

多孔性地質媒体における異常拡散現象のモンテカルロシミュレーション

Monte Carlo simulation of anomalous diffusion in geologic porous media

井川 貴之[1], 羽田野 祐子[2]

Takayuki Igawa[1], Yuko Hatano[2]

[1] 筑波大・工シ・環境開発, [2] 筑波大・機能工

[1] environmental development engineering, Tsukuba university, [2] Inst. Eng. Mech & Sys., Tsukuba Univ.

<http://www.kz.tsukuba.ac.jp/~hatano>

地下水汚染物質の物質輸送の支配方程式としては現在、移流拡散方程式が広く用いられている。しかし近年、ラボスケール、フィールドスケールの両方においてこの方程式では記述できないケースがしばしば観測されている。特に、物質濃度の空間プロファイルにテーリングとよばれる長い裾が現れる場合があり、この裾の部分は通常の移流拡散方程式では再現しにくいことが知られている。このテーリングのため、汚染源から距離が離れるにつれ（あるいは汚染開始後の経過時間が長期になるにつれ）従来のモデルでは濃度を実際より低く見積もることになり、新たなモデル化が必要とされている。この現象は「異常拡散」と呼ばれ、透水性媒体中だけでなく、アモルファス光半導体中の電子密度分布などにおいて広く観測されている。

本研究では異常拡散を再現するモデルとして、Hatano & Hatano(Water Resour. Res., 1998) のモデルを発展させたものを用いる。具体的には、地下水中の汚染物質が吸着を伴いつつ輸送される現象を一次元ランダムウォークによりモデル化する。地下水中の汚染物質粒子は一次元格子上的各サイトを吸着によりある時間トラップされ、次のサイトにジャンプする。ただし、ひとつのサイトにトラップされる時間 t は確率によって与えることにする。ここで、吸着時間 t の確率分布 $P(t)$ を

$$P(t)=A \exp(-B t)$$

(A, B: 定数)のように $P(t)$ の分散が有限の値を持つような式で与えた場合、従来の移流拡散方程式に帰着してしまう。そのため、本研究では t の分散が無限大になる次のような関数を、吸着時間の確率分布として用いることにする。

$$P(t) = A t^{-(B)}$$

A, B は定数である。A の値は規格化条件($P(t)$ をすべての t で積分して 1 になるようにする)により決まり、リーマンのツェータ関数となる。B の値は吸着時間の分布の形を決めている。B の値が 3 を超えると $P(t)$ の分散は有限の値になり、通常の移流拡散方程式に帰着する。一方、B の値が 3 以下では分散は無限大になる。以上のような性質を持った分布 $P(t)$ により吸着時間 t を確率的に発生させ、粒子数 2000 のモンテカルロシミュレーションを行った。さまざまな B の値について、分散が発散する場合とそうでない場合とにつき、汚染物質の濃度分布を計算した。次に、分散以外の統計量が濃度分布に与える影響を考慮するため、平均値による濃度分布の変化を計算した。B の値によって平均値が発散する場合(B が 2 以下)としない場合(B が 2 を超える)とがある。そのため、平均値についてもこれら二種類の場合につき、同様なシミュレーションを行った。以上の計算により、実際の数種類のカラム試験の結果を再現することができた。テーリングのある濃度分布を再現するには、平均値と分散とが両方とも無限大になるモデルを使うことが必要なことが明らかになった。