

## 遺伝的アルゴリズムを用いた地下水中の反応輸送シミュレーション

九州大学農学研究院 正会員 中川 啓 和田信一郎  
鹿児島大学農学部 正会員 粉井和朗

## 1. はじめに

地下水環境中の物質輸送を調べるために、反応輸送シミュレーションを用いた検討が行われる。この反応輸送シミュレーションにはいくつかの計算方法があるが、本研究では、化学反応項を繰り返し計算により逐次推定しながら解く解法を用い、化学反応項推定に関して遺伝的アルゴリズム(以下GAとする)を用いる方法を提案した。

## 2. 基礎式

本研究で取り扱う数値計算モデルの基礎式は、表-1に示す。物質輸送については、溶液中について(1)式、陽イオン交換体上で吸着しているイオンについての物質収支は(2)式を用いる。取り扱う化学反応は、陽イオン交換反応であるが、通常陽イオン交換反応は速い反応であり、局所平衡を仮定して取り扱われている。最初陽イオン交換体に吸着していた陽イオンを  $c_s$ 、それとイオン交換する陽イオンを  $c_x$  とすると、交換平衡での Gaines-Thomas の選択係数  $k_{ik}$  は、式(3)で表される。それぞれの陽イオンの活動度は、まずイオン強度を  $I$  として式(4)により算定し、次いで Davies の式(5)により与えられる。また当量分率  $X_i$  と、吸着されている成分のモル濃度とは、陽イオン交換容量 CEC を用いて、式(6)の関係を満足している。さらに、CECは吸着サイトに交換吸着している陽イオンの総数に等しいことにより式(7)が成立する。以上より、溶液濃度の活動度が既知であれば、吸着サイトの当量分率  $X_i$  を式(3)-(7)により決定することができる。一方溶液中の電気的中性条件として式(8)が成立しているものとする。

## 3. GAを用いた数値モデル

数値計算は物質輸送に関しては特性曲線法を用い、化学反応項の推定にはGAを用いた。GAを含めた数値解析全体の処理手順は次のようにした；

## ①. 初期集団の発生

乱数を用いて200個の個体を生成した。

## ②. 化学反応項の遺伝子型と表現型への変換方法

4個の化学反応項を10ビットの2進数で表し、合計40ビットの遺伝子型で各個体を表現した。設定した反応項の最大値と最小値の範囲を  $2^{10}$ 個に分割し、2進数表現が対応する反応項の値をあらかじめ決めておき、遺伝子型を表現型へ変換するようにした。

## ③. 特性曲線法による移流分散解析と化学平衡に関する計算

ある世代の各個体について、②の方法により化学反応項のセットへの変換を行う。変換された反応項を  $s_{i,j}^{n+1}$  とし ( $i$ : 化学種,  $j$ : 空間座標,  $n$ : 時間ステップ)、これらに対する移流分散方程式(1)について、分散項には差分法、移流項には特性曲線法を適用し、溶液中の陽イオン濃度  $c_{i,j}^{n+1}$  を求める。次に  $s_{i,j}^{n+1}$  について、吸着陽イオン濃度  $\bar{c}_{i,j}^{n+1}$  を次の差分式により求める。

$$\begin{aligned} \bar{s}_{i,j}^{n+1} &= -s_{i,j}^{n+1} \\ \bar{s}_{i,j}^{n+1} &= \frac{1}{2} (\bar{s}_{i,j}^n + \bar{s}_{i,j}^{n+1}) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\bar{c}_{i,j}^{n+1} = \bar{c}_{i,j}^n + \bar{s}_{i,j}^{n+1} \Delta t$$

ここで得られた溶液中の陽イオン濃度  $c_{i,j}^{n+1}$  から活動度、吸着陽イオン濃度  $\bar{c}_{i,j}^{n+1}$  から当量分率  $X_i$  を求める。

## ④. 個体の評価

評価関数を用いて各個体の適応度を評価する。評価関数は計算値とあらかじめ与えられている値との誤差の二乗和を最小にすることを考え、誤差の二乗和の逆数とした。ここで用いた各世代の個体数は50個体、最大世代数は50世代、交叉確率は0.60、突然変異確率は0.01としている。

## 4. カラム実験への適用例

GAを用いた多成分輸送問題に関するモデルの妥当性を確認するため、室内実験結果と比較し検討した。実験の概要は次のようである。直径2cm、長さ20cmの円筒カラムに灰色低地土を充填し、模擬地下水を通水して飽和カラムとし、流量と水質ともに安定後、

表-1 本研究で用いた基礎式群

$\frac{\partial c_i}{\partial t} + v \frac{\partial c_i}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) + S_i \quad (1)$	$i$ : 化学種, $c_i$ : $i$ イオンの溶液中濃度, $v$ : 実流速, $D$ : 分散係数, $S_i$ : $i$ イオンの化学反応
$\frac{\partial \bar{c}_i}{\partial t} = -S_i \quad (2) \quad k_{ik} = \left( \frac{x_i}{a_i} \right)^{v_i} \left( \frac{a_k}{x_k} \right)^{v_k} \quad (3)$	項, $\bar{c}_i$ : $i$ イオンの陽イオン交換体上の濃度
$I = \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2 \quad (4)$	$x_i, x_k$ : 交換体上の吸着イオン $i$ と $k$ の当量分率, $v_i, v_k$ : 交換反応の化学量論係数, $a_i$ : イオンの活動度, $z_i$ : イオンの電荷, $A$ : 温度に依存した定数, $\rho_b$ : 乾燥密度, $n$ : 間隙率.
$\log_{10} G_i = -Az_i^2 \left( \frac{\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} - 0.3I \right) \quad (5)$	
$\bar{c}_i = CEC \frac{\rho_b X_i}{n v_i} \quad (6) \quad \sum_i X_i = 1 \quad (7) \quad \sum_i v_i z_i C_i = 0 \quad (8)$	

高濃度 KCl 溶液を 3.14 mL 注入した. その後模擬地下水に切り替え, 通水を継続した. 図-1 にはカラム下端における各イオンの濃度変化についての実験結果と数値計算結果を示している. 計算結果は実験結果と概ね一致しており, モデルの妥当性は確認できる. 図-2 には化学反応項  $S_{Ca}$ ,  $S_{Mg}$ ,  $S_{Na}$ ,  $S_K$  の空間分布を示している. 反応項の分布では振動が見られ, 特に Ca の分布における 2 つ目の谷に当たる位置(地表面より 1.2 cm)においては, 当量分率の和が 1 になる条件を満たしておらず, パラメータ探索が失敗していることが分かる. KCl 注入 5 分後には, 溶液中の濃度フロントは 4~5 cm までであり, 吸着陽イオン分布を見ても 2 cm までは初期分布から陽イオン交換反応が進み, 変化していることが分かる. このことは化学反応項の分布からも明らかであり, 0.6 cm の位置で最も活発に反応が進んでいることが分かる. 図-3 には, 最も化学反応が活発であると考えられるカラムの最上部から 0.2 cm および 0.3 cm の計算位置における KCl 注入 1 分後の誤差二乗和 (式 (10) の関数値の二乗和) を示している. 誤差二乗和は世代が進むと直ちに小さくなり最適値に近づく様子が現れ, 探索そのものは正しく行われていることが分かる.

5. おわりに

GA を適用した反応輸送シミュレーションは, カラム下端における濃度変化については概ね良好な結果を得たが, 化学反応項の分布については, 現実的な値を容易に決定できる方法とは認めがたい結果が得ら

れた.

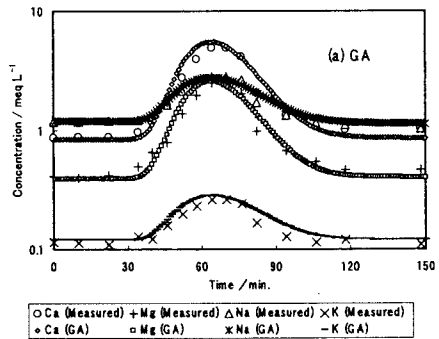


図-1 カラム下端における濃度変化

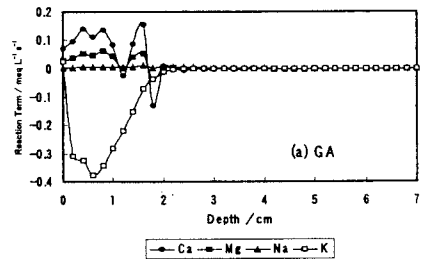


図-2 化学反応項の空間分布

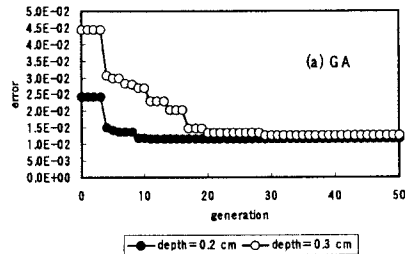


図-3 誤差二乗和の世代に対する変動