

# FADE による数値解析と重金属吸着系カラム試験との比較検討

筑波大学 正会員 羽田野 祐子  
筑波大学 学生会員 ○田畑 浩平

## 1. 目的

現在日本を始め世界の様々な国や地域で重金属に依る地下水の汚染が報告されている。十分な浄化装置を持っていない地域では、直接住人の健康に被害を及ぼしており、装置を保有していたとしても知らない間に重金属が地下水中を移動し、汚染が拡大する可能性がおおいにある。目に見えない物が見えない部分を移動し拡散するので、その拡散の予想や予防といった対策は非常に重要な課題である。今回の研究では、この重金属の地下水中の挙動を、より現実に即して把握することの出来る支配方程式を構築し、モデルとして行った吸着系カラム試験のデータとのフィッティングを行った。これまでの ADE と言われる古典的な移流分散方程式では、短期的な挙動は表せても、長期的な挙動予想となると実際の挙動からずれてしまいうまく表すことができなかった。そこで、よりよい精度で表せると思われる FADE、非整数階微分を含む移流分散方程式でフィッティングを行い、その実用性に関して考察することを本研究の目的としている。

## 2. 理論

この章では、数値解析で用いる FADE、非整数階微分を含む移流分散方程式について説明をする。従来、地下水中を移動する物質の挙動を表す方程式は ADE (Advection-Dispersion Equation) が用いられてきた。ADE は次のような形をしている。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1)$$

ここで、各々  $C$  は濃度、 $D$  は分散係数、 $v$  は地下水平均流速、 $t$  は時間、 $x$  は距離を表している。この式で表される拡散は通常拡散と言われ、平均 2 乗距離が時間に比例するという前提で成り立っている。しかし、現実の物質の挙動を観察すると、この比例関係が成り立っていないことが分かる。つまり実際の物質の移動は異常拡散なのである。また、ADE では現実の挙動に見られる長いテーリング現象を表すことができない。このテーリング現象を表現出来ないと長期の挙動把握は不可能と言える。そこでこれらの問題を解決出来る異常拡散モデルとして、FADE (Fractional Advection-Dispersion Equation) が注目されているのである。FADE は次のような形をしている。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{\alpha} \frac{\partial^{\alpha} C}{\partial x^{\alpha}} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1 < \alpha \leq 2) \quad (2)$$

ここで  $\alpha$  は微分階数を表している。FADE では ADE と比較すると移流項に変化はないが、分散項が非整数階微分を含んでおり、これにより現実に即した異常拡散を表現出来ると期待されている。この支配方程式を差分化しコンピュータによる数値解析を行い、長期の挙動シミュレーションを行う。なおこの FADE において、 $\alpha$  を 2 とすると ADE に帰着する。

また、本研究では (2) 式の差分化をより効率的に行うため、村重ら[1]の方法を用いた。

## 3. 実験手順

実験で使用するカラムは、塩化ビニル管を 30cm に切断したものである。吸着剤には豊浦砂を用いる。豊浦砂は事前に硝酸により洗浄し、不純物を取り除いた状態で用いる。砂層の充填には水中落下法を採用した。これにより間隙率が一定になるように充填出来る。砂層厚は 20cm とし、その上下にガラスウールを敷く。

キーワード 土壌汚染, 異常拡散, 物質移動

連絡先 〒305-5873 茨城県つくば市天王台 1-1-1 筑波大学システム情報工学研究科リスク工学専攻

TEL 029-853-5600-8207 E-mail : [vivre\\_sa\\_vie\\_part2@msn.com](mailto:vivre_sa_vie_part2@msn.com)

これは溶液が砂層表面全体から均等に浸透するようにするためである。この砂層を現実の地層と見なし、ここに十分な時間精製水を流し定常流とした後に、2ppm に濃度を調整した亜鉛溶液を一定流速で 24 時間流す。流入及び流出にはポンプを用いて、常に一定量を流入出できるようにした。流出した溶液をフラクションコレクタで 30 分毎に試験管に採取し、豊浦砂に吸着された結果の亜鉛濃度の破過曲線を得る。また 24 時間流し終わった砂層は輪切りにし、質量パーセント濃度 3% の硝酸におおよそ 24 時間浸して吸着した亜鉛を離脱させる。この亜鉛の濃度も計測し、吸着量の空間分布のデータも得る。実験結果として得るデータはこの 2 種類で、それぞれについて ADE 及び FADE とのフィッティングを行う。

また、溶液の濃度の測定に関しては、日立の Z-2000 シリーズ偏光ゼーマン原子吸光光度計を用いる。この吸光光度計の内部の簡単な模式図は図 1 のような構造をしている。試料を吸い上げ、チャンバー内で助燃ガスと圧縮空気と混合し、燃烧部でプラズマ化させる。そのフレーム部分を通るようにホロカソードランプからの単波長光を照射し、その吸光度によって濃度を測定する。この原子吸光光度計は偏光によるバックグラウンド補正機能を持っており、近隣線やバックグラウンド吸光による測定誤差をかなり抑えることが出来、より高い精度で濃度を測定できるのが特徴である。

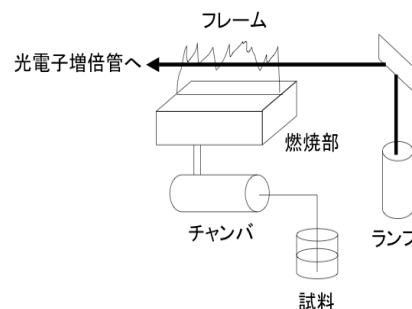


図 1 原子吸光光度計内部 模式図

#### 4. 結果と考察

右の図 2 は、亜鉛濃度の距離変化の実験データと ADE で算出したデータとのフィッティンググラフである。ドットのみで表示されているのが実験データで、平滑線で表されているのが ADE によるデータである。今回は ADE によるフィッティングにおいて、数値解析による近似解ではなく、以下で説明する解析解を用いた。パラメータを様々な組み合わせで変更し、よりフィットするものを探した。その結果として図 2 にあるような 3 つのデータを載せた。それぞれの特徴については後で述べる。まず既知となっている ADE の解析解について説明する。ADE の解析解としては次の Ogata-Banks の式が知られている。

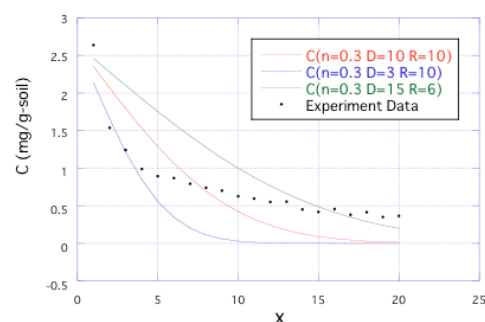


図 2 Volume of Adsorbed Zn within Toyoura sand

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4t_R} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot (1-t_R) \right] + \exp(Pe) \cdot \operatorname{erfc} \left[ \left( \frac{Pe}{4t_R} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot (1+t_R) \right] \right\} \quad (3)$$

$$t_R = ut/x \quad Pe = ux/D \quad u = v/n \quad D = \alpha \cdot u$$

ここで、 $C$  は濃度、 $C_0$  は初期濃度、 $\operatorname{erfc}$  は補誤差関数、 $v$  は平均流速、 $n$  は間隙率、 $D$  は分散係数、 $\alpha$  は縦分散係数を表している。またグラフ中のパラメータ  $R$  は遅延係数であり、平均流速及び分散係数がこの  $R$  で除される。このグラフからも分かるように、従来の ADE では、初期段階の落ち方やテーリングを各々は表現出来ても一つのパラメータで同時に表現することは難しい。特にテーリング現象は的確に表現出来ていない。これが ADE の問題点である。

なお、発表会当日は ADE と FADE 両方とのフィッティングを行った結果と、それぞれの精度の差異についての成果を発表しようと考えている。

#### 5. 参考文献

- 1) Okayama and Murashige, Numerical Calculation of Fractional Derivatives using Automatic Differentiation and Double Exponential Formula, Vol.16, 2006, p.55
- 2) 地下水問題研究会, 地下水汚染論, 1991, pp.197-198