

AGE003-P08

会場:コンベンションホール

時間:5月27日 10:30-13:00

CTRW モデルを用いた吸着性物質の挙動予測のためのパラメータ設定手法 A method about setting CTRW model parameters for the prediction of the behavior of adsorptive substance

小田桐 康^{1*}, 山川 素子¹, 神尾 優仁¹, 羽田野祐子¹
Ko Odagiri^{1*}, Motoko Yamakawa¹, Yuto Kamio¹, Yuko Hatano¹

¹ 筑波大学大学院

¹ Graduate school of Tsukuba

近年地下水汚染の問題がますます話題を呼んでいる。汚染挙動を評価する手法の一つである連続時間ランダムウォークモデル (CTRW モデル) は、不均質かつ多孔質媒体における物質の複雑な挙動を再現することができるという点で注目されている。しかし、CTRW モデルを実際の現象に適用する際には、モデルパラメータ値を先験的に求めることが難しいという問題が存在しており実用には至っていない。

現在、我々が CTRW モデルを用いる場合、トライアルアンドエラーによって模索的にパラメータの値を決定しているが、この手法は選定基準が欠落している為に多くの労力を必要とする。一方で、古くから知られている評価手法として移流分散方程式 (ADE モデル) がある。これは不均質媒体における実際の物質挙動と食い違うという報告が為されているが、その反面、計測可能なパラメータで構成されているため比較的使用が容易という利点が存在する。本研究では、ADE と CTRW モデルのパラメータ関係性を明確にすることで、計測可能な実験値を用いて CTRW パラメータを選定する手法を構築することを目的とする。

ADE のパラメータには流速 v (m/s) と拡散係数 D (m^2/s), 遅延係数 R の三つがあり、それぞれ実験値をもとに求めることができる。一方で CTRW のモデルパラメータには複雑性の挙動を示す係数 a , 微小距離 dx (m), 微小時間 dt (s) の三つの値が必要である。CTRW では物質移動を粒子のジャンプとしてとらえ、各ジャンプ間の待ち時間 (t) に分布を与えることで、媒体中の不均一性を表現している。待ち時間とは各ジャンプの起こる前にそのサイトに留まる時間であり、本研究ではその確率密度関数として次のような関数を使用する。

$$P(t) = t^{-a}$$

式中の a の値は系の挙動に深く関わっており、 a の値によって系が通常の拡散で表されるか否かが決まる。また、 dx は各ジャンプで進む距離、 dt は各ジャンプに要する時間を表している。我々は以上のパラメータに着目して CTRW と ADE の両者間の数値実験を行った結果、二つの関係性は以下の式で表せることがわかった。

$$dx = D/v \cdot k \cdot \langle t \rangle$$

$$dt = D/v^2 \cdot k \cdot \langle t \rangle$$

項 k は系の複雑性を表す a によって近似される定数であり、数値実験により経験的に求めた。また、 $\langle t \rangle$ は待ち時間の平均値を表しており、 a の値によって一意に求まる。

加えて、汚染物質の拡散を観察する実験として室内カラム試験を行った。媒体には豊浦砂を、トレーサーとして吸着性のある亜鉛と鉛を用いて、吸着の強弱による汚染物質拡散挙動の変化を観察した。得られたデータをもとに上記式を用いて比較を行い、関係式の考察を行った結果、最も実験値に適合する a の値は遅延係数 R から推定できることが分かった。

キーワード: 土壌汚染, 異常拡散, 連続時間ランダムウォーク, 吸着, 不均質性, 重金属

Keywords: soil pollution, anomalous transport, continuous time random walk, adsorption, heterogeneity, heavy metal