

## I-20 セルオートマトン法を用いた

## 塩化物イオン土壌拡散シミュレーション

SIMULATION OF DIFFUSION PHENOMENA OF CHLORINE ION  
THROUGH THE SOIL USING CELLULAR AUTOMATON METHOD福岡寛<sup>1</sup>・白木渡<sup>2</sup>・井面仁志<sup>3</sup>・岩崎賢司<sup>4</sup>

Hiroshi Fukuoka, Wataru Shiraki, Hitoshi Inomo and Kenji Iwasaki

In this study, we propose a simulation model for chlorine-ion diffusion using cellular automaton (CA), where mobile-water and immobile-water are postulated to exist in soil. Simulation results obtained from this proposed model are compared with those of observation by column experiment to verify the applicability of the model for soil pollution phenomena. The model could be reproduced tailing phenomena in breakthrough curves, and estimated distribution of immobile water in the soil column. It is shown that the complexity phenomena such as diffusion of soil pollution can be simulated simply and precisely by CA model more simply than numerical analysis.

**キーワード** : セルオートマトン, 拡散, 塩化物イオン, 不動水

**KeyWords** : cellular automaton, diffusion phenomena, chlorine ion, immobile water

## 1. まえがき

戦時中に使用された有毒物質の不法投棄, 工場からの有害物質流出, 工場での有害物質使用等により土壌汚染や地下水汚染が進行し, 最近になって宅地開発や都市再開発工事により汚染の実態が顕在化し社会問題化している。また, 土壌汚染対策法の施行(2003年3月)により, 法的に土壌汚染対策が義務づけられるようになった。汚染土壌を浄化・復元する場合には, 最初に汚染状態を正しく推定することが必要になる。そのためボーリング調査が実施されるが, 経済的理由からボーリング調査を精度よく実施することには限界があり, 支配方程式を構成し数値解析を行うことで情報を増やす方法が一般的である。このような状況から, 数値解析に関する研究は盛んに行われている<sup>1), 2), 3), 4)</sup>。

しかし, 数値解析を用いて人工物でない自然界を対象とした予測をする場合, 精度の高い解析結果を求めるに

は複雑な支配方程式を構成することになる。また, 初期条件と境界条件を設定しなくてはならず, 単純な条件設定では誤差が大きくなる場合があり, 条件設定自体を複雑にする必要がある。そのため現実問題として, 地下の複雑な環境下での汚染物質等の挙動を数値解析によって把握することは大変困難である。実際, 平成15年に茨城県神栖町で起きたヒ素被害では, 2年が経過した現在も, 汚染状況に関するボーリング調査が行われているにもかかわらず, いまだ全容解明に至っていない。

そこで本研究では, ソフトコンピューティングの一種であるセルオートマトン(Cellular Automaton, 以下 CA)を用いて, 土壌汚染物質拡散シミュレーションシステムの開発を行う。CAを土壌汚染物質拡散シミュレーションに応用できれば, 支配方程式を構成することなく, 少ないパラメータで比較的簡単に複雑な現象を計算することが可能である。システム開発の第一段階として, 比較的安定な状態を保つことができる塩化物イオンを対象と

1: 正会員 工学 (株)四国総合研究所 化学技術部

(〒761-0192 高松市屋島西町2109番地8 Tel:087-844-9216 E-mail:kat8107@ssken.co.jp)

2: 正会員 工博 香川大学 教授 工学部信頼性情報システム工学科

(〒760-8526 高松市林町2217番地20 Tel:087-864-2243 E-mail:shiraki@eng.kagawa-u.ac.jp)

3: 正会員 工博 香川大学 助教授 工学部信頼性情報システム工学科

(〒760-8526 高松市林町2217番地20 Tel:087-864-2245 E-mail:inomo@eng.kagawa-u.ac.jp)

4: 非会員 工学 四国リコー(株) (〒760-0017 高松市番町1丁目1番地5 Tel:087-822-1001)

した拡散シミュレーションモデルの開発を行い、土壌汚染シミュレーションへのCAの適応可能性を検証する。

## 2. CAとは

### (1) 特徴

CAとはフォン・ノイマンとスタニスロー・ラウムにより考えだされ、1948年、「行動における脳機構に関するヒクソン・シンポジウム」で初めて示された手法である。対象空間をセルと称する区分領域に分割し、各セル上に定義された離散数値で表現される状態量を、近傍のセルとの相互作用を表す局所的近傍則(ローカルルール)により離散時間的に変化させる手法である<sup>5), 6)</sup>。局所的な相互作用を積み重ねることで、組織全体が自然に形作られる特徴を持つ。

従来の複雑現象を微分方程式モデルなどを用いて再現する方法をトップダウン手法といい、現象を記述する微分方程式を頂点にもち、差分近似などの数値解析法により現象の特性を得る。一方、CAのように自己組織化を用いたアプローチをボトムアップ手法という。CAは単に微分方程式モデルを代替しているだけでなく、自然界の不規則性(複雑性)を人の手を介在せず再現できるという特徴を有する。

### (2) ライフゲーム

二次元CAの代表にライフゲームがある。ライフゲームとは多数の正方形に区切ったセル上に、生きている状態と定義した生のセルを少数置くと増殖し始め、単純な初期の形と簡単な規則から予測できない複雑で多彩なパターンが作りだされるシミュレーションである。近傍セルの状態変化およびローカルルールの例を図-1に示す。

ライフゲームにおいて生のセルの離散時間における状態変化は、生のセルに隣接している8個の近傍セル(図-1(a))の状態により決定される。中央の生のセルは、生

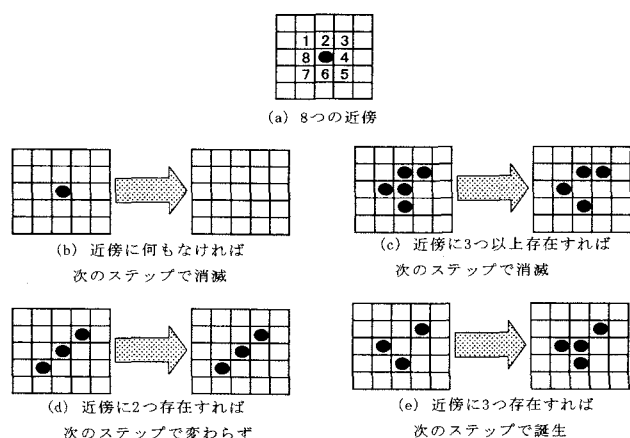


図-1 ライフゲームの概要

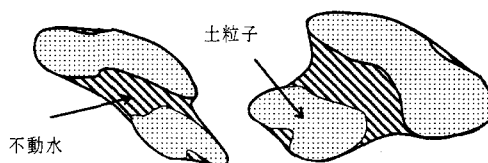


図-2 多孔質媒体中での不動水概要

のセルの近傍セルに生のセルが1つも存在しない場合(図-1(b))および近傍セルに生のセルが3個以上存在する場合(図-1(c))には、次のステップにおいて中央のセルは消滅する。図-1(d)に示すように近傍セルに2個の生のセルが存在する場合には、中央のセルは次のステップにおいて状態は変化しない。一方、図-1(e)に示すように生でない状態の中央のセルの近傍セルに、3個の生のセルが存在する場合、中央のセルは次のステップで生の状態に変化する。このようなローカルルールにもとづき、セルの状態を変化させていく。

土壌中局所部分での条件に適合した濃度変化を、以上説明したCAにおけるローカルルールとして設定できれば、精度の高い解析が可能であると考えられる。

## 3. 土壌中での溶質移流拡散

### (1) 一次元拡散方程式

土壌内を浸透する溶媒は空間部分である孔隙を流れる。浸透液が流動している可動水領域での溶質濃度Cの変化は、z方向一次元拡散の場合には、式(1)で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} + \sum_k R_k \quad (1)$$

ここで、D: 拡散定数、v: 溶媒の流速、R<sub>k</sub>: 化学的作用・放射性壊変などの溶質の変化量である。

しかし、土壌のような多孔質媒体中を溶媒が流れる場合は土粒子表面における van der Waals 力の働きにより、土粒子表面の孔隙部分や土粒子間で形成される孔隙部分に浸透水が留まる現象が起きる。この現象での流動していない水である不動水の概要を図-2に示す。不動水領域での溶質濃度Cの変化はz方向一次元拡散の場合式(2)で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \sum_k R_k \quad (2)$$

塩化物イオンは土壌吸着が起りにくく、安定な状態を保つことから、可動水領域での塩化物イオン濃度変化は式(3)、不動水領域での塩化物イオン濃度変化は式(4)で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (4)$$

これらのことから、土壌中での塩化物イオンの拡散現象を予測するには、動水領域と不動水領域の2成分モデルを検討する必要がある。

## (2) カラム実験による破過曲線

従来、土壌中での物質挙動を調べるために、土壌を詰めた円筒容器内に上部から対象物質の溶液を浸透させ、下部から流出した溶質濃度変化を測定するカラム実験が行われる。図-3にカラム実験から得られる典型的な破過曲線例を示す。

図-3の縦軸は浸透させた原水の濃度(C<sub>0</sub>)に対する溶出水濃度(C)の比(相対濃度(C/C<sub>0</sub>))を示し、横軸は浸透時間を示す。浸透液がダルシー則にあてはまる時は理想的な流れになり、図-3中の①のピストン流になる。この場合、ある時点で相対濃度が1となる浸透液が流出する。浸透液の流速が間隙部分の大きさにより速度差がある場合は図-3中の②の分散流になる。この場合、流速の速い部分を通じた浸透液から溶出することにより、濃度が時間の経過とともに徐々に変化し、破過曲線は0.5を中心としたほぼ対象な曲線を描く。溶質と土粒子との間に吸着・吸収などの物理・化学作用がある場合は図-3中の③のテーリング流になる。この場合、浸透液中の溶質が物理・化学作用により減少した量だけ、相対濃度が1となる浸透液の流出に時間を要し、尾を引くような曲線を描く。

塩化物イオンを対象としたカラム実験では、カラム内に不動水が形成されていると、不動水内に移行した塩化物イオンはその場に滞留することになり、不動水に移行した量だけ流出が遅れ、破過曲線は図-3中の③になると考えられる。

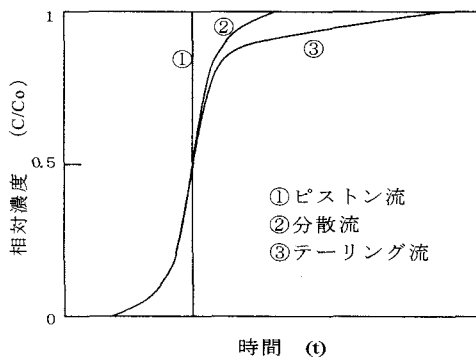


図-3 カラム実験での典型的な破過曲線例

## 4. 一次元土壌拡散 CA モデル

本研究では、図-4(a)に示す電力中央研究所<sup>7)</sup>で実施された、塩化物イオンの土壌カラム実験をシミュレーションの対象とした。土壌汚染シミュレーションにCAを適用するためのモデル化とローカルルールについて、以下に概説する。

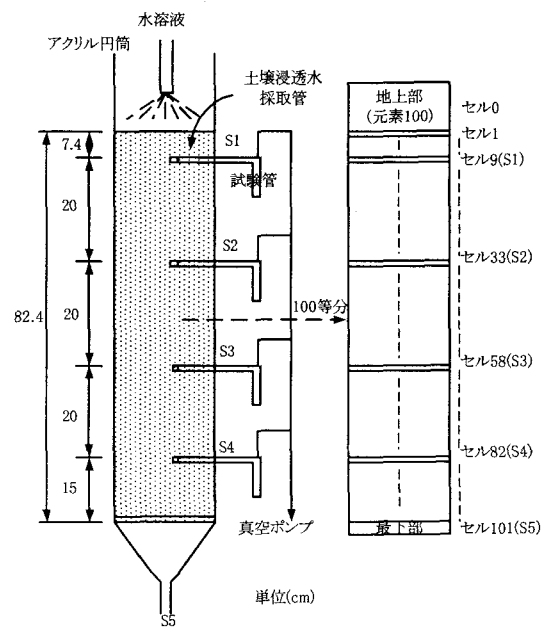
### (1) CAのための土壌のモデル化

CAを用いてカラム実験のシミュレーションを行うために、図-4(a)に示す高さ82.4cmのカラムを高さ0.824cmに100等分し、その1つ1つをセルと定義した。さらに、地上部と最下部にセルを加えて合計102個のセルとし、最上部からセル0、セル1・・・セル101と番号を付けた(図-4(b)参照)。1セルの高さは0.824cmであることから、カラム実験における測定位置S1、S2、S3、S4、S5は、それぞれセル9、セル33、セル58、セル82、セル101となる。

### (2) セルの状態

セルの状態には、可動水層と不動水存在層を設定した。可動水層は浸透液が流動している可動水領域と土粒子が存在する領域をもつ層とし、不動水存在層には、可動水領域と土粒子領域、さらに不動水領域をもつ層とした。

また、カラム実験では上部から常に塩化物イオンを含んだ水溶液(C1:100 μg/ml)が供給されており、その塩化物イオンが土壌中を移動する。この現象をCAモデルで模擬するため、セル0には塩化物イオンと仮定した元素が



(a) カラム実験 (b) セル分割

図-4 土壌カラム実験とセル分割

常に 100 個存在すると設定した。この元素を後述するローカルルールによりセル 1 からセル 101 に移動させることとする。なお、セル 1 から 101 においては、1 つのセルに存在可能な元素数は 100 と設定した。

### (3) 拡散のローカルルール

#### a) 元素の移動処理

浸透液中の元素は浸透液内で各々が独自に移動することにより拡散現象が起こる。また、元素は浸透液内で移動するため、浸透液の状態による影響を受けた挙動になる。そこで、本研究で対象とする 1 次元拡散現象シミュレーションのモデル化においては、個々の元素は確率的に移動するとし、セル 1 個分移動する確率をそのセル内の浸透液の状態により決定するとした。そして、可動水層と不動水存在層とで異なった確率でセル 1 個分移動させ、拡散現象を表現することとした。

シミュレーションの処理は図-5 に示したフローチャートに従って行った。元素ごとに乱数を発生させ、乱数が元素のもつ移動確率より小さければ、元素は一つ下のセルに移動すると設定した。全ての元素が 1 回ずつ処理を行って 1 ステップとした。

移動処理の順番は、最下端のセル 101 から処理を行い、次の若い番号のセルの処理を行うこととした。セル 0 より番号の昇順に移動処理を行うと、1 つのセルに存在可能な元素数が制限されるために、元素の移動が極端に少なくなるためである。

#### b) 不動水層の割合と元素の移動確率

全土壌中に対する不動水の割合および可動水層における元素の移動確率(図-5 中の移動確率 1)と不動水存在層における元素の移動確率(図-5 中の移動確率 2)の比を以下の方法により決定した。

カラム実験における土壌浸透水の平均流速  $V$  の理論値は式(5)で表される。

$$V = W / (A \cdot \theta) \quad (5)$$

ここで、 $W$ : 通水量、 $A$ : カラム断面積、 $\theta$ : 容積含水率である。シミュレーションを対象としたカラム実験では  $W=942\text{cm}^3/\text{h}$ 、 $A=314\text{cm}^2$ 、 $\theta=0.629$  であり、平均流速  $V$  は式(5)から  $4.8\text{cm}/\text{h}$  となる。しかし、カラム実験において、カラム長を  $S5$  での塩化物イオンの  $C/C_0$  が  $0.5$  となるまでにかかった時間で除して得た平均流速は  $6.5\text{cm}/\text{h}$  になる。その流速の違いはカラム内に不動水が形成され、可動水の有効断面積が低くなったために流速が高くなったものと考えられる。そこで、全土壌水分に対する不動水の割合は  $(6.5-4.8)/6.5=0.26$  より、 $26\%$  とし、セル 100 個中に 26 個の不動水存在層を設定し、残りのセルを

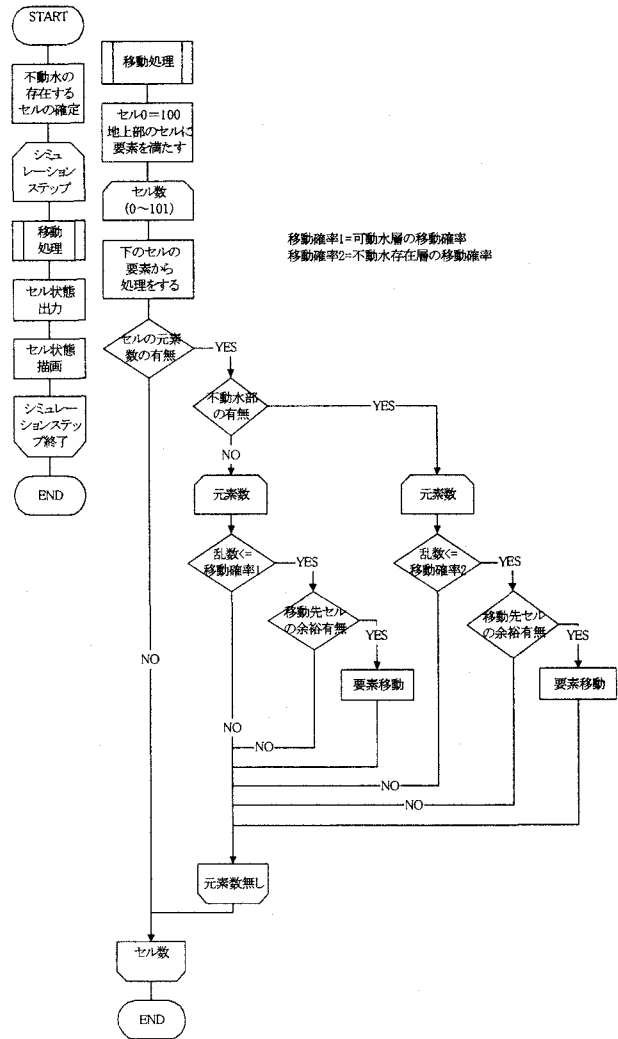


図-5 シミュレーションフロー

可動水層とした。

また、可動水領域での元素の移動は、主として可動水自体の移動によるもので、不動水領域での元素の移動は、主として分子拡散による移動になる。そのため、不動水領域での元素の移動速度は可動水領域に比べて著しく小さくなる。そこで、可動水層と不動水存在層における元素の移動確率の差は各層の可動水領域が占める割合によるとし、元素の移動確率の比を可動水層:不動水存在層=容積含水率:容積含水率・(1-不動水の割合)= $0.629:0.463$ とした<sup>7)</sup>。

なお、浸透水の平均流速  $6.5\text{cm}/\text{h}$  と、1 ステップで 1 セル分  $0.824\text{cm}$  拡散が進行するシミュレーションモデルを作成していることから、1 ステップの実時間への変換は  $0.824/6.5=0.126(\text{h})$  とした。

シミュレーションには、Sun Microsystems 社のプログラム言語である Java を使用した。これは、並列処理を得意とし、後から簡単に処理項目を加えることが可能であることがその理由である。

## 5. シミュレーション結果および考察

4章で述べた土壌拡散モデルおよびローカルルールを用い、シミュレーションを20回行った平均値と、カラム実験結果との比較を行い、CAの適応可能性の検証を行う。

### (1) 可動水層と不動水存在層における元素の移動確率の決定

実際の土壌において、不動水の位置は不確定であるため、不動水存在層をランダムに配置し、可動水層における元素の移動確率を15, 30, 45, 60, 75, 90, 99%と変化させてシミュレーションを行った。その時の不動水存在層での元素の移動確率は4章3節b項で述べた値とした。そして、セル101の $C/C_0$ が0.5となる時間が、カラム実験でのS5の $C/C_0$ が0.5となる時間に近くなる移動確率を検討した。紙面の都合上その結果は省略するが、

図-6に示す可動水層99%、不動水存在層72.27%の組み合わせが最もカラム実験結果と近い値となったことから、本研究では、それらの値を用いてシミュレーションを実施した。

### (2) 不動水存在層の位置の検討

5章1節では、元素の移動確率を変化させ、実験との近似を行った。しかし、テーリングの位置がすべてのセルで低くなり、曲線の立ち上がり位置が下部のセルになるほど遅れている。この事は上部に不動水存在層を配置したことにより、移動速度が遅くなったために起こっていると考えられる。そこで、不動水存在層を下部に集中させることにし、セル50, 59, 60, 62, 65, 67, 69, 73, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100を不動水存在層とした。その結果、図-7に示すように、5章1節の設定によるシミュレシ

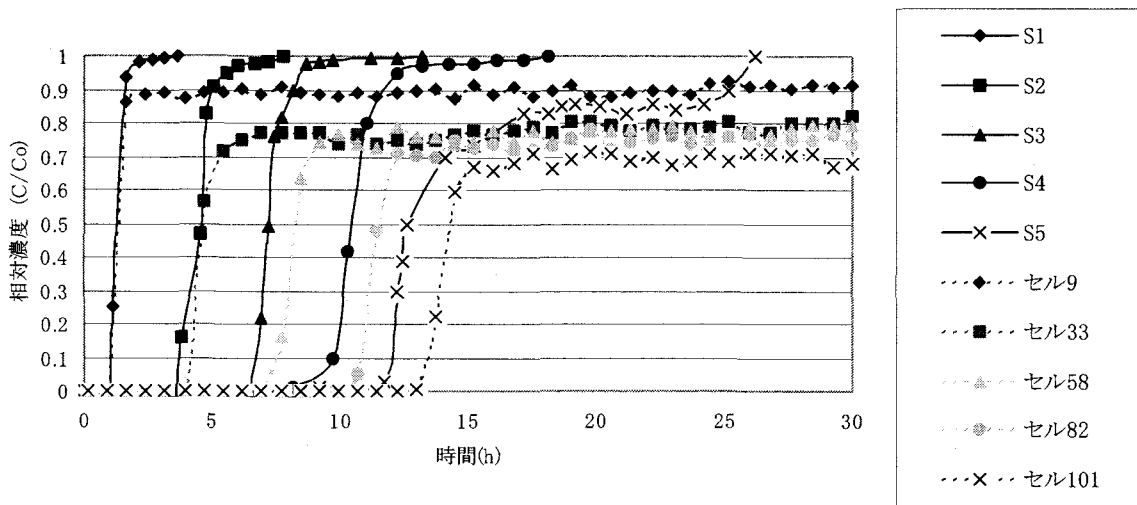


図-6 移動確率(可動水層99%, 不動水存在層72.27%)でのシミュレーション結果

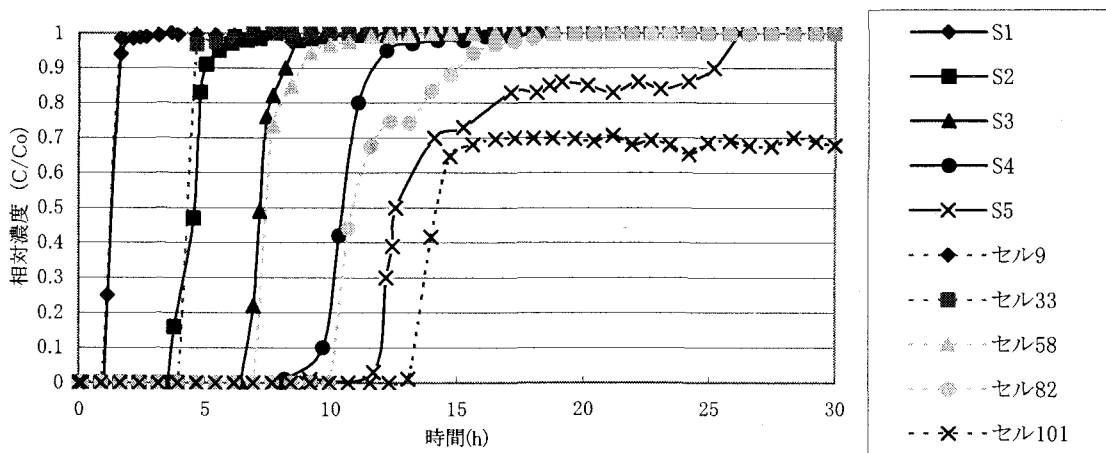


図-7 不動水存在層下部集中でのシミュレーション結果

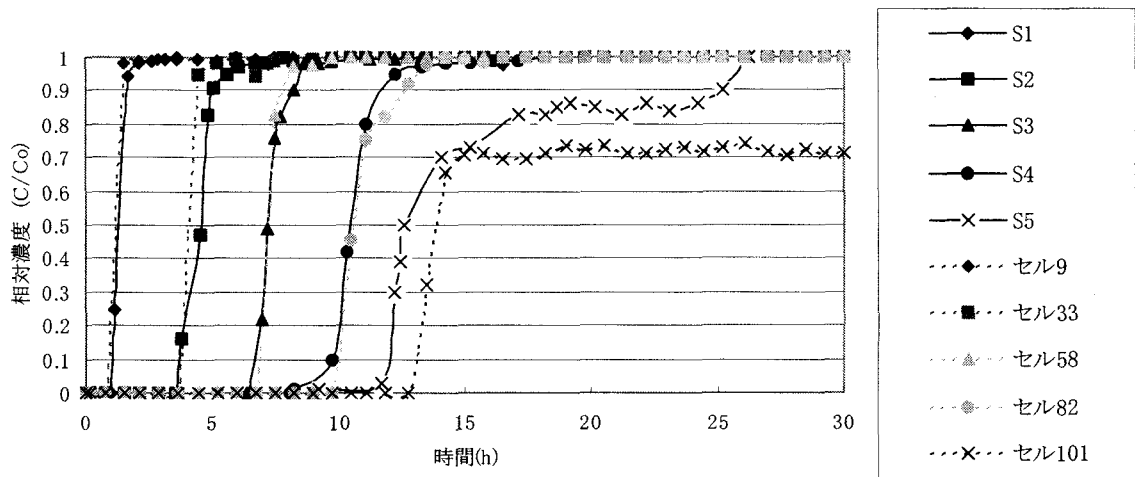


図-8 不動水存在層の割合 21%でのシミュレーション結果

よりカラム実験結果に近似したシミュレーションが行えた。このことから、このカラム実験では不動水層が下部に集中していると考えられる。

### (3) 不動水存在層の割合の検討

不動水存在層の位置を 5 章 2 節のように設定しても、まだ、セル82のテーリングの開始位置が低くなっている。そこで、不動水存在層の移動確率が高くなればテーリングの開始位置が上がると考え、不動水存在層の移動確率を徐々に高くしてシミュレーションを行った。しかし、不動水存在層の移動確率を72.27%から75.24%まで変更しても、結果に大きな違いが表れなかった。次に、不動水存在層の割合の減少によりテーリングの開始位置が上がると考え、不動水の割合を26%から21%に減らした。その結果、図-8に示すように、セル82の値がカラム実験値に近くなった。ただし、下部のセルにおいて誤差を小さくすると、上部セルにおいて誤差が大きくなり、これ以上の近似は見込めなかった。

また、図-4(a)に示すように、カラム実験におけるS5の部分はS1からS4の部分とは異なり、土粒子がなく、形状が円錐になっている。さらに、この部分の容積および含水率のデータがないため、S5に対応するセル101の近似は、図-8に示す結果で十分であると考えられる。

## 6. 結論

本論文において、著者らは土壌中での汚染物質の挙動を推定するため、CAを使用した塩素イオンの可動水-不動水拡散モデルを提案した。このモデルを用いた土壌拡散シミュレーションは、カラム実験から得られる特徴的なテーリング現象を再現可能であることを検証した。さらに、実験の結果だけでは検定が難しい、カラム内の不動水分布推定が可能であることを示した。このことから、

土壌汚染シミュレーションへのCAの適応は十分可能であると言える。

本論文で示した結果は、土壌浸透水中において干渉を受けにくい塩化物イオンの結果であり、土壌浸透水の基本的な拡散が表現できたと考えられる。さらに、本モデルに土粒子との吸脱着および気層との揮発・溶解を考慮したローカルルールを加えれば、重金属類および揮発性有機化合物を対象とした現実に近いシミュレーションが可能になると思われる。

## 参考文献

- 堀内将人, 井上頼輝, 松下直幹, 吉田卓司: 不飽和土壌の吸脱着反応特性への含水率の影響に関する実験的検討, 土木学会論文集, No.452/II-20, pp.1-10, 1992.8.
- S.G.Fityus, D.W.Smith and J.R.Booker: Contaminant transport through an unsaturated soil liner beneath a landfill, *Can. Geotech. J.*, Vol.36, pp.330-354, 1999.
- X.Li, S.Cescotto and H.R.Thomas: Finite-element method for contaminant transport in unsaturated soils, *Journal of Hydrologic Engineering*, July, pp.265-274, 1999.
- X.Li, W.Wu and S.Cescotto: Contaminant transport with non-equilibrium processes in unsaturated soils and implicit characteristic Galerkin scheme, *Int. J. Numer. Anal. Meth. Geomech.*, 24, pp.219-243, 2000.
- 加藤恭義, 光成友孝, 築山洋: セルオートマトン法, pp17-22, 森北出版, 1998.
- 森下信: セルオートマトン, pp39-47, 養賢堂, 2003.
- 佐藤一男, 坂田昌弘: 各種元素の土壌中移行機構(その1) - 土壌中移行過程のモデル化 -, 電力中央研究所報告 研究報告:T86096, 財団法人電力中央研究所(S63.3).

(2005.5.20 受付)