

化学平衡計算プログラム (WATEQ) の農耕地地下水水質への適用

九州大学工学部 学生員 ○斉藤 啓一
 九州大学工学部 正 員 広城 吉成
 九州大学工学部 正 員 神野 健二
 九州大学工学部 学生員 川谷 逸樹

1. はじめに

多種のイオンの活動度や鉱物の溶解沈澱平衡の計算を速やかに実行するプログラムの1つにWATEQ¹⁾があり、主に地下水中などの水溶液中の化学種の平衡分布や、それに関連する鉱物の溶解沈澱平衡を計算するプログラムである。その応用範囲はまだこれから大きく広がる可能性を持っている。

本報ではまずWATEQの計算内容を明らかにし、次に実際の農耕地地下水質測定値²⁾をWATEQに入力し解析を試みた。

2. WATEQの計算内容

図-1にWATEQのフローを示す。この計算プロセスは、

(A) 陽イオンと陰イオンの当量バランスの計算を行い、入力した分析値の精度を確認する。(もしバランスの差が30%以上であれば、入力データを確認する必要がある。) (図中1)

(B) 平衡定数KTを求めるが、これはVant-Hoff式あるいは、回帰式から計算する。(図中2)

(C) 求める活動度係数は主にDaviesの式³⁾を用いて計算し、それを用いて活動度も計算する。(図中3)

$$\log \gamma = \frac{-AZ^2\sqrt{I}}{1+\sqrt{I}} - 0.3I$$

γ : 活動度係数 A: Debye-Hückel係数

Z: イオンの電荷 I: イオン強度

(D) 平衡定数, 活動度, 活動度係数から陽イオンのモル濃度を算出する。(図中4)

(E) (D) と同じように陰イオンのモル濃度を算出し、濃度の合計を算出した結果により物質収支を計算する。(図中5, 6)

(F) 計算によって得られた陽イオンと陰イオンの当量バランスの精度を確認する。(もしバランスの差が30%以上であれば、入力データを確認する必要がある。) (図中7)

(G) イオン活動度積 (IAP) を計算する。(図中8)

(H) 計算によって得られた活動度や活動度積の対数をとる。IAPは例えばGypsumでは $[Ca^{2+}][SO_4^{2-}]$ で示される溶液中でのイオン活動度積であり、KTは $[Ca^{2+}][SO_4^{2-}]$ の平衡時におけるイオン活動度積 (溶解度積) である。従って $\log(IAP/KT)=SI$ (Saturation Index) は、 $SI>0$ のとき過飽和、 $SI=0$ のとき平衡、 $SI<0$ のとき未飽和である。(図中9)

なお図中3~6の間の繰り返し計算は陽イオンと陰イオン全体の物質収支の誤差が0.05%より小さくなったときに終了する。

3. 農耕地地下水水質への適用

地下水水質の調査対象に選んだ井戸をWで表し、その付近の概要を

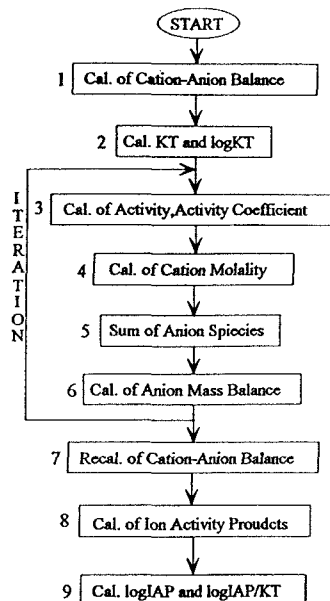


図-1 WATEQの計算の流れ

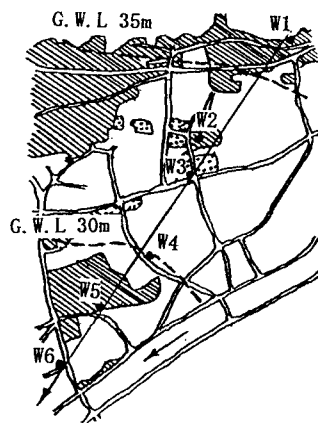


図-2 調査対象地域の概要図

図-2に示す。この地域で想定される地下水流向は図-2の地下水位から判断すると、W1～W6の方向に流れていると思われる。W1は山の麓にあり人為的影響を受けにくいのに対して、W2, W3, W4, W5, W6では1年を通じて水田、畑地として利用され、人為的影響を受けやすく特にW3はビニールハウスに隣接している。井戸の深さはW2が約30m、その他の井戸は10m弱の井戸である。またこの地域の地質は風化花崗岩となっている。

上記W1～W6の水質調査を1992年1月11日に行っており、測定項目はpH, DO, EC, 水温, Ca^{2+} , Mg^{2+} , K^+ , Fe^{2+} , Mn^{2+} , NH_4^+ , SiO_2 , Cl^- , SO_4^{2-} , PO_4^{3-} , NO_3^- , NO_2^- である。

これらの測定値をWATEQに入力し、計算した結果を図-3に示す。この図よりW1～W6とも

Calcite, GypsumのSIは負となっており、これらに関して未飽和状態になっていることが分かる。W2～W6は肥料の影響を受けている井戸であるが、W1に比べCalciteでは減少の方向へ、Gypsumでは増加の方向へ変化している。

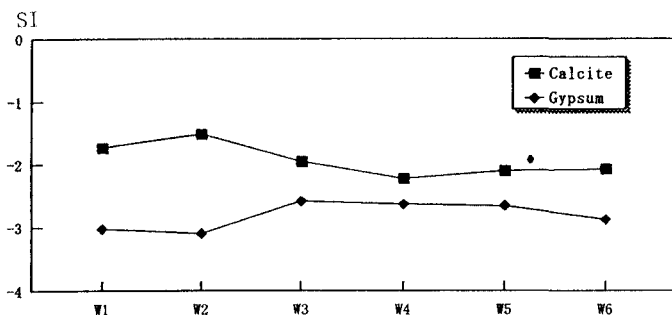
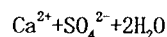
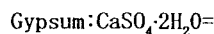
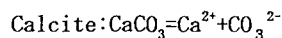


図-3：各井戸におけるCalciteとGypsumのSI変動



4. まとめ

水質測定結果をWATEQに入力し計算することで、その水が何の鉱物に対して過飽和、未飽和であるかが分かった。また今回はカルシウムに関係する鉱物 (Calcite, Gypsum) について解析したが、施肥の影響を受けている井戸とそうでない井戸との差が現れている。今後は更にWATEQにより、多様な水質の予測シミュレーションを実施検討する予定である。

〈謝辞〉

本報をまとめるに当たり農学部のと田信一郎先生、理学部の横山拓史先生、千葉仁先生には有益なご助言を頂きました。ここに記して感謝いたします。

〈参考文献〉

- 1) C. A. J. Appelo, D. Postma: Geochemistry, groundwater and pollution, A. A. BALKE, ROTTERDAM, BROOK-FIELD, 1994.
- 2) 広城吉成, 横山拓史, 神野健二, 和田信一郎, 糸井龍一, 山崎惟義, 市川勉, 細川土佐男: 農耕地における地下水水質の変動特性—特に陰イオン濃度の変動について—, 水工学論文集, 36, 403-408, 1992.
- 3) Bolt, G. H. and M. G. M. Bruggenwert編著[岩田進午ほか訳]: 土壌の化学, 学会出版センター, 1980