tracking technique.

いるのですべての粒子は2次空隙系からスタートすることになる。粒子が2次空隙系に存在することを前提にすると、この粒子を支配する方程式は支配式(1)における Γ に含まれている1次空隙系からの拡散による生成項を取り除いた次式となる。

$$R_{f2}\phi_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} = D_f \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_2}{\partial x} - kc_2 \dots (4)$$

ここで、上式に対して次式のような形の解を考える。

$$c_2 = c'_2 p_2(t) \dots (5)$$

ここで、 $p_2(t)$ は時間のみの関数であり次式で与えられる。

$$p_2(t) = \exp\left(-\frac{k}{R_{f2}\phi_2} t\right) \dots (6)$$

式(5)、式(6)を、式(4)に代入すると次式が成立する。

$$R_{f2}\phi_2 \frac{\partial c'_2}{\partial t} = D_f \frac{\partial^2 c'_2}{\partial x^2} - v \frac{\partial c'_2}{\partial x} \dots (7)$$

これは、1次空隙系への漏出項を取り除いた多孔質媒体に対して一般に用いられる移流分散方程式であり、従来より用いられてきたランダムウォークの手法を適用することが可能である。通常、ランダムウォークを用いる手法は中心極限定理にもとづいており、プログラムの中で発生させた一様乱数をそのまま用いて粒子を移動させて拡散挙動をシミュレートすることが多いが、ここでは瞬時生成(Impulse Release)の条件での式(7)の解析解を粒子の空間分布に関する確率密度関数とみなして粒子の位置を決定する方法を用いることにする。1つの粒子の動きをシミュレートするために単位質量の溶質が $x=x_i$ において瞬時に地下水に注入された場合、すなわち次の初期条件、境界条件を考慮する。

$$c'_2 = \delta(x - x_i) \quad (t=0) \dots (8)$$

$$c'_2 = 0 \quad (x = \pm\infty, t > 0) \dots (9)$$

ここで、 $\delta(x)$ はディラックのデルタ関数である。これらの条件に対する式(7)の解を求めると次のようになる。

$$c'_2 = \frac{\sqrt{R_{f2}\phi_2}}{2\sqrt{\pi D_f \Delta t}} \exp\left\{-\frac{(x-x_i - v\Delta t/R_{f2}\phi_2)^2}{4D_f \Delta t/R_{f2}\phi_2}\right\} \dots (10)$$

ここで、 Δt は計算におけるの1つの微小な時間ステップの幅である。上式の解析解は $t=t+\Delta t$ における粒子の位置の確率密度関数とみなすことができる。考えてい

る粒子が Δt だけ時間が経過した後どこに存在するかを0から1の一様乱数 $[R]_0$ を用いて次のように決定することができる。

$$\int_{-\infty}^x \tilde{c}_2 dx = [R]_0 \dots (11)$$

ここで、 x' が1次空隙系への漏出を考慮しない場合の $t=t_i+\Delta t$ における粒子の位置であるが、漏出項 Γ を考慮するためにはさらに次のような処理が必要となる。

式(5)から Δt の時間の間に c_2 は c'_2 に比べて $p_2(\Delta t)$ 倍に小さくなっていると考えられる。このことは、単位質量の溶質のうち $1-p_2(\Delta t)$ の部分は1次空隙系へと拡散により移行したものと解釈できる。ランダムウォーク手法のような直接シミュレーション法では粒子が最小の単位であり、1つの粒子を分割して1次空隙系と2次空隙系にわけることができない。そこで、追跡している粒子が1次空隙系に存在するか2次空隙系に存在するかを存在確率にしたがって決めればよい。ここで、 $p_2(\Delta t)$ は、 $t=t_i+\Delta t$ においても粒子が2次空隙系に残っている確率であると考えることができ、0から1までの乱数を $[R]_0$ と表すと以下のように場合分けをして粒子を追跡して行くことができる。

(i) $[R]_0 \leq p_2(\Delta t)$ の場合

粒子は2次空隙系にとどまっており、 $i+1$ 番目のステップでの時刻および粒子の位置は次のように表される。

$$x_{i+1} = x' \dots (12)$$

$$t_{i+1} = t_i + \Delta t \dots (13)$$

(ii) $[R]_0 > p_2(\Delta t)$ の場合

時刻 $t=t_i$ において2次空隙系に存在した粒子は Δt の時間が経過しない内に1次空隙系に移行したと解釈される。この場合、粒子がいつ、どこで1次空隙系に移行したかを求める必要がある。まず時刻 $t=t_i+\Delta t'$ において1次空隙系に移行したとすると場合分けに用いた乱数の値 $[R]_0$ を用い、次式を満たすように $\Delta t'$ を決めればよい。

$$[R]_0 = p_2(\Delta t') \dots (14)$$

時刻 $t=t_i$ より時刻 $t=t_i+\Delta t'$ の間に粒子は2次空隙中を次式で表される見かけ速度 \bar{v} で移動したとみなすことができる。

$$\bar{v} = \frac{x' - x_i}{\Delta t} \dots (15)$$

この見かけの粒子速度を用いると、 (t_{i+1}, x_{i+1}) は次のように与えられる。

$$t_{i+1} = t_i + \Delta t' \dots (16)$$

$$x_{i+1} = x_i + \bar{v}\Delta t' \dots (17)$$

注目している粒子は時刻 $t=t_{i+1}$ 以後、ある一定時間の間は、1次空隙中に存在することになり、この粒子の挙動を支配する方程式は式(3)より2次空隙系から1

次空隙系への拡散漏出の項を除いた式と考えることができる。

$$R_{f1}\phi_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = -kc_1 \dots\dots\dots (18)$$

時刻 $t=t_{i+1}$ において粒子が1次空隙系へ移行後の挙動を追跡するために $t=t_{i+1}$ において $c_1=1$ とした条件下で上式を解くと次のようになる。

$$c_1 = \exp\left\{-\frac{k}{R_{f1}\phi_1}(t-t_{i+1})\right\} \quad (t \geq t_{i+1}) \dots\dots\dots (19)$$

この式は時間とともに溶質が2次空隙系へと逆拡散することにより1次空隙系の濃度が単調に減衰してゆくことを表している。上述した2次空隙系から1次空隙系への粒子の移行をシミュレートする手順と同様に1次空隙系から2次空隙系への粒子の移行をシミュレートすれば良い。粒子が1次空隙系内に滞留している時間を $\Delta t''$ とすると一様乱数 $[R]_0^*$ を利用して次式によりこれを決定することができる。

$$[R]_0^* = \exp\left(-\frac{k}{R_{f1}\phi_1}\Delta t''\right) \dots\dots\dots (20)$$

したがって、 $i+2$ 番目のステップでの注目している粒子についての情報は次のように与えられる。

$$t_{i+2} = t_{i+1} + \Delta t'' \dots\dots\dots (21)$$

$$x_{i+2} = x_{i+1} \dots\dots\dots (22)$$

ただし、式(21)で得られる時刻 t_{i+2} の直後においては、粒子は2次空隙系に存在することになる。

以上のような手順を繰り返してゆくことによって2重空隙系での粒子の移行を追跡することが可能であり、濃度分布や破過曲線 (breakthrough curve) は、空間と時間についてのグリッドを設定し、それぞれのグリッド内にいくつの粒子が存在するかをカウントすることにより求めることができる。

粒子追跡法による移流分散解析では、濃度固定境界などの境界条件を厳密に取り扱うことが困難である。しかし、実際の問題に対応させるためには境界条件として物質流束を与えたり、領域内部で生成項を考慮することが適切な場合が多い。粒子追跡法では、単位時間当たりに境界を通過した粒子の数をカウントすることにより物質流束を算定する事ができるため、実用的に困難を来すことはないと考えられる。

さて、これまでは1次元の移流分散問題について説明を加えてきたが、2次元あるいは3次元の問題でも同様の取り扱いをすることが可能である。ここでは、2次元の場合について説明する。支配方程式は式(1)の代わりに、分散係数テンソル D_{ij} 、流速ベクトル v_i を用いて次式で表される。

$$R_{f2}\phi_2 \frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} D_{ij} \frac{\partial c_2}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} (c_2 v_i) - \Gamma \dots\dots\dots (23)$$

分散係数テンソルとして次に示すような J. Bear の提

案式¹¹⁾を用いることとする。

$$D_{ij} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{|v|} + \alpha_T |v| \delta_{ij} + \tau D_d \delta_{ij} \dots\dots\dots (24)$$

ただし、 $\alpha_L, \alpha_T, \tau, D_d, \delta_{ij}$ は、それぞれ縦方向分散長、横方向分散長、屈曲度 (tortuosity)、分子拡散係数、クロネッカーのデルタである。1次元問題の場合と同様にまず漏出項のない場合を考え、さらに流れに沿って移動するラグランジェ座標系 ($\xi-\eta$ 座標系) で上記支配式を書き直す。このとき、 ξ が流れ線の方向に一致するように座標系をとるものとする。上式の分散係数テンソルの主軸は、このラグランジェ座標系の軸と一致するため、分散係数テンソルの固有値を D_{fL} 、 D_{fT} とすると支配式は次のようになる。

$$R_{f2}\phi_2 \frac{\partial \tilde{c}_2}{\partial t} = D_{fL} \frac{\partial^2 \tilde{c}_2}{\partial \xi^2} + D_{fT} \frac{\partial^2 \tilde{c}_2}{\partial \eta^2} \dots\dots\dots (25)$$

式(25)について、1次元問題の場合と同様に $(\xi, \eta) = (0, 0)$ における単位質量の溶質の瞬時生成を考慮すると、その解析解は次の様になる。

$$\tilde{c}_2 = \frac{R_{f2}\phi_2}{2\pi\Delta t\sqrt{D_{fL}D_{fT}}} \exp\left\{-\frac{R_{f2}\phi_2(D_{fT}\xi^2 + D_{fL}\eta^2)}{4D_{fL}D_{fT}\Delta t}\right\} \dots\dots\dots (26)$$

2次元問題では、粒子追跡の過程においてこの式を1次元問題における式(10)の代わりとして用いれば良く、粒子の次ステップでの位置を決める式(11)の代わりに次の2つの式を用いてラグランジェ座標系での位置 (ξ, η) を決定すれば良い。

$$\int_{-\infty}^{\xi} \int_{-\infty}^{\eta} \tilde{c}_2 d\eta d\xi = [R_1]_0^* \dots\dots\dots (27)$$

$$\int_{-\infty}^{\eta} \int_{-\infty}^{\xi} \tilde{c}_2 d\xi d\eta = [R_2]_0^* \dots\dots\dots (28)$$

ただし、 $[R_1]_0^*$ 、 $[R_2]_0^*$ は、一様乱数である。また、ラグランジェ座標系で求められた粒子の位置は、最終的にはオイラー座標系へ変換する必要がある。2次元問題(あるいは3次元問題)においては分散挙動の取扱いが異なるだけであり、粒子の1次空隙系と2次空隙系の間での移行挙動に関しては1次元問題と全く同様に扱えば良く、1次元の解析プログラムを2次元あるいは3次元問題に対応できるように改良することは容易である。

4. 数値解析法の確認

(1) 有限要素法による解析法

本論文で提案している数値解析法の確認を行うために単純なモデルを用いて有限要素法による解析結果との比較を行った。有限要素法による2重空隙系での物質移行の解析は次のような方法で行った。

まず、1次空隙系の濃度 c_1 についての支配式を時間に関して離散化する。

$$R_{f1}\phi_1 \frac{(c_1^{n+1}) - c_1^{(n)}}{\Delta t} = kc_2 - k\{\theta c_1^{(n+1)} + (1-\theta)c_1^{(n)}\}$$

.....(29)

ここで、 Δt は、時間ステップ（ただし、粒子追跡法での時間ステップとは同じである必要はない）、 θ は、時間についての離散化のためのパラメータである。また、肩字を付けてある記号は時間について離散化した値を表し、例えば $c_1^{(n+1)}$ は $n+1$ 番目の時間ステップでの濃度を表すものとしている。この式を変形して次式を得ることができる。

$$R_{f1}\phi_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \gamma_1 c_2 + \gamma_2 c_1^{(n)} (= \Gamma) \dots\dots\dots(30)$$

$$\gamma_1 = \frac{kR_{f1}\phi_1}{R_{f1}\phi_1 + \theta k \Delta t} \dots\dots\dots(31)$$

$$\gamma_2 = -\frac{kR_{f1}\phi_1}{R_{f1}\phi_1 + \theta k \Delta t} \dots\dots\dots(32)$$

式(30)により1次空隙系と2次空隙系の相互作用の項 Γ が、2次空隙系の濃度 c_2 と $c_1^{(n)}$ によって表現され、これを式(1)に代入することにより $c_1^{(n)}$ は既知であるから2次空隙系の濃度 c_2 のみを未知変数とすることができる。その後、支配式(1)を有限要素法を用いて解くことにより時間ステップ $n+1$ での2次空隙系の濃度 $c_2^{(n+1)}$ が求められる。次に $c_2^{(n+1)}$ を式(29)に代入することによって時間ステップ $n+1$ での1次空隙系の濃度 $c_1^{(n+1)}$ を計算することができる。

支配式の空間に関する離散化は、通常の有限要素法での離散化と同様でありガラーキン法により行った。要素としては1次元の線形の補間関数を用いた要素を用いた。また、 θ の値としては移流分散問題を有限要素法や有限差分法を用いて解く際に最もよく用いられている0.5(クランクニコルソン法)を採用した。

(2) モデルによる解析結果の比較

計算結果の比較のために用いるモデルとして、1次元のモデルを用いた。このモデルの軸に垂直な断面は、単位面積の広さを有するものとする。Fig.2は、有限要素解析に用いた要素分割を示しており、1次元要素の1つの長さは1mとなっている。粒子追跡法での濃度の算定においては、有限要素解析の場合と同じ粗さのメッシュを用い、各要素に含まれる粒子数を数えて濃度値に換算した。境界条件および初期条件を次のように設定した。

$$c_2(x) = \delta(x) \quad (t=0) \dots\dots\dots(33)$$

$$c_1 = 0 \quad (t=0) \dots\dots\dots(34)$$

$$c_2 = 0 \quad (x = \pm 25, t > 0) \dots\dots\dots(35)$$

ここで、 $\delta(x)$ はディラックのデルタ関数であり初期状態($t=0$)において $x=0$ に単位質量の溶質が2次空隙系に存在している(あるいは瞬間注入された)ことを表している。

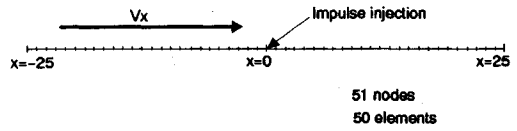


Fig.2 One dimensional FEM grids.

Table 1 Parameters used in the calculations

Parameter	RUN-1	RUN-2	RUN-3	RUN-4
v	0.4	0.4	0.7	0.7
D_f	0.1	0.1	0.1	0.1
k	0.3	0.3	0.5	0.5
ϕ_1	0.1	0.1	0.1	0.1
ϕ_2	0.1	0.1	0.1	0.1
R_{f1}	20	20	10	10
R_{f2}	15	35	20	60

解析はパラメータの値を変化させて複数のケースについて実施した。各ケースで用いたパラメータの値をTable 1に示す。

これらのケースのうち、RUN-1~RUN-2では、流速 v および漏出項を制御する係数 k を小さめとし、RUN-3~RUN-4では大きめとしている。また、RUN-1とRUN-2、RUN-3とRUN-4のそれぞれの組では遅延係数 R_{f1} と R_{f2} の比を変えたケースとしている。遅延係数 R_{f2} が R_{f1} に比べ大きめの場合では1次空隙系に漏出した溶質は、そこで固相に収着しやすいため再び2次空隙系のもどって来にくい場合を表わしている。

粒子追跡法の計算で用いた粒子の総数は、いずれのケースにおいてもおおむね計算結果が安定する粒子数として5000とした。また、有限要素法での時間積分ステップは、1secとした。これらのケースについて、ある時間ステップ($t=20$ sec)で濃度分布を比較した図をFig.3からFig.6に示す。ここでは、1次空隙系および2次空隙系を問わず単位体積(1次元モデルの単位長さあたり)に含まれる溶質の総質量($=R_{f1}\phi_1 c_1 + R_{f2}\phi_2 c_2$)として濃度を算定している。

図に示すように、2つの解析手法から得られた結果はパラメータを変化させたすべてのケースにおいて良く一致した濃度分布を示している。

有限要素法の解析結果では濃度分布のピーク値が若干低めとなる傾向があるが、この原因としては有限要素法での空間の離散化において数値拡散等の誤差が生じていることが考えられる。

また、Fig.6では有限要素法の結果において濃度のピークの上流側で数値振動のために負の濃度値が表れており、パラメータの条件によっては安定した結果が得られないことがわかる。しかしながら、多くのパラメータ

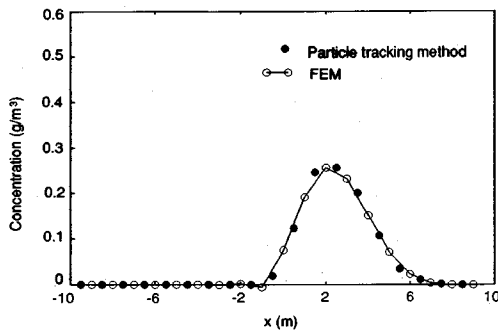


Fig.3 Comparison between particle tracking method and finite element method (RUN-1).

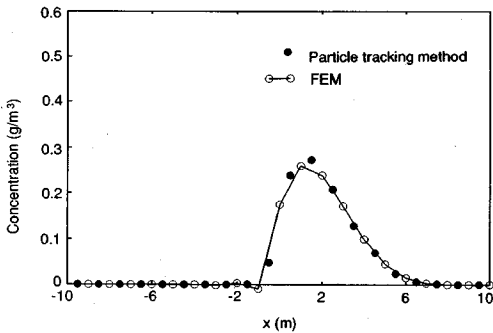


Fig.4 Comparison between particle tracking method and finite element method (RUN-2).

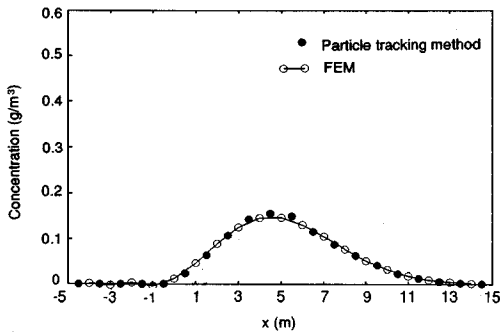


Fig.5 Comparison between particle tracking method and finite element method (RUN-3).

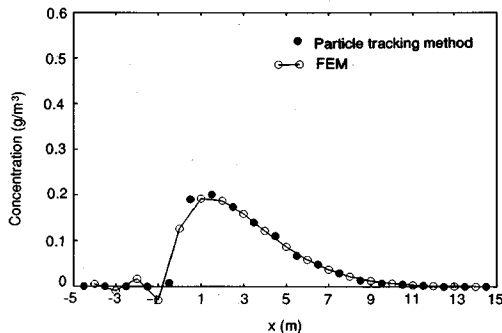


Fig.6 Comparison between particle tracking method and finite element method (RUN-4).

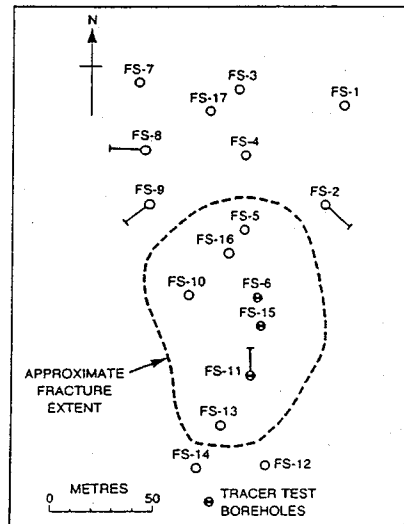


Fig.7 Borehole layout and approximate extent of fracture (after Raven¹²⁾)

の組に対して2つの解析法の結果が良く一致していることから本論文で提案している粒子追跡法が正しい数値解を与えることが確認されたと考えられる。

5. 解析例

(1) 原位置試験の概要

解析例として、Raven らの実施した原位置トレーサー試験結果¹²⁾について本論文で提案している手法を適用した結果について述べる。原位置試験は、AECL (Atomic Energy of Canada Ltd.) のCRNLサイト (Chalk River Nuclear Laboratories) の敷地内に削孔された数本のボーリング孔を用いて実施された。サイトは斑岩、ペグマタイト、閃緑岩を含む片麻岩が分布している。試験サイトのボーリング孔の配置を Fig.7 に示す。ボーリングコア等の観察結果をもとに破碎帯が深度 20~35 m 程度で、同図の点線の範囲にほぼ水平に広がっていると推定され、この破碎帯を移行経路としてトレーサー試験が行われた。トレーサー試験の概要をまとめたものを Table 2 に示す。これらの試験のうち、TEST-3 だけが FS-15 での揚水による放射状の流れ場を用いている。TEST-3 以外の試験では、2本のボーリング孔の間で水を循環させた流れ場での試験を行っている。トレーサーとしては、TEST-2 を除く試験では半減期の短い放射性物質⁸²Br が用いられ、濃度の測定は主として揚水ボーリング孔内に設置されたγカウンターにより行われた。

(2) 解析結果

解析では、2次元な流れ場についての十分なデータや解析結果がないため1次元モデルを用いた。測定値は相対的な値であることもあり、ここでは濃度の絶対値で

Table 2 Summary of tracer test conditions (after Raven¹²⁾)

Test	Tracer	Test Boreholes			Flow Field	Borehole Spacing m	Flow Rate L/hour
		Injection	Withdrawal				
1	⁸² Br	FS-6	FS-15		dipole	12.7	30.0
2	Na Fluorescein	FS-15	FS-6		dipole	12.7	32.0
3	⁸² Br	FS-6	FS-15		radial	12.7	14.0
4	⁸² Br	FS-6	FS-15		dipole	12.7	36.6
5	⁸² Br	FS-6	FS-11		dipole	29.8	36.6

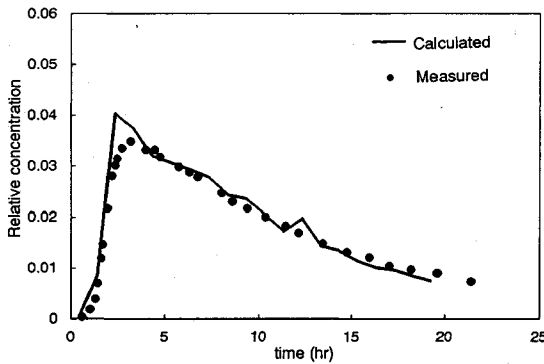


Fig.8 Measured and calculated breakthrough curves from Test-1.

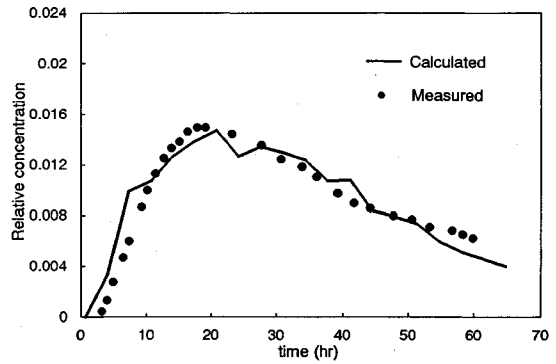


Fig.10 Measured and calculated breakthrough curves from Test-3.

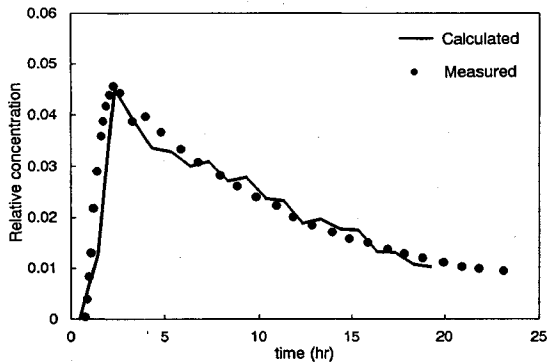


Fig.9 Measured and calculated breakthrough curves from Test-2.

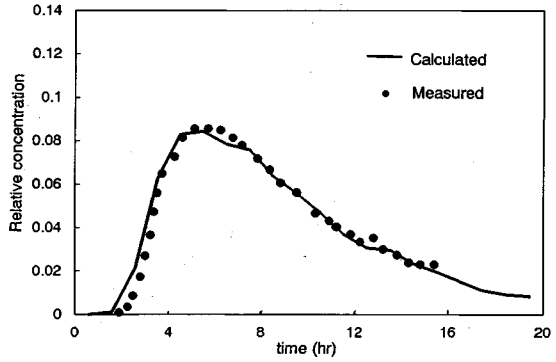


Fig.11 Measured and calculated breakthrough curves from Test-4

はなく破過曲線の形を2重空隙モデルに基づいた解析手法で精度良く再現できるかに焦点をあてて、フィッティングを行った。

実測結果へのフィッティングは、まず破過曲線のピークとなる時刻が一致するように地下水流速を決め、その後分散係数、空隙率、1次空隙系と2次空隙系の相互作用項の係数の値を設定した。なお、実測値としては放射性物質の崩壊や揚水した地下水の再注入の影響を除去した結果を用いている。

本論文で提案する解析法を用いて、実測された破過曲線を再現することを試みた結果をFig.8~Fig.12に示す。なお、これらの図においては縦軸に濃度の相対値をとっており、その値自体は特に意味を持たない。パラメー

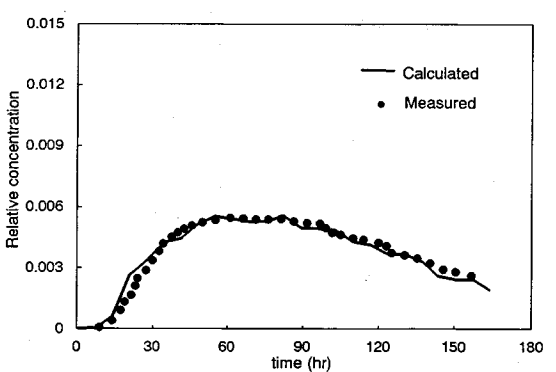


Fig.12 Measured and calculated breakthrough curves from Test-5.

Table 3 Best fit parameters for tracer tests.

TEST No.	$v(m/sec)$	$D_f(m^2/sec)$	$k(/sec)$	$\alpha_L(m)$	ϕ_1
TEST-1	0.24E-3	1.1E-4	0.40E-4	0.46	0.45
TEST-2	0.25E-3	1.1E-4	0.45E-4	0.44	0.55
TEST-3	0.85E-4	0.3E-4	0.23E-4	0.35	0.65
TEST-4	0.15E-3	0.9E-4	0.22E-4	0.60	0.16
TEST-5	0.70E-4	2.5E-5	0.10E-4	0.36	0.65

*) $\alpha_L = D_f/v$

タの調整においては、非附着性のトレーサーであることから遅延係数を1.0とするとともに2重空隙系の空隙率を0.2に固定し、その他のパラメータを変化させた。また、Table 3に最も適切に実測結果を再現することのできたパラメータの一覧を示す。

いずれの図においても、計算結果は実測結果を良く再現することができている。計算に用いたパラメータの値は試験毎に異なったものとなっているが、これは地盤の不均質性に起因する流動経路周辺の空隙構造の差異を反映したものにとらえるべきと考えられる。ただし、TEST-1とTEST-2については流れの向きが逆であるが、同じ2本のボーリング孔を用いた注入-揚水型(injection-withdrawal)の試験であることからフィッティングパラメータがかなり近い値となっている。

また、実測された破過曲線においてテール部が長くなる現象は、原位置トレーサー試験結果にしばしば見られる現象であり、地下水の流路となっている空隙系からマイクロクラックを含む貯留に関わる空隙系への拡散漏出と逆拡散に起因するものと考えられる。この解析の過程においても、濃度がピークとなる時刻はほぼ流速により規定されるが、破過曲線のテール部の形状は1重空隙系の空隙率ならびに漏出項を制御するパラメータ k により大きく変化することが確認された。このような現象は、単純な移流分散モデルでは精度良く再現することは困難であり、2重空隙系を考慮したモデルを用いることは、妥当であると判断される。

CRNLサイトでの試験結果が、本論文で提案する手法を用いて精度良く再現できていることから、原位置トレーサー試験の解析を行う上でこの手法が有効な手法の1つであると考えられる。ここで、実測結果の再現性が良好であった理由としては、2重空隙モデルが本サイトの地盤をモデル化するためのモデルとして適切であったということが重要であるが、急激な濃度の立ち上がりを示す破過曲線に対しても粒子追跡法により安定な計算結果が得られたことも一因としてあげられる。

本論文の主眼が数値解析手法の開発についてのものであるため、ここでは破過曲線の形のフィッティングを行った結果について述べているだけであり、浸透流解析を実施して総合的に実測結果との調整を行った上での解析結果を示したのではない。フィッティングパラメー

タがTESTにより異なってくることを考えると地盤中の地下水流れや物質移行特性について理解を深めるためには、今後2次元あるいは3次元での地盤の不均質さを考慮した浸透流解析ならびに物質移行解析を行う必要があると考えられる。粒子追跡法は、ペクレ数が場所によって変化するような不均質な流れ場において、特にその威力を発揮する解析手法であり、亀裂を含む岩盤での物質移行問題に適用することが期待できると思われる。

6. まとめ

2重空隙モデルによりモデル化された地盤中での地下水流れに伴う物質(溶質)の移流分散現象を粒子追跡法により解析する方法を示した。提案した解析手法の確認として、1次元流れの単純なモデルを用いていくつかのパラメータの組について有限要素法による解析結果と比較を行った。その結果、両者の結果は良く一致しており粒子追跡法により2重空隙モデル上での物質移行解析が可能であることがわかった。さらに、原位置試験の結果得られているトレーサのブレイクスルーカーブを計算により再現可能かどうかについて検討を行った。本手法による計算結果は、単純な移流分散モデルでは再現することが困難であると考えられるような実測結果を良く再現することができ、本手法の有効性を確かめることができた。

粒子追跡法にもとづいた手法の一般的な特長は、有限要素法や差分法の計算を行う際には注意せねばならないペクレ数やクーラン数に関係なく安定した解を得ることができることである。2次元問題あるいは3次元問題へ本手法を拡張することについては、本論文では基本的な方法(計算手順)しか述べていないが、チャンネルリング現象で代表されるような不均質な流れ場での解析を行う場合には、解の安定な粒子追跡法をベースとした本手法は有用性が高いことが期待できる。

本論文では、手法の基本的な計算手順について述べることに重きを置いており、解析例としては単純な1次元流れ場での結果しか示していないが、今後の課題として計算プログラムを2次元以上の問題に適用できるよう改良してゆく必要がある。さらに、2次元あるいは3次元の詳細な地質情報が得られているような原位置トレーサー試験データを用いて、本手法の適用性ならびに他の手法と比較したときの長所・短所について検討してゆきたいと考えている。

参考文献

- 1) Neuman, S.P. : Adaptive Eulerian-Lagrangian finite element method for advection-dispersion, Int.J. for Numer. Methods in Eng., Vol.20, pp.321~337, 1984.
- 2) 古市 徹 : 環境移流拡散現象の解析手法と数値シミュレーションに関する研究, 京都大学学位論文, p.16, 1984.

-
- 3) Huyakorn, P.S., Lester, B.H. and Mercer, J.W. : An efficient finite element technique for modeling transport in fractured porous media, *Water Resource Research*, Vol.19, No.3, pp.841-854, 1983.
- 4) 山下 亮・木村英雄：亀裂ネットワークにおけるマトリックス拡散を考慮した物質移行解析，土木学会論文報告集，第412号，pp.69-77，1989.
- 5) Lee, H.S., Moreno, L. and Neretnieks I. : Some properties of a channel network model, *Validation of Geosphere Flow and Transport Models (GEOVAL)*, OECD, Paris, 1991.
- 6) Barenblatt, G.I., Zheltov, I.P. and Kochika, I.N. : Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rock (strata), *PMM*, Vol.24, 852, pp.1286-1303, 1960.
- 7) 大西有三・小林 晃・塩田卓央：二重空隙モデルを用いた地盤挙動に関する考察，土木学会論文報告集，第394号，pp.61-70，1988.
- 8) Washburn, J.F., et al. : Multicomponent mass transport model ; A model for simulating migration of radionuclides in ground water, PNL-3179, 1980.
- 9) Kimura, H. and Muraoka, S. : Numerical model of radionuclide migration in geologic media, *J. Nucl. Sci. Technol.*, Vol.20, No.6, pp.503-510, 1983.
- 10) Bear, J. and Bachmat, Y. : *Introduction to Modeling of Transport Phenomena in Porous Media*, Kluwer Academic Publishers, p.407, 1990.
- 11) Bear, J. : *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Elsevier Science, New York, 1982.
- 12) Raven, K.G., Novakowski, K.S. and Lapcevic, P.A. : Interpretation of Field Tracer Tests of a Single Fracture Using a Transient Solute Storage Model, *Water Resources Research*, Vol 24, No.12, pp.2019-2032, 1988. (1992. 11. 2 受付)
-

A DIRECT SIMULATION METHOD FOR SOLUTE TRANSPORT THROUGH DOUBLE POROSITY MEDIA

Ryo YAMASHITA

A particle tracking method is presented which is developed to simulate solute transport in fractured media modeled with overlapping double porosity model. In order to compare some numerical results by the proposed method with results by finite element method, it is confirmed that the proposed method gives reliable and stable solutions in analysing advection-dispersion problems.

The proposed method was applied to some results from in-situ tracer experiments. The measured tracer breakthrough curves were simulated very well by the particle tracking method, which proved that it is useful in analysing measured results from in-situ tracer experiments.
