

土中の溶質移流分散モデルにおける境界条件

取出伸夫*・坂井 勝*・斎藤広隆**

Boundary Conditions for the Convective-dispersive Solute Transport in Soils

Nobuo TORIDE*, Masaru SAKAI* and Hirotaka SAITO**

1. はじめに

前報で示した土中の水分移動と同様に、土中の溶質移動モデルにおいても、境界条件 (boundary condition, BC) と初期条件 (initial condition, IC) を適切に表現することは必要不可欠である。とりわけ、境界条件の適切なモデル化の重要性は古くから認識され、化学工学の分野を中心に、多孔質体中の溶質移動を対象に様々な議論が行われてきた (Danckwerts, 1953; Wehner and Wilhelm, 1956)。土壌物理の分野においても、土中の溶質移動に対する関心が高まった 1980 年代を中心に議論が行われた (van Genuchten and Parker, 1984)。しかし、この溶質移動の境界条件は、我が国における土壌物理の教科書、解説においてほとんど紹介されなかった課題であり、誤解や誤用が見られる問題のひとつである。特に、表面境界に対してフラックス条件を与えるべき溶質移動に対して、濃度境界条件を用いる誤用が多く見られる。

そこで本報では、土中の溶質移動に広く用いられる移流分散式 (convective-dispersive equation, CDE) を対象に、表面境界条件、下端境界条件、成層土の溶質移動の境界条件について、解析解と数値解を用いた具体的な計算例により解説する。また、流出液濃度に対する補正濃度として用いられるフラックス濃度に対して、有限長の土の下端濃度勾配をゼロと仮定した濃度と比較し、フラックス濃度の適用条件について考察する。なお、CDE の解析解は、溶質移動解析プログラム CXTFIT (Toride *et al.*, 1995) を入力インターフェース STANMOD (Šimůnek *et al.*, 1999) を用いて計算し、また数値解の計算には HYDRUS-1D を用いた (Šimůnek *et al.*, 2005)。

2. 表面境界条件

水分量と体積が変化しない土において定常水分流れが生じているとき、土粒子と反応しない溶質に対する鉛直

1次元 CDE は次式で与えられる。

$$\frac{\partial c_r}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c_r}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_r}{\partial z} \quad (1)$$

ここで、 D は分散係数 ($L^2 T^{-1}$)、 v は平均間隙流速 ($L T^{-1}$)、 c_r は溶質濃度 (ML^{-3})、 t は時間 (T)、 z は下向き正の深さ (L) であり、土表面を $z=0$ とする。なお、前報の水分移動の境界条件では上向き正の移動式を用いたが、本報では van Genuchten and Parker (1984) などの既往の研究に従い、下向き正の表記を用いた。土中溶液中の溶質密度を示す c_r は、後述するフラックス濃度 c_f (flux-averaged concentration) と区別する場合は、レジデント濃度 (resident concentration) とよばれる。本報では、レジデント濃度の記号を下添え字 r を用いてフラックス濃度と区別するが、両者の区別が必要な場合以外は単に濃度と記述する。(1)式の CDE は、上下端の境界条件と初期条件を与えると解が得られる。

2.1 フラックス境界条件

土表面においては、 $z=0^-$ の流入溶質フラックスと $z=0^+$ の土中の溶質フラックスが等しい。溶質流入フラックスは、通常、水分フラックス J_w (LT^{-1}) と流入溶液濃度 c_0 の積 $J_w c_0$ で表される移流フラックスに等しい。ここで、体積含水率を θ ($L^3 L^{-3}$) とすると $J_w = \theta v$ である。そのため、溶質フラックスの連続条件に基づく表面における境界条件は、溶液相の単位断面積あたりの流入フラックス vc_0 を用いて次式で与えられる。

$$-D \frac{\partial c_r}{\partial z} + vc_r \Big|_{z=0^+} = vc_0 \quad (2)$$

この表面の溶質フラックスを与える条件は、フラックス境界、第3種境界条件 (third-type BC)、あるいはコーシー型とよばれる。なお、この(2)式が成立するのは、分子拡散による溶質の流入が移流に対して無視できる場合である (2.3節参照)。

*三重大学大学院生物資源学研究所 〒514-8507 津市栗真町屋町 1577

**カリフォルニア大学リバーサイド校環境科学部

キーワード: 溶質移動, 境界条件, フラックス境界, 濃度境界, フラックス濃度

半無限大の土に対しては、下端境界として $z=\infty$ において濃度が変化しない、すなわち濃度勾配ゼロを仮定する。

$$\frac{\partial c_r}{\partial z}(\infty, t) = 0 \quad (3)$$

また、簡単のため、初期濃度をゼロとする。

$$c_r(z, 0) = 0 \quad (4)$$

このとき、(1)式のCDEの(2)-(4)式に対する解析解が得られる (van Genuchten and Alves, 1982)。

$$\frac{c_r(z, t)}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{z-vt}{2\sqrt{Dt}}\right) + \sqrt{\frac{v^2 t}{\pi D}} \exp\left[-\frac{(z-vt)^2}{4Dt}\right] - \frac{1}{2}\left(1 + \frac{vz}{D} + \frac{v^2 t}{D}\right) \exp\left(\frac{vz}{D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z+vt}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (5)$$

ここで、 $\operatorname{erfc}(z)$ は余誤差関数である。

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty \exp(-\xi^2) d\xi \quad (6)$$

なお、ラプラス変換を用いたCDEの解法は、Jury and Roth (2005, p. 31) の邦訳本に詳しい。

(1)式のCDEに対して、たとえば流入口から流出口の長さ L を特性長さとして、次の無次元距離と無次元時間を定義すると、異なるパラメータ値の結果を整理する上で便利である。

$$Z = \frac{z}{L} \quad (7)$$

$$T = \frac{vt}{L} = \frac{J_w t}{L\theta} \quad (8)$$

ここで、 $J_w t$ は積算流量、 $L\theta$ は長さ L の土中の水分量、すなわち1ポアボリュームである。さらに、流入溶液濃度 c_0 を用いて無次元濃度 $C_r = c_r/c_0$ を定義し、(7)、(8)式と共に(1)式に代入すると、無次元化したCDEが得られる (Jury and Horton, 2006, pp. 254-255)。

$$\frac{\partial C_r}{\partial T} = \frac{1}{P} \frac{\partial^2 C_r}{\partial Z^2} - \frac{\partial C_r}{\partial Z} \quad (9)$$

ここで、 P はベクレ数であり、次式で定義される。

$$P = \frac{vL}{D} \quad (10)$$

この P の値は、移流分散過程を特徴づける指標であり、分散時間スケール L^2/D (距離 L を分散 D で広がる時間) の移流時間スケール L/v (距離 L を間隙流速 v で移

動する時間) に対する比である。すなわち、 P が大きいほど、分散時間スケールが相対的に増加して、分散による移動が遅くなり、結果として分散の効果が小さくなる。

図-1 (a), (b) に、 $P=10$ と 50 の場合について、フラックス境界 (third-type) の濃度分布を無次元距離 Z と無次元時間 T に対して示す。この P の値は、たとえば $L=50$ cm, $v=10$ cm d⁻¹ に対して、それぞれ $D=50$ cm² d⁻¹, 10 cm² d⁻¹ が相当する。フラックス境界では、表面濃度が流入溶液濃度 c_0 になるまでに時間を要し、濃度が $z=0$ において不連続に変化する。これは、(2)式において、左辺のみに分散項を定義し、表面において溶質フラックスが連続すると仮定したことが原因である。この不連続は、 P が小さいほど長時間継続し、溶質はより下方へと分散により移動する。

時間 t における積算溶質流入量 I_s は $\theta v c_0 t$ である。これは、(5)式に基づき与えられる土中の全溶質量に等しい (van Genchten and Parker, 1984)。

$$I_s = \theta v c_0 t = \int_0^\infty \theta c_r(z, t) dz \quad (11)$$

この質量保存の関係は、流入溶液濃度 c_0 が時間変化する場合においても成立する。そのため、境界流入フラックスの(2)式が妥当である限り、このフラックス境界が適切な表面境界条件である。

2.2 濃度境界条件

(2)式のフラックスの代わりに、表面濃度を与える濃度境界条件は、第1種境界条件 (first-type BC), あるいはディリクレ型とよばれる。

$$c_r(0^+, t) = c_0 \quad (12)$$

(1)式のCDEの(3), (4), (12)式に対する解析解は、次式で与えられる (van Genuchten and Alves, 1982)。

$$\frac{c_r(z, t)}{c_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{z-vt}{2\sqrt{Dt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{vz}{D}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{z+vt}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (13)$$

(5)式と同様に、ラプラス変換を用いた解法は、Jury and Roth (2005, pp. 16-18) に示されている。

図-1 (c), (d) に、濃度境界 (first-type) に対する濃度分布を、フラックス境界の場合と同様に示す。 P が小さいと分散の効果が増加して溶質がより下方へ移動する傾向は、フラックス境界の場合と同じである。濃度境界の場合は、表面濃度が c_0 に固定される。そのため、表面濃度が c_0 より小さいフラックス境界に比べて、溶質流入

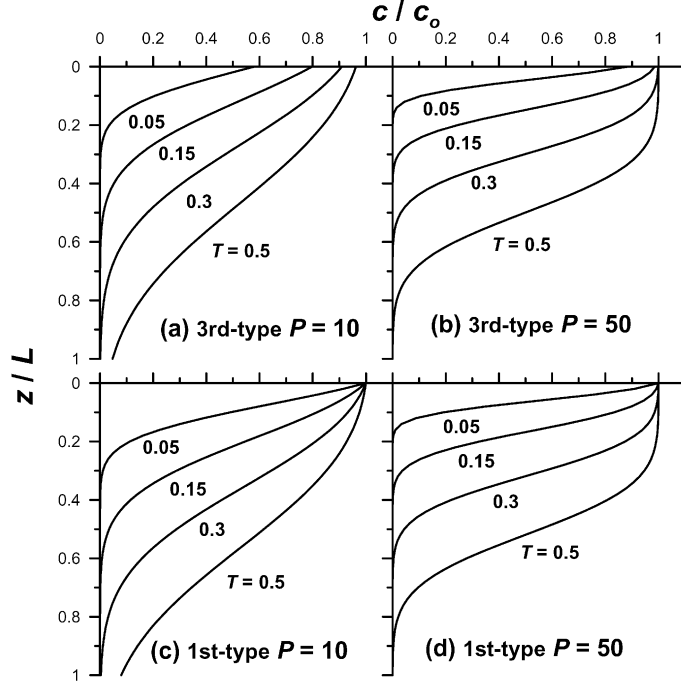


図-1 異なるペクレ数 P に対するフラックス境界条件 (third-type) と濃度境界条件 (first-type) における溶質濃度分布の変化。

量が多い。この濃度境界の場合の積算溶質流入量 I_s は、 $z=0^+$ の土表面の溶質フラックスを時間に対して積分して得られる。

$$\begin{aligned}
 I_s(t) &= \int_0^t \left(-\theta D \frac{\partial c_r(0^+, \tau)}{\partial z} + \theta v c_0 \right) d\tau \\
 &= - \int_0^t \theta D \frac{\partial c_r(0, \tau)}{\partial z} d\tau + \theta v c_0 t \quad (14)
 \end{aligned}$$

すなわち、濃度勾配による分散と移流による流入量の和として与えられる。この積算溶質流入量 I_s は、(11)式と同様に、(13)式に基づく土中の全溶質量に等しい。van Genuchten and Parker (1984) は、分散による流入量を土中の全溶質量と移流による流入量の差として与え、次式で相対マスバランス誤差 E を定義した。

$$\begin{aligned}
 E(t) &= \frac{1}{\theta v c_0 t} \left(\int_0^\infty \theta c_r(z, t) dz - \theta v c_0 t \right) \\
 &= - \frac{1}{\theta v c_0 t} \int_0^t \theta D \frac{\partial c_r(0, \tau)}{\partial z} d\tau \quad (15) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\pi \zeta}} \exp\left(-\frac{\zeta}{4}\right) + \frac{1}{\zeta} - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\zeta}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\zeta}}{2}\right)
 \end{aligned}$$

ここで、 $\zeta = v^2 t / D = P T$ である。これは、分散による溶質流入量の移流による流入量 $\theta v c_0 t$ に対する比である (右

辺第2式)。

図-2に、異なる P に対する相対マスバランス誤差 E を、無次元時間 T の関数として示す。 P が小さく分散が卓越するとき、初期の E は大きい。そして、時間の経過に伴い減少し、最終的にはゼロに近づく。これは、図-1(c)、(d) に示すように、表面濃度勾配が減少して、分散フラックスがゼロとなることに対応する。(2)式のフラックス条件の追加として生じるこの分散フラックスは、言い換えると、表面濃度を c_0 に保つために、表層に加えらるる溶質量である。これは、温度境界において、表面境界温度を一定に保つ条件において、表面に熱源が必要であることに相当する (Farlow, 1996)。すなわち、この濃度境界条件は、実現することが難しい条件であり、表面フラックスが(2)式の移流項で近似できる場合は、(15)式が過剰流入量を表す誤差となる。これが、van Genuchten and Parker (1984) が E を誤差とよんだ背景である。この濃度条件は、数学的に最も単純であること、熱伝導における多くの既存の解析解が利用できること等の理由で古くから用いられているが、多くの場合は、流入フラックスを過剰評価している点に留意する必要がある。

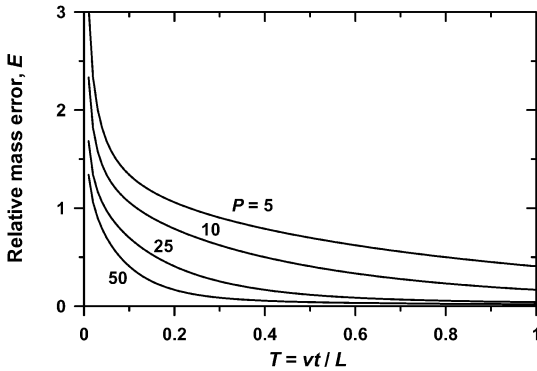


図-2 濃度境界条件における異なるペクレ数 P に対する相対マスバランス誤差 E の変化。

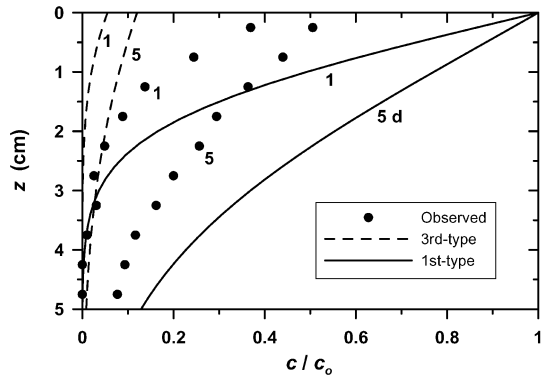


図-4 水分フラックスが小さい場合の Cl^- 濃度分布の実測値とフラックス境界 (third-type) と濃度境界 (first-type) の計算値の比較 ($D=1 \text{ cm}^2 \text{ d}^{-1}$, $v=1.5 \text{ cm d}^{-1}$)。

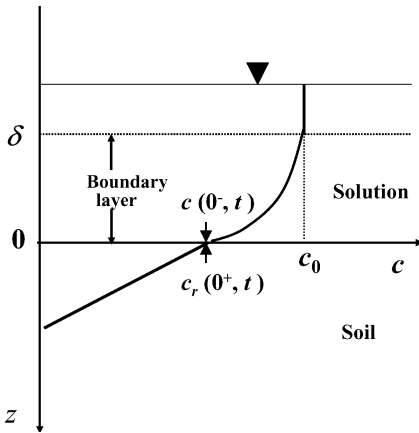


図-3 土表面に湛水を与えたときの表面濃度境界層の模式図。

2.3 表面境界層

ここまで示したように、流入溶質フラックスが移流フラックスで近似できるときは、(2)式のフラックス条件が適切な境界条件である。このとき、表面における濃度は不連続に変化する(図-1(a), (b))。しかし現実には、表面近傍において濃度が連続に変化する遷移層、すなわち濃度境界層が存在する。図-3は、土表面に湛水として溶液を与えたときの表面付近の濃度分布の模式図である。濃度境界層より上方は濃度 c_0 に保たれるが、分子拡散による溶質流入のため表層溶液濃度 $c(0^-, t)$ は低下する。境界層の厚さ δ や表層溶液濃度 $c(0^-, t)$ の低下量は、拡散による溶質流入量や上部の溶液の混合の程度に依存する。

土への流入水分フラックスが小さくなると、移流溶質

フラックスが減少して、分子拡散による溶質流入フラックスが無視できなくなる。図-4は、透水性の非常に小さい体積含水率 $\theta=0.95$ の Na ベントナイト試料を長さ 5 cm のカラムに充填し、 $c_0=0.1 \text{ mol c L}^{-1}$ の CaCl_2 溶液を湛水したときの試料内の Cl^- 濃度分布である(取出・中野, 1991)。この実験における Cl^- は、土粒子との反応のない溶質とみなすことができる。また、水分フラックスは約 1.5 cm d^{-1} である。図には、フラックス境界と濃度境界の分布について、土中の分散係数を θ が非常に大きいことを考慮して、水中の分子拡散係数とほぼ等しい $1 \text{ cm}^2 \text{ d}^{-1}$ と仮定した計算結果を併記した。水分フラックスの小さい条件では、フラックス境界は溶質流入フラックスを過小評価するため、カラム内の濃度も過小評価する。一方、表面濃度を流入液濃度 c_0 に保つ濃度境界条件では、特に表面近傍で濃度を過大評価する。これは、実際には分子拡散により溶質が試料内に流入し、表面濃度が流入溶液濃度 c_0 に比べて小さくなるためである。

このような水分フラックスが小さい条件における表面溶質フラックスは、(2)式と同様の表層溶液濃度 $c(0^-, t)$ による移流フラックスに、表面濃度 $c_r(0^+, t)$ と溶液濃度 c_0 の濃度差に比例した境界層からの流入フラックスを加えた次式で表すことができる。

$$\begin{aligned}
 -D \frac{\partial c_r}{\partial z} + v c_r \Big|_{z=0^+} \\
 = v c(0^-, t) + k [c_0 - c_r(0^+, t)]
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

ここで k は物質交換係数 (LT^{-1}) であり、境界層内の拡散係数を D_s としたとき、 $k = D_s / \delta$ である。図-3に示すように、表層溶液濃度 $c(0^-, t)$ と表面濃度 $c_r(0^+, t)$

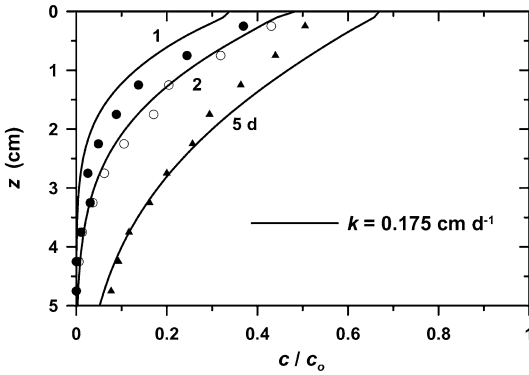


図-5 水分フラックスが小さい場合のCl⁻濃度分布の実測値と物質交換係数 k を用いて濃度境界層を考慮した計算値の比較 ($D=1 \text{ cm}^2 \text{ d}^{-1}$, $v=1.5 \text{ cm d}^{-1}$, $k=0.175 \text{ cm d}^{-1}$)。

は等しいので、(16)式の両辺の移流項は等しい。そのため、表面の濃度勾配を与えるノイマン型の境界条件が得られる (Bird *et al.*, 1960 ; van Genuchten and Parker, 1994)。

$$-D \frac{\partial c_r}{\partial z} \Big|_{z=0^+} = k[c_0 - c_r(0^+, t)] \quad (17)$$

この(17)式は、溶液が浸透して十分に時間が経過すると、図-1のフラックス境界の場合と同様に、表面濃度 $c_r(0^+, t)$ は溶液濃度 c_0 に等しくなり、表面の濃度勾配はゼロとなる。

図-5は、図-4に示したCl⁻濃度の測定値に対して、濃度境界層を考慮した(17)式における物質交換係数を用いて適合させた結果である ($k=0.175 \text{ cm d}^{-1}$)。計算における他のパラメータ値は図-4の計算と等しい ($D=1 \text{ cm}^2 \text{ d}^{-1}$, $v=1.5 \text{ cm d}^{-1}$)。濃度境界層を考慮することにより、ゆっくりと表層の濃度が増加しながら溶質が下方に浸透する実測値の傾向を、ほぼ再現できる。なお、この濃度境界層を考慮した境界条件(17)式を用いた計算には、一部修正したHYDRUS-1Dを用いた。

(17)式の境界条件は、より物理的なモデルではあるが、物質交換係数 k や境界層厚さ δ は、測定が困難なパラメータである。そのため、図-4のように水分フラックスが小さい条件の場合、表面濃度を土中の濃度を外挿して推定するなど補正して、時間の関数として与えて濃度境界条件を用いるのも、可能な近似であろう。なお、散水条件で水分フラックスが小さい場合も、分子拡散の効果が相対的に増加する点は同じだが、土表面に与える溶質量が灌水条件に比べて非常に小さいため、拡散移動量

が与える溶質量によって制限を受ける。この場合、(2)式のフラックス境界や、(17)式で溶液濃度 c_0 の低下を考慮する境界条件など、適切な表現についての検討が必要である。いずれの近似に対しても、適用範囲をよく検討して用いることが大切である。

3. 下端境界条件

3.1 フラックス濃度

ここまで、半無限大の土中の溶質移動に対して表面境界条件を議論してきた。一方、土中の溶液濃度の測定は、吸引により採取した土中溶液や、ライシメータの下端や排水管からの流出液に対して行う場合が多い。また、実験室内では、通常、土カラムからの流出液の濃度を測定する。この流出液濃度に対しては、ここまで用いてきた半無限大に対する解を補正したフラックス濃度を用いて表現する方法と、有限長の土に対して下端の境界を与えて計算する方法の2通りがある。前者のフラックス濃度は解析解に基づく手法であり、後者は数値計算による解析で用いられる。

Kreft and Zuber (1978) は、水分フラックス J_w と溶質フラックス J_s の比として、フラックス濃度 c_f を定義した。

$$c_f = \frac{J_s}{J_w} = c_r - \frac{D}{v} \frac{\partial c_r}{\partial z} \quad (18)$$

そして、水の流れと共に測定される流出液濃度は、(18)式で定義する水分フラックスによる重みをつけた溶質フラックスであると考えた。一方、ここまで用いてきた土中濃度 c_r は、土中溶液中の溶質の瞬間的な質量密度であり、フラックス濃度と区別するときにはレジデント濃度 (resident concentration) とよばれる (Jury and Roth, 2005, pp. 29-44)。土中に挿入したTDRプローブや4極ECセンサーにより測定する電気伝導度は、このレジデント濃度が対応する (Toride *et al.*, 2003)。

(18)式を t および z で微分し、(1)式の c_r を消去するように整理すると、

$$\frac{\partial c_f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c_f}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_f}{\partial z} \quad (19)$$

表面境界条件の(2)式に(18)式を代入すると、

$$c_f(0, t) = c_0 \quad (20)$$

同様に、半無限の下端境界条件(3)式は、

$$\frac{\partial c_f}{\partial z} + \frac{D}{v} \frac{\partial^2 c_r}{\partial z^2} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (21)$$

ここで、 $z = \infty$ において濃度勾配が深さ方向に滑らかに減少すると仮定すると、 c_r の2階微分もゼロになるので、

$$\frac{\partial c_r}{\partial z}(\infty, t) = 0 \tag{22}$$

また、初期濃度が深さによらず一定のときは $\partial c_r(z, 0) / \partial z = 0$ であるので、初期条件(4)式は、

$$c_f(z, 0) = 0 \tag{23}$$

すなわち、 c_f に関するCDEの(19)式に対する初期、境界条件(20)、(22)、(23)式は、 c_r に関するCDEの表面濃度境界の(3)、(4)、(12)式と数学的に等価である(Parker and van Genuchten, 1984)。そのため、流出液濃度を表すフラックス濃度に対しては、(13)式の解が用いられる。これは、フラックス境界の解の(5)式を(18)式の c_r に挿入すると、(13)式が得られることから確認できる。フラックス濃度が議論される以前の古い文献において、濃度境界を仮定した(13)式の解を流出液濃度に適用しているが(Nielsen and Biggar, 1962)、結果としてフラックス濃度の適用と同じ解析が行われていた点は興味深い。なお、初期条件が均一でない場合は $\partial c_r(z, 0) / \partial z \neq 0$ であるので、単に表面境界条件をフラックス境界から濃度境界に置き換えた解ではない点は注意が必要である(Toride *et al.*, 1993)。

3.2 有限長の土の下端境界条件

Parlange *et al.* (1992)は、下端の濃度勾配が流出液に及ぼす影響を数学的に調べたが、流出端における溶質の境界条件は、確固たる物理的な根拠を基に定めることが難しい。しかし、流出端における溶質の十分な混合により、下端における濃度勾配が消滅すると仮定すること

は、妥当であろう。そのため、通常、下端境界には、濃度勾配ゼロの条件が用いられる。

$$\frac{\partial c_r}{\partial z}(L, t) = 0 \tag{24}$$

土中の溶質移動に対して数値計算を行う場合は、常に有限の計算領域が対象であるため、通常、この濃度勾配ゼロの条件が下端に用いられる。有限長の土に対する(2)式のフラックス境界、この(24)式の下端境界、そして(4)式の初期条件に対するCDEの解析解は、Brenner (1962)によって得られている。しかし、無限級数の和で与えられる解は、収束の検討が必要である。一般に、拡散方程式は、両無限や半無限領域に対しては、フーリエ変換やラプラス変換を用いて厳密解が比較的得やすいが、有限領域に対しては、瞬間的に影響が無限遠まで及ぶ拡散方程式の性質のため、何らかの近似を用いたり、また得られる解が無限級数の和となる場合が多い。本報では、(24)式の境界条件の評価には、Brenner (1962)の解析解ではなく、数値解を用いる。

図-6は、異なるペクレ数 P に対する無次元時間 $T = 0.6$ における濃度の分布の比較である。3種類の濃度は、(13)式に等しいフラックス濃度と(5)式の半無限大の土に対するレジデント濃度、有限長の土に対する(2)式のフラックス境界と(24)式の濃度勾配ゼロに対する濃度である。分散の非常に大きい $P = 2$ の条件では、図-1の条件に比べてさらに下方へ溶質が未広がりになり、またフラックス濃度とレジデント濃度の違いは大きい。下端濃度勾配ゼロの濃度は、下端から $z/L = 0.3$ 付近まで半無限大のレジデント濃度との違いが生じているが、下端ではフラックス濃度に近づく。一方、 $P = 10$ の条件では、フラックス濃度とレジデント濃度の違いは小さくなる。

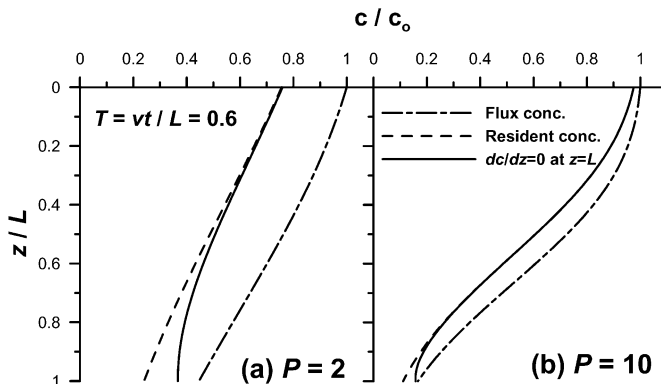


図-6 無次元時間 $T = 0.6$ におけるフラックス濃度 c_f 、レジデント濃度 c_r 、下端濃度勾配ゼロの濃度分布の比較。

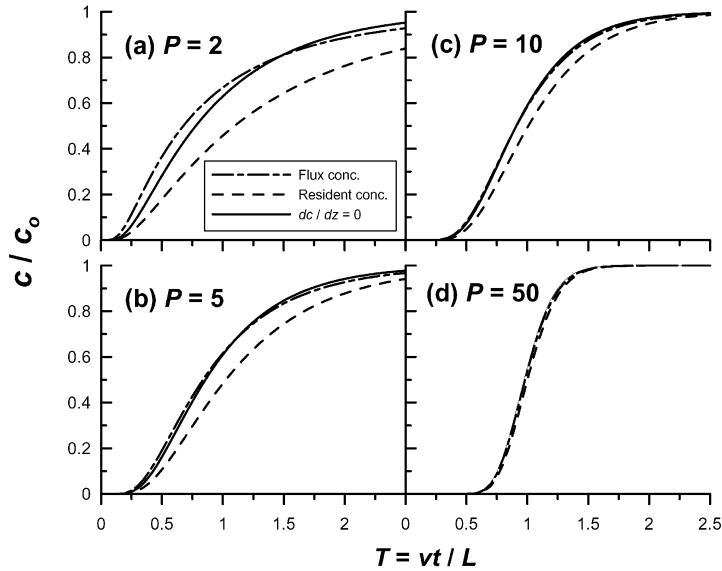


図-7 異なるペクレ数 P に対するフラックス濃度 c_f 、レジデント濃度 c_r 、下端濃度勾配ゼロの $z=L$ におけるブレイクスルーカーブの比較。

そして下端濃度勾配ゼロの濃度は、半無限大のレジデント濃度と $z/L=0.9$ 付近で違いが現れ、下端ではフラックス濃度にはほぼ等しい。

図-7は、異なるペクレ数 P に対する $z=L$ における3種類の濃度変化、すなわちブレイクスルーカーブ (BTC) である。 $P \geq 5$ でフラックス濃度と下端濃度勾配ゼロの濃度はほぼ一致するが、 $P=5, 10$ では、半無限大のレジデント濃度は濃度の増加が遅い。そして、 $P=50$ における3種類の濃度は、ほぼ等しくなる。半無限大の解に対する(10)式によるフラックス濃度の補正と下端濃度勾配ゼロは、それぞれ異なる物理的な仮定であるが、極端に P が小さい条件を除き両者の濃度が良く一致する点は興味深い。

一般に、分散係数 D は、分散長を λ として $D=\lambda v$ と表す。これを(10)式に代入すると、 $P=L/\lambda$ である。分散長 λ は、多くの場合、実験室の充填土カラムの場合は数 mm 程度から 2 cm 程度、圃場では 5 cm から 20 cm である (Jury and Roth, 2005, p. 226)。一方、CDE の成立条件である平均流れの断面方向の溶質混合が進行するためには、観測位置 L は λ に対してある程度大きい必要がある (Jury and Roth, 2005, pp. 225-226)。充填土と圃場における CDE の成立条件は異なると考えられるが、仮にどちらも $L > 10\lambda$ と考えると、CDE が良く適合するペクレ数の条件は $P > 10$ である。そのため、通常の $P > 10$ の条件では、フラックス濃度と濃度勾配ゼロの濃度の適

合は良いと考えられる。

前述のとおり、 P の値は、移流分散過程を特徴づける。この図-7において、 P が大きいほど、分散の効果が小さくなり、BTC の勾配が大きい。一定の v と D の土中に溶質前線が移動するとき、観測距離 L が増加すると P は増加する。すなわち、図-7は、異なる観測距離 L における BTC とみなせる。溶質前線は、時間 t の経過と共に分散により広がる。言い換えると、前線の広がり、観測距離 L が大きいほど大きい。しかし、図-7に示すように、無次元時間 T に対する溶質前線の相対的な広がり、観測距離 L が大きいほど小さくなる点が CDE の特性である。

4. 成層土

ここまで、均一な土を対象に議論してきたが、成層土の場合は、境界において溶質フラックスが連続する。境界位置 $z=z_1$ における溶質フラックスの連続条件は、それぞれの層を添え字 1, 2 で区別すると次式で与えられる (Leij *et al.*, 1991)。

$$\begin{aligned} -\theta_1 D_1 \frac{\partial c_r}{\partial z} + \theta_1 v_1 c_r \Big|_{z=z_1^-} \\ = -\theta_2 D_2 \frac{\partial c_r}{\partial z} + \theta_2 v_2 c_r \Big|_{z=z_1^+} \end{aligned} \quad (25)$$

ここで、境界においては水分フラックスも連続するた

め、 $\theta_1 v_1 = \theta_2 v_2$ である。この式(2)の条件においては、分散係数 D と体積含水率 θ が境界面で不連続に変化するため、濃度も境界面において不連続となる。これは、表面境界のフラックス条件(2)式において、流入溶液濃度 c_0 と表面濃度が不連続に変化することに等しい(図-1(a), (b))。しかし、現実の成層土の境界では、図-3に示した表面の境界層に相当する遷移層が存在し、濃度は連続的に変化する。

図-8は、上層が $\theta=0.6$, $D=20\text{ cm}^2\text{ d}^{-1}$, $v=20\text{ cm d}^{-1}$ 、下層が $\theta=0.4$, $D=1,500\text{ cm}^2\text{ d}^{-1}$, $v=30\text{ cm d}^{-1}$ で定常水分流れが生じている成層土に対して、濃度 c_0 の溶液を与えたときの濃度分布である。分散係数の大きな下層では、分散による溶質フラックスが上層に比べて大きいため、境界に達した溶質前線は、境界面において濃度が大きく減少する。なお、数値計算においては、各パラメータの空間分布を与えて、各節点における溶質フラックスの連続条件に基づく連立方程式を解くため、成層土の境界に対して、改めて式(2)を適用することはない。また、HYDRUSによる計算では、節点間の要素に対して節点の平均値の分散係数 D と体積含水率 θ を用いて計算を行う。そのため、境界面での濃度は、式(2)の不連続な濃度分布に比べて段階的に変化するが、節点間隔を小さくすると、境界面の直上、直下における濃度変化が大きくなる。

5. おわりに

土中の溶質移動に対する移流分散モデルにおいても、適切な境界条件を選択することは必要不可欠である。表面境界条件には、ある程度の水分フラックスが生じてい

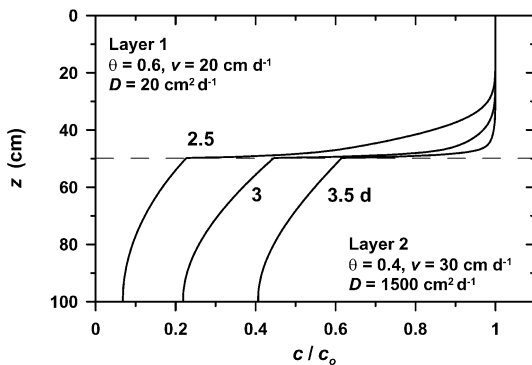


図-8 定常水分流れが生じている成層土(上層: $\theta=0.6$, $D=20\text{ cm}^2\text{ d}^{-1}$, $v=20\text{ cm d}^{-1}$, 下層: $\theta=0.4$, $D=1,500\text{ cm}^2\text{ d}^{-1}$, $v=30\text{ cm d}^{-1}$) 中の濃度分布の変化。

て、流入溶質フラックスが移流項で表現できる場合は、フラックス境界が適切である。フラックス境界による解は、移流による溶質流入量が土中の溶質増加量と等しいことを確かめることができる。しかし、表面境界における濃度は不連続に変化し、表層の濃度は、流入溶液濃度に比べて小さくなる。一方、濃度境界は、表層に溶質を追加して指定した濃度に保つ条件であるため、溶質流入量を過大評価する。水分フラックスが小さく、分子拡散による溶質の流入が卓越する場合は、フラックス境界は溶質流入量を過少評価し、流入溶液濃度を用いた濃度境界は過大評価する。そのため、表面の濃度境界層を考慮して拡散による流入を表現する、あるいは表面濃度を補正して濃度境界で近似することが必要である。

土からの流出液濃度は、半無限大のフラックス境界に対する解析解を補正し、水分フラックスと溶質フラックスの比として与えるフラックス濃度で表現する。なお、通常用いる土中溶液中の溶質の質量密度である濃度は、レジデント濃度とよばれる。一方、有限長の土を対象に計算する数値計算においては、下端境界条件として濃度勾配ゼロの条件を用いる。フラックス濃度と下端濃度勾配ゼロの下端濃度は、分散が卓越した極端にペクレ数が小さい条件を除き、良く一致する。

本報では、CDEの解析解と数値解を用いて境界条件の議論を行った。精度の高い数値計算のプログラムを身近に利用できる現在は、解析解を用いる機会は以前よりは減っていると思われる。しかし、物理的な意味を持つ解析解は、ここで示した境界条件の考察、土中の溶質量の計算、また数値計算の計算結果の確認等に有用である。また、溶質移動のパラメータは、測定した濃度変化から推定する機会が多いが、安定した計算結果の求められる逆解析には解析解が適している。解析解と数値解は、目的に応じた使い分けが重要である。

引用文献

- Bird, R.B., Stewart, W.E. and Lightfoot, E.N. (1960): Transport phenomena. John Wiley & Sons, New York.
- Brenner, H. (1962): The diffusion model of longitudinal mixing in beds of finite length. Numerical values. Chem. Eng. Sci., **17**: 229-243.
- Danckwerts, P.V. (1953): Continuous flow systems. Chem. Eng. Sci., **2**: 1-13.
- Farlow, S.J. (1996): 偏微分方程式—科学者・技術者のための使い方と解き方—(伊理正夫・伊理由美訳), 朝倉書店, 東京.
- Jury, W.A. and Roth, K. (2005): 土壌中の溶質移動の

基礎（筑紫二郎訳），九州大学出版会。

- Jury, W.A. and Horton, R. (2006) : 土壌物理学—土中の水・熱・ガス・化学物質移動の基礎と応用—（取出伸夫 監訳，井上光弘・長裕 幸・西村 拓・諸泉利嗣・渡辺晋生訳），pp. 223-276, 築地書館，東京。
- Kreft, A. and Zuber, A. (1978) : On the physical meaning of the dispersion equation and its solutions for different initial and boundary conditions. *Chem. Eng. Sci.* **33** : 1471-1480.
- Leij, F.J., Dane, J.H. and van Genuchten, M. Th. (1991) : Mathematical analysis of one-dimensional solute transport in a layered soil profile. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **55** : 944-953.
- Nielsen, D.R. and Biggar, J.W. (1962) : Miscible displacement : III. Theoretical considerations. *Soil Sci. Soc. Am. Pro.*, **26** : 216-221.
- Parker, J.C. and van Genuchten, M. Th. (1984) : Flux-averaged and volume-averaged concentrations in continuum approaches to solute transport. *Water Resour. Res.*, **20** : 866-872.
- Parlange, J.-Y., Starr, J.L., van Genuchten, M. Th. Barry, D.A. and Parker, J.C. (1992) : Exit condition for miscible displacement experiments. *Soil Sci.*, **153** : 165-171.
- Šimůnek, J., van Genuchten, M. Th. and Sejna, M. (2005) : The HYDRUS-1D software package for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media. Version 3.0. HYDRUS Software Series 1, Dep. of Environmental Sciences, Univ. of California Riverside, Riverside, CA.
- Šimůnek, J., van Genuchten, M. Th., Sejna, M., Toride and Leij, F.J. (1999) : The STANMOD computer software for evaluating solute transport in porous media using analytical solutions of convection-dispersion equation. Versions 2.0, International Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines, Golden, Colorado.
- 取出伸夫・中野政詩（1991）：Ca²⁺ Na⁺ イオン交換を伴う粘土中の溶質移動機構と特性，土壌の物理性，**62** : 311.
- Toride, N., Leij, F.J. and van Genuchten, M. Th. (1993) : Flux-averaged concentrations for transport in soils having nonuniform initial solute distributions, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **57** : 1406-1409.
- Toride, N., Leij, F.J. and van Genuchten, M. Th. (1995) : The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. *U.S. Salinity Laboratory Research Report 137*, 1-121, Riverside CA.
- Toride, N., Inoue, M. and Leij, F.J. (2003) : Hydrodynamic dispersion in an unsaturated dune sand, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **67** : 703-712.
- van Genuchten, M. Th. and Alves, W.J. (1982) : Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. USDA Tech. Bull. 1661. U.S. Gov. Print. Office, Washington, DC.
- van Genuchten, M. Th., and Parker, J.C. (1984) : Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **48** : 703-708.
- van Genuchten, M. Th. and Parker, J.C. (1994) : Reply to "Comments on 'Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns'". *Soil Sci. Soc. Am. J.*, **58** : 991-993.
- Wehner, J.F. and Wilhelm, R.H. (1956) : Boundary conditions of flow reactor. *Chem. Eng. Sci.*, **6** : 89-93.

要 旨

土中の溶質移動の移流分散式 (CDE) を対象に、表面境界条件、下端境界条件、成層土の境界条件について、解析解と数値解を用いた計算例により解説した。表面境界条件は、流入溶質フラックスが移流項で表現できる限りフラックス境界が適切であること、濃度境界は流入溶質フラックスを過大評価すること、水分フラックスが非常に小さい場合には濃度境界層の考慮が必要なことを示した。また、流出液濃度に対する補正濃度であるフラックス濃度は、通常の条件では、有限長の土の下端濃度勾配をゼロと仮定した濃度と良く一致することを示した。

受稿年月日：2006年8月30日

受理年月日：2006年9月15日