

溶解性汚染物質の土壌への浸透プロセスに関する確率論的考察

A Stochastic Study on the Infiltration Process of Water-Soluble Contaminants into Soils

関 平和*

Hirakazu Seki*

ABSTRACT: Soil is a mixture of soil particles of various sizes, water and air. Investigating such a complicated geometrical structure of the soil is inevitable to know the rates of moisture movement and solute transfer. Since there are limitations in treating its microscopic structure quantitatively, however, it is necessarily unavoidable to restrict the deterministic modeling of transport phenomena in soils. In this paper, a new method of stochastically modeling the variation of solute concentration in the infiltration process was proposed, whereby advection-dispersion process of the solute caused by the macroscopic heterogeneity of the soil structure without its microscopic approach. Temporal and spatial changes of the values of expectation and variance of the concentration estimated by the present model were compared with the calculated results by DB model, and the validity of the proposed model was discussed.

KEYWORDS: Stochastic Modeling, Solute transport in Soil, Fokker-Planck Equation, Markov Process

1. はじめに

汚染物質の土壌への浸透現象は、様々な大きさを持つ土粒子と、水、空気が混在している分散体としての土壌中での移流分散プロセスの一つである。このプロセスは多くの実際上の状況がそうであるように、土壌のマクロ構造である土性が水平方向に不均一であるとき、土性を均一と仮定して導かれた決定論的モデル式に従わず、土壌の任意深さにおける溶質濃度はばらついた値になることが知られている。こうした溶質濃度のバラツキ具合を定量的に把握することは、たとえば硝酸態窒素などによる地下水汚染に関するリスクアセスメントの実施に際して、濃度が閾値を越える確率を知る方法として役立つ可能性があり、この点は自然環境システムと人間との関わりを問題とする環境システムの理念に通ずるものと考えられる。

「バラツキ」を伴う土壌内溶質移動現象の解析は Dagan-Bresler モデル^{1,2)} (以下 DB モデルと呼ぶ) が原点といえ、その後、地下水汚染に関連しては従来から多くのモデルが提示されてきている。古市³⁾はそれらを「平均化法」と「確率場発生法」の二つに大別・整理している。平均化法は DB モデルの流れを直接受け継いだもので、ランダムな流れ場の平均的な流れ場の存在を仮定することにより、平均場の解析解と、現象を代表する移動係数の確率密度関数を利用するものである。一方、確率場発生法は流れ場を確率場とみなす方法でモンテカルロ法による解法が主流である。

本研究では、溶質移流分散プロセスを、溶質濃度の量子化操作によって組み立てられる確率過程とみなして導かれる確率密度関数の収支式を利用する方法を提案する。この方法は確率場発生法の理念に沿うものであるが、濃度分布の確率分布汎関数に関する方程式 (Fokker-Planck 方程式) を直接解くという点に特徴がある。方法の妥当性を検討するための計算例として、鉛直方向の定常水分分布が形成されている畑地において、ある瞬間から表面の溶質濃度が所定の値に設定されそのまま維持される場合を想定し、不均一な土壌としての畑土壌下方への溶質の移流分散プロセスを取り上げた。

*金沢大学工学部土木建設工学科 Department of Civil Engineering, Kanazawa University.

2. 理論的取り扱い

2. 1 モデル化の前提

土中で生起する移動現象の進行速度の正確な把握にとって、土壤構造の抽象化は最重要課題である。ここでは原口⁴⁾によって示唆されたように、土壤構造をまずマクロ的に区分し、区分されたそれぞれのマクロ要素内においてミクロ的に変動する移動特性の平均的な値としての透水係数、分散係数に従った水分、溶質の移動特性を示すものと仮定する。すなわちミクロ構造の詳細には立ち入らない。ここでいうマクロ的区分とは、砂土、砂壤土、粘土といった土性による分類にほぼ対応するものである。いずれにせよ、対象土壤層のマクロ特性は水平面上の土性分布に対応して異なるのが普通であろう。一方、ミクロ的な移動特性とはマクロ的に区分された個別の土性を持つ各土層要素（土柱など）ごとに、その空隙径分布や粒径分布に関連して決まる各土層要素内の局所的な特性値である。

2. 2 解析方法

上記のような土壤構造の違いに起因して種々の態様を示す土層内移動現象の確率論的解析法は1. で述べたように大別すると二つになる。ここではそのうちの一つである確率場発生法の理念に準じ、移流拡散（分散）現象そのものを増殖死滅の確率過程とみなして確率密度関数の方程式を作成するモデル（以下 FP 方程式モデルと呼ぶ）を考案した。これと類似の方法はこれまで非平衡統計熱力学や理論生物学分野^{5,6)}で用いられているが、土木、環境工学分野への適用例は筆者の知る限り見当たらない。以下に、従来モデル（決定論的解析解、DB モデル）を略述したのち、FP 方程式モデルについて述べる。

(1) 解析対象と決定論的解析解

解析対象として畑地における散水（液肥散布）を考える。いま、スプリンクラーによる地表への給液速度が畑地から地下水への排出速度と釣り合っている状態、すなわち、水分移動が定常状態の下で、給液速度を固定したまま、ある瞬間に供給液中の着目溶質成分の濃度を 0 から C_0 に切換えたとき、その後の土中水の溶質濃度 C の解析解は次式で与えられる²⁾。

$$\frac{C}{C_0} = \Phi(z, t, V) = \frac{1}{2} \left\{ e^{\frac{Vz}{D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{z + Vt}{2\sqrt{Dt}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{z - Vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right\} \quad (1)$$

ただし、 $V (= J_{ml}/(\rho_l \theta_l))$ は土中水の断面平均速度、 C_0 は給液中の溶質濃度、 t は時間、 z は表面から下方への距離を表す。

(2) DB モデル

DB モデルは、不均一土壤層内溶質移動に関する広範な実験結果から、1) 飽和透水係数 k_s には scaling parameter が存在すること、2) k_s の確率密度関数は対数正規分布に従うことを明らかにした Warrick et al.⁷⁾ の知見を前提として得られた確率論的モデルである。このモデルによる溶質濃度の期待値 Φ 、分散 σ_Φ^2 は上述の Φ の解析解 [式(1)] を用いて次式で与えられる。

$$\bar{\Phi}(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(z, t, V) f(Y) dY \quad (2)$$

$$\sigma_\Phi^2(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \Phi(z, t, V) - \bar{\Phi}(z, t) \right\}^2 f(Y) dY \quad (3)$$

ただし、確率密度関数 $f(Y)$ は次のごとく変数 $Y [= (1/2) \ln(k_s/k_s^*)]$ の対数正規分布で与える。

$$f(Y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_Y} e^{-\frac{(Y-m_Y)^2}{2\sigma_Y^2}} \quad (4)$$

m_Y, σ_Y は Y の期待値、標準偏差で、現場試験結果などから推測される。

このモデルは数学的操作は簡便であるが、均一移動物性を持つ土壌層に対する移流分散方程式の解析解 [この場合は式(1)] が得られていないプロセスには適用できない。

(3) FP 方程式モデル

解析対象領域 ($z=0 \sim l$) を N 個のセルに分割し、セル内の無次元濃度がそれぞれ $\Phi_i (i=1 \sim N)$ である確率を $P(\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N)$ [$N \rightarrow \infty$ の極限では確率汎関数となる] とすると、確率の変化が Markov 過程にしたがうものと仮定して P に関するマスター方程式は次のように導かれる。⁸⁾

$$\frac{dP}{dt} = \sum_{i=1}^N (X_i + 1) \{aP(X_i + 1, X_{i+1} - 1) + bP(X_{i-1} - 1, X_i + 1)\} - (a + b) \sum_{i=1}^N X_i P \quad (5)$$

ここで、濃度を個数換算する際の粒子 (量子) 1 個の質量を m_p 、セル幅を Δl とし、 $m_p X_i / \Delta l = \Phi_i$ 、 $m_p / \Delta l = \varepsilon$ (単位濃度幅) として上式を書換え、書き換えた式を Kramars-Moyal 展開後、3 次以降の微分項を小さいとして無視して整理すると、いわゆる Fokker-Planck 方程式 (FP 方程式) が次のように得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} = & - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \Phi_i} \left[\left\{ E \frac{\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1}}{(\Delta l)^2} - u \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}}{2\Delta l} \right\} P \right] \\ & + \frac{1}{2} \varepsilon \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial \Phi_i^2} \left[\left\{ E \frac{\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1}}{(\Delta l)^2} - u \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}}{2\Delta l} \right\} P \right] \end{aligned} \quad (6)$$

ただし、 $E = \{(a+b)(\Delta l)^2/2\}$ 、 $u = \{(a-b)\Delta l\}$ はそれぞれ、溶質の分散係数、移流速度を表すものと解釈される。

N が大きく、かつ、 P の分布が期待値からそれほど遠くない範囲に集中しているものと仮定し、次のような変数分離が可能であるものとすれば、

$$P(\Phi_1, \Phi_2, \dots, \Phi_N) = P_1(\Phi_1)P_2(\Phi_2) \dots P_N(\Phi_N) \quad (7)$$

この問題は各セルの確率密度関数 $P_i(\Phi_i)$ に関する次のような微分方程式を解くことに帰着される。

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + \frac{d\Phi_d(i)}{dt} \frac{\partial P_i}{\partial \Phi_i} - \frac{\varepsilon}{2} \frac{d\Phi_d(i)}{dt} \frac{\partial^2 P_i}{\partial \Phi_i^2} = 0 \quad (i=1 \dots N) \quad (8)$$

$$\Phi_i = 0; \quad P_i - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial P_i}{\partial \Phi_i} = 0 \quad (9)$$

$$\Phi_i = \Phi_0; \quad P_i - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial P_i}{\partial \Phi_i} = 0 \quad (10)$$

$$t = 0; \quad P_i = \delta(\Phi_i) \quad (11)$$

上記の FP 方程式モデルは、溶質濃度の場所的なバラツキを確率論的なバラツキ (ゆらぎ) に読み替えることによって移流、分散の確率論的ふるまいに帰着させるもので、平均的物性を持つと想定した土壌内の溶質移動現象についての (決定論的) 解析解が求められなくても数値解さえ得られればよい。このことはたとえば濃度が時間的に変化するようなより複雑な条件下で進行する場合についても適用可能であることを意味することから、得られた結果が妥当であれば、確率的なバラツキが期待値から大きく外れない (非線型性が強くない) 限りにおいて、FP 方程式モデルの方が DB モデルよりも応用範囲が広いものと思われる。

3. 計算条件と計算方法

表面からの散水により鉛直方向の定常水分分布が形成されている畑地において、ある瞬間から表面の溶質濃度が所定の値に保たれてそのまま維持される場合を想定し、不均一土壌としての畑地下方への移流拡散現象を確率論的に計算してみる。この思考実験は硝酸態窒素の地下水への浸透過程などを想定したものである。対象土壌の物性値と操作条件を Table1 に示す。Table1 に示す条件の下で、式 (9) ~ (11) を満たす式 (8) の数値解を計算し、それに基づいて任意深さにおける溶質濃度の期待値、標準偏差を求める。

Table 1 対象土壌の物性値と操作条件

パラメータ：	式と数値
k (透水係数)：	$k = k_s (\theta_l / \theta_{ls})^m$ ただし、 $k_s = 3.6 \times 10^{-3} \text{ m h}^{-1}$, $\theta_{ls} = 0.40$, $m = 9$
Φ_p (マトリック・ポテンシャル)：	$\log_{10}(-\Phi_p) = a + b \ln[(\theta_l / \theta_{ls})^{-c} - 1]$ ただし、 $a = -1.333$, $b = 0.049$, $c = 12.886$
V (土中水の平均線速度)：	$V \approx k(\theta_{lu}) = 2.02 \times 10^{-3} \text{ m h}^{-1}$
θ_{lu} (土壌層表面の体積含水率)：	$\theta_{lu} = 0.38$
θ_{ls} (土壌層表面の体積含水率)：	$\theta_{ls} = 0.40$
l (土壌層の厚さ)：	$l = 1 \text{ m}$

4. 結果と考察

Warrick et al.⁷⁾ が取り扱った Heterogeneous Panoche Field Soil の土壌不均一性に関するデータを用いて、DB モデルによる計算結果を 3 つ (σ_y の値を 3 種類とした) 用意し、これを比較対照用のデータとした。ここでは DB モデルによる計算結果が正しいものと仮定し、それとの比較により FP 方程式モデルの妥当性を論ずる。土壌の不均一性の程度を表すパラメーターは DB モデルでは σ_y 、FP 方程式モデルでは ε であるが、ここでは ε の値は標準偏差が DB の結果にほぼオーダー的に一致するような値として適当に選定した。

基準としての DB モデルの期待値、標準偏差の計算結果を Figs.1,2 に示す。Fig.1 によれば、現象の進行とともに期待値は徐々に増加するが、深さ方向の分布はバラツキが小さいとき (σ_y が小さいとき) シグモイド型、中程度のとき直線型、大きいとき指数減少型になる。これはバラツキが大きくなるほど相対的に分散の効果に比べて移流の効果が小さくなり表面近傍で急激な濃度低下が起こるためと思われる。一方、標準偏差については時間とともに大きくなり、濃度勾配の大きい領域で大きくなる傾向を示し、かつ、バラツキが大きいほど大きくなる。

Figs.3,4 に FP 方程式モデルによって得られた期待値、標準偏差の計算結果を示す。期待値が時間とともに大きくなるのは DB モデルと同様であるが、場所的にはいずれもシグモイド型である。ただし、バラツキが大きい場合ほど (ε が大きい場合) 上層の濃度の期待値が低くなる。このことは DB モデルと相通ずる部分でもあるが、表面濃度が固定された条件下での結果であるにもかかわらず、表面近傍の期待値が 1 より相当小さくなるのはセル番号が若い位置ではここで設定した確率反射の境界条件によって確率の集中をうまく表しきれないということでの数値計算技法の限界に起因するものと思われる。

以上より、FP 方程式モデルは地表近傍において (セル番号が若い部分において) DB モデルとの整合性はよくないが、底部に向かうにつれて (セル番号が大きくなるにつれて) DB モデルによる計算結果とよく似た結果を示す。このことは、汚染が問題となる出口付近 (地下水への入口付近) のバラツキ予想に適用可能性が高いという意味で本方法は有意義であると考えられる。

5. おわりに

ここで提示した FP 方程式モデルは DB モデルに比べて解法が幾分煩雑なうえ、パラツキが期待値から大きく外れない場合についてしか適用できないという欠点がある。しかし、DB モデルは解析解が知られている単純な 1 次元過程のみに適用が限られるのに対して、本モデルは解析解の有無に無関係な上、2 次元過程へも拡張可能であるという利点がある。従って、地下水に乗っての水平方向移流分散現象の解析への発展が期待できる。

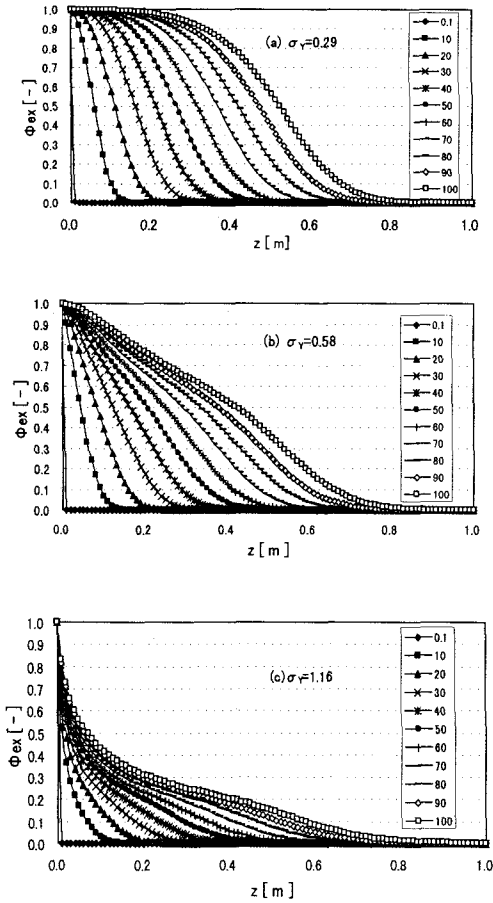


Fig. 1 濃度分布の期待値 (DB モデル) [凡例:時間 (h)]

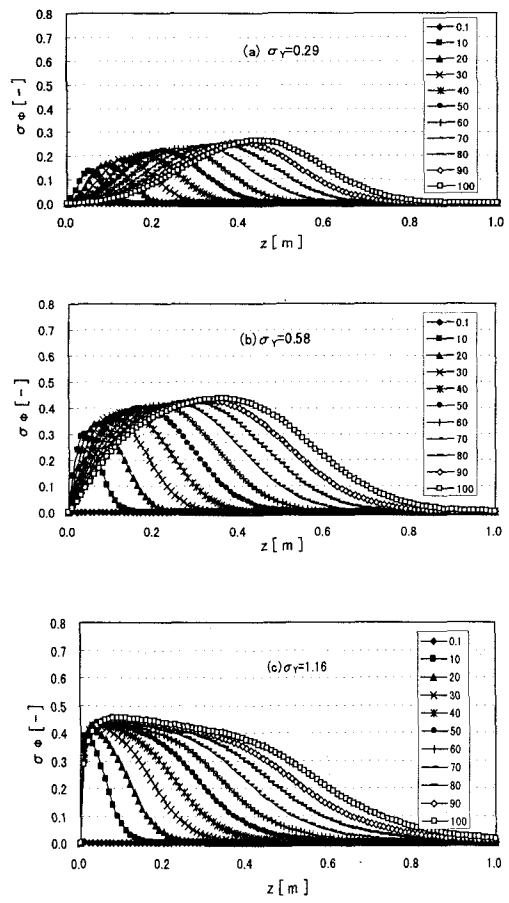


Fig. 2 濃度分布の標準偏差 (DB モデル) [凡例:時間 (h)]

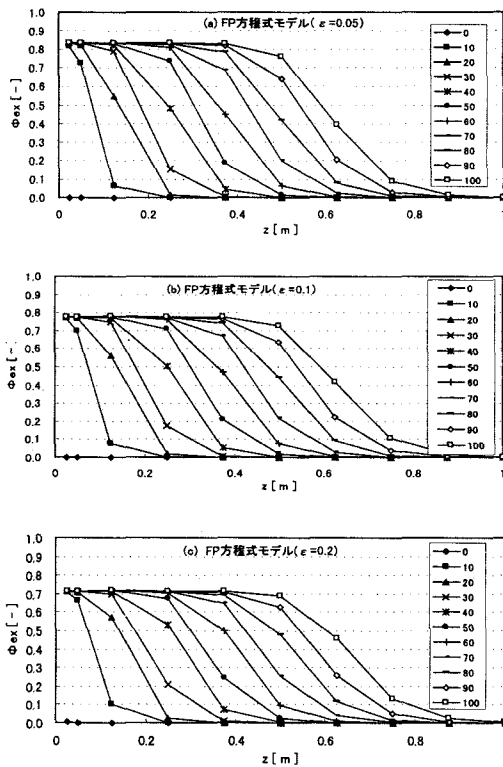


Fig.3 濃度分布の期待値(FP 方程式モデル)
[凡例:時間(h)]

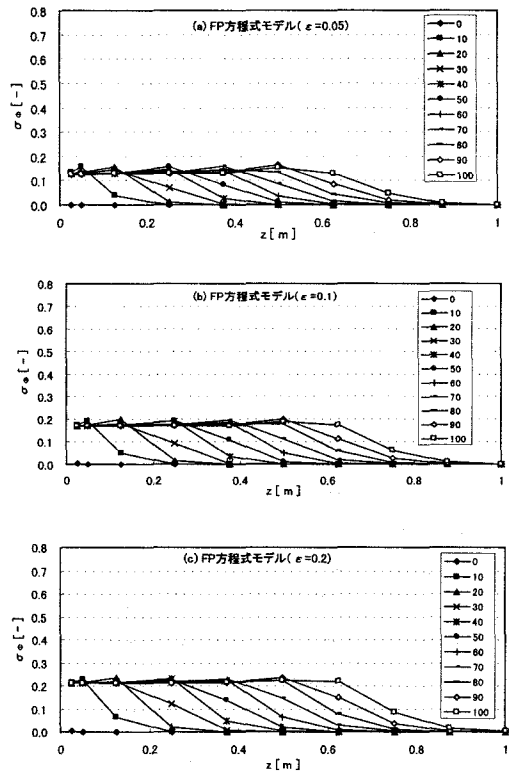


Fig.4 濃度分布の標準偏差(FP 方程式モデル)
[凡例:時間(h)]

<引用文献>

- 1) Dagan,G. and Bresler,E.: Soil Dispersion in Unsaturated Heterogeneous Soil at Field Scale: I Theory, Soil.Sci.Ame.J., 43,pp461-467, 1979.
- 2) Bresler,E. and Dagan,G. : Soil Dispersion in Unsaturated Heterogeneous Soil at Field Scale: II Applications, Soil.Sci.Ame.J., 43,pp461-467, 1979.
- 3) 地下水問題研究会: 地下水汚染論—その基礎と応用—, 共立出版, pp1-340, 1991.
- 4) 原口暢朗:水田における土壌物理性の不均一性の統計的評価に関する研究, 農業工学研究所報告, 38, pp133-204, 1999.
- 5) Nicholis,G. and Prigogine,I. (安孫子誠也, 北原和夫共訳): 複雑系の探求, みすず書房, pp165-214, 1993.
- 6) Haken,H.: Synergetics-An Introduction-3rd edition, Springer-Verlag, pp1-371, 1983.
- 7) Warrick,A.W., Mullen,G.J., and Nielsen,D.R. : Scaling Field-Measured Soil Hydraulic Properties Using a Similar Media Concept, Water Resources Research, 13(2), pp355-362, 1977.
- 8) Nicholis,G. and Prigogine,I. : Self-Organization in Nonequilibrium Systems, John Wiley & Sons, pp1-491, 1977.