

土石系再生製品の環境安全性評価のための 化学物質溶出シミュレーション

石森洋行¹, 遠藤和人¹, 肴倉宏史¹, 山田正人¹, 大迫政浩¹

¹独立行政法人国立環境研究所 循環型社会・廃棄物研究センター

〒305-8506 茨城県つくば市小野川 16-2

(P) 029-850-2278, (F) 029-850-2016, (E-mail) ishimori.hiroyuki@nies.go.jp

概要：廃棄物や副産物を原料とする再生製品を環境中で安全に有効利用していくための、合理的な評価方法の提案が待たれている。本発表では、再生製品からの化学物質の溶出過程と、溶出した化学物質が地球化学的な相互反応を伴いながら環境中を流れる物質移行過程を組み合わせた数値計算モデルを示すとともに、本モデルを用いた再生製品の環境評価例を紹介する。

キーワード：再生製品、化学物質、溶出、化学平衡計算、多成分移流拡散解析

1. はじめに

廃棄物や副産物を原料とする再生製品を環境中で安全に有効利用していくための、合理的な評価方法の提案が待たれている。環境省告示第46号試験などの公定法やスラグ類JIS試験法は再生製品の品質を管理する上で有効な評価手段となり得るが、再生製品を環境中で利用したときの安全性はこれらの試験法のみでは判断が難しく、利用シナリオ（再生製品の使用条件や規模、利用環境、利用期間など）を勘考した上での評価が必要になる。

筆者らは、再生製品の利用シナリオに基づいた環境安全性評価を実現するために、シリアルバッチ試験と物質移動シミュレーションを組み合わせた評価系の構築を目指している。このシリアルバッチ試験では再生製品からの

化学物質の溶出メカニズムと溶出量の長期的な挙動の把握が可能であり¹⁾、それらを入力条件とした物質移動シミュレーションは現実的な溶出挙動を再現するとともに、再生製品の表面と中心での洗い流し効果の違いを考慮できる²⁾。さらに、化学平衡計算を統合することで、再生製品から溶出した化学物質の存在形態まで明らかにでき、化学物質の溶出に伴うpHの変化や、その物質が環境中で沈殿物として析出するのかなど、環境影響評価に関する様々な議論が可能となる。

本文では、COMSOL Multiphysics ver3.5aを利用した(1)再生製品からの化学物質溶出モデルとそれを利用した環境影響評価事例、(2)化学平衡計算モデルとそれを利用した化学物質存在形態解析事例、(3)溶出モデルと化学平衡計算モデル統合した再生製品の環境影響評価事例を示す。

2. 化学物質溶出シミュレーション

2.1 目的

図1のように再生製品が地盤材として利用された場合を考える。再生製品が雨水に曝されると、化学物質の溶出が懸念される。再生製品を一般環境中で安全に利用するためには、再生製品からの化学物質の溶出量を明らかにするとともに、溶出した化学物の拡散範囲を把握しておく必要がある。物質移動シミュレーションはその有効な手段のひとつである。ここでは、再生製品からの化学物質溶出モデ

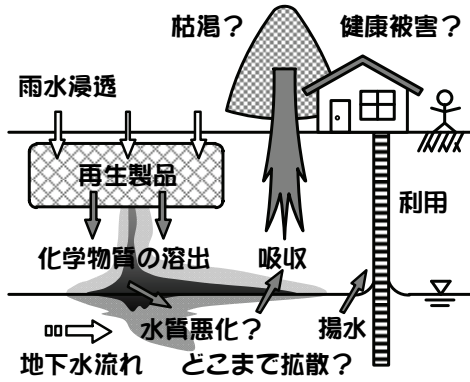


図1 再生製品の環境安全性評価のための将来予測シミュレーション

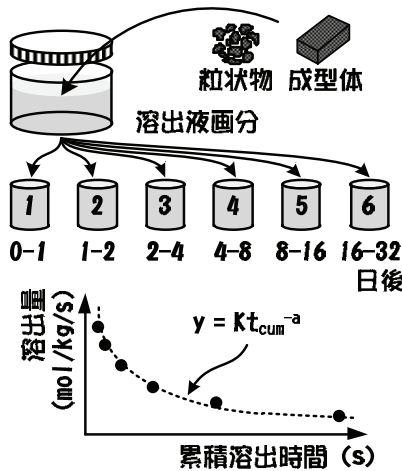


図2 溶出特性評価のためのシリアルバッチ試験と溶出パラメータの決定方法

ると、環境中での物質移動モデルを組み合わせたシミュレーションモデルを紹介する。

2.2 再生製品からの化学物質溶出モデル

再生製品からの化学物質の溶出メカニズムを捉える試験方法には、例えば肴倉らの提案するシリアルバッチ試験がある^{1),2)}。シリアルバッチ試験とは繰り返し溶出試験であり、ワンバッチで得られる溶出量 (mol/kg/s) と累積溶出時間 (s) の関係を整理することで、試験結果が取りまとめられる。図2はシリアルバッチ試験の概要と試験結果の例を示す。

通常、再生製品からの化学物質の溶出量は溶出時間とともに少なくなる。そのプロファイルが溶出時間の累乗則に従うと仮定した場合、

単位質量の再生製品からの化学物質 i の溶出量 j_i (mol/kg/s) は、

$$j_i = K_i t_{\text{cum}i}^{-a_i} \quad (1)$$

として表わされる。 $t_{\text{cum}i}$: 累積溶出時間 (s)、 K_i , a_i : 化学物質 i に関する溶出パラメータであり、試験結果である溶出量 j_i と累積溶出時間 $t_{\text{cum}i}$ の関係を両対数軸上にプロットし、線形回帰式にあてはめたときの切片と傾きから溶出パラメータ K_i と a_i を得る。

2.3 溶出モデルを考慮した物質移動解析

再生製品を地盤材の一部として利用した場合に、そこから溶出する化学物質の地盤内挙動の予測モデルを考えてみる。

化学物質の地盤内挙動は、次の浸透流方程式と移流分散方程式により表わされる。

$$C_w \frac{\partial p_w}{\partial t} + \nabla \cdot \left[-\frac{k_{rw} \mathbf{K}}{\mu_w} (\nabla p_w + \rho_w g \nabla z) \right] = 0 \quad (2)$$

$$c_{wi} C_w \frac{\partial p_w}{\partial t} + \theta_w R_i \frac{\partial c_{wi}}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_{wi}) + \mathbf{u}_w \nabla c_{wi} = J_i \quad (3)$$

ここで、 p_w : 水の圧力 (Pa)、 ρ_w : 水の密度 (kg/m³)、 μ_w : 水の粘性係数 (Pa s)、 C_w : 比水分容量 (1/Pa)、 k_{rw} : 透水係数比、 \mathbf{K} : 固有透過度テンソル (m²)、 c_{wi} : 化学物質 i の濃度 (mol/m³)、 D_i : 化学物質 i の分散係数 (m²/s)、 R_i : 化学物質 i の遅延係数、 J_i : 化学物質 i の源泉量 (mol/m³/s)、 g : 重力加速度 (= 9.82 m/s²) を表わす。水の透水速度 \mathbf{u}_w はダルシーの法則を準用し、

$$\mathbf{u}_w = -\frac{k_{rw} \mathbf{K}}{\mu_w} (\nabla p_w + \rho_w g \nabla z) \quad (4)$$

として計算される。なお、比水分容量 C_w と透水係数比 k_{rw} は van Genuchten 式³⁾に従うものとし、また分散係数 D_i は J. Bear 式⁴⁾、遅延係数 R_i は Langmuir 式⁵⁾に従うものとする(各モデルの説明は紙面の関係上省略するが、COMSOL Multiphysics ver3.5a にはこれらのモデルは初期導入されている)。

次に、再生製品からの化学物質の溶出量 j_i

を、移流分散方程式中の源泉量 J_i に組み込むことを考える。源泉量 J_i は、土の乾燥密度 ρ_d と溶出量 j_i の積であるから

$$J_i = \begin{cases} \rho_d K_i t_{\text{cum}i}^{-a_i} & \text{For } c_{wi}/c_{wi\text{max}} < 1 \\ 0 & \text{For } c_{wi}/c_{wi\text{max}} = 1 \end{cases} \quad (5)$$

ここで、累積溶出時間 $t_{\text{cum}i}$ は

$$\frac{\partial t_{\text{cum}i}}{\partial t} = \begin{cases} 1 & \text{For } c_{wi}/c_{wi\text{max}} < 1 \\ 0 & \text{For } c_{wi}/c_{wi\text{max}} = 1 \end{cases} \quad (6)$$

として与えられる。溶出とは、通常再生製品の内外の濃度差に起因して生じるものであり、溶出を続け、再生製品近傍がある飽和濃度 $c_{wi\text{max}}$ に達したとき溶出は一時的に停止する。また清浄な地下水などのフラッシングにより再生製品近傍の濃度が低下した場合には、再び溶出が始まる。このように、式(5)で定義される源泉量は、再生製品近傍の濃度 c_{wi} が飽和濃度 $c_{wi\text{max}}$ に達しているか否かでスイッチする関数となっている。COMSOL Multiphysics では、このようなスイッチ関数は、組込関数である IF 関数やヘヴィサイド関数を用いることで容易に表現できる。

化学物質が n 種類の場合、未知量は圧力 p_w と、濃度 c_{wi} ($i = 1, 2, \dots, n$)、および累積溶出時間 $t_{\text{cum}i}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) の $2n+1$ 個となる。それに対して、解くべき方程式は式(2)と、式(3)

($i = 1, 2, \dots, n$)、および式(6) ($i = 1, 2, \dots, n$) の $2n+1$ 個であり、方程式系は閉じる。

求解は、まず所定の境界条件のもと式(2)を解き、得られた圧力分布 p_w からダルシーの法則を用いて流れ場 \mathbf{u}_w を算出し、それをもとに式(3)と式(6)を連立して解き、濃度分布 c_{wi} と累積溶出時間 $t_{\text{cum}i}$ を得る流れとなる。

2.4 解析例

ある再生製品を盛土として利用した場合の、再生製品から溶出する化学物質が近隣環境を果を検討した解析例を示す。

図3のように、地盤上に再生製品の盛土を行った状況を解析断面とする。地表面ならびに盛土表面は降雨に曝されている。また、地盤表面から深度 4.5 m の位置には地下水面が

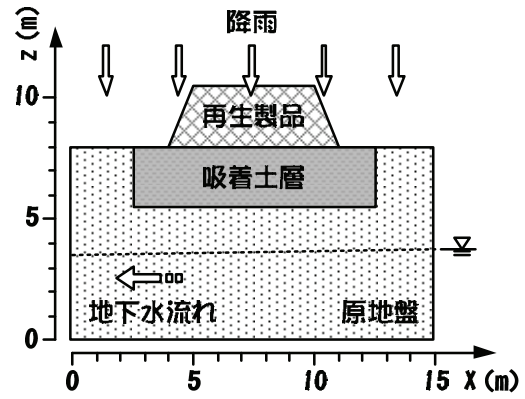


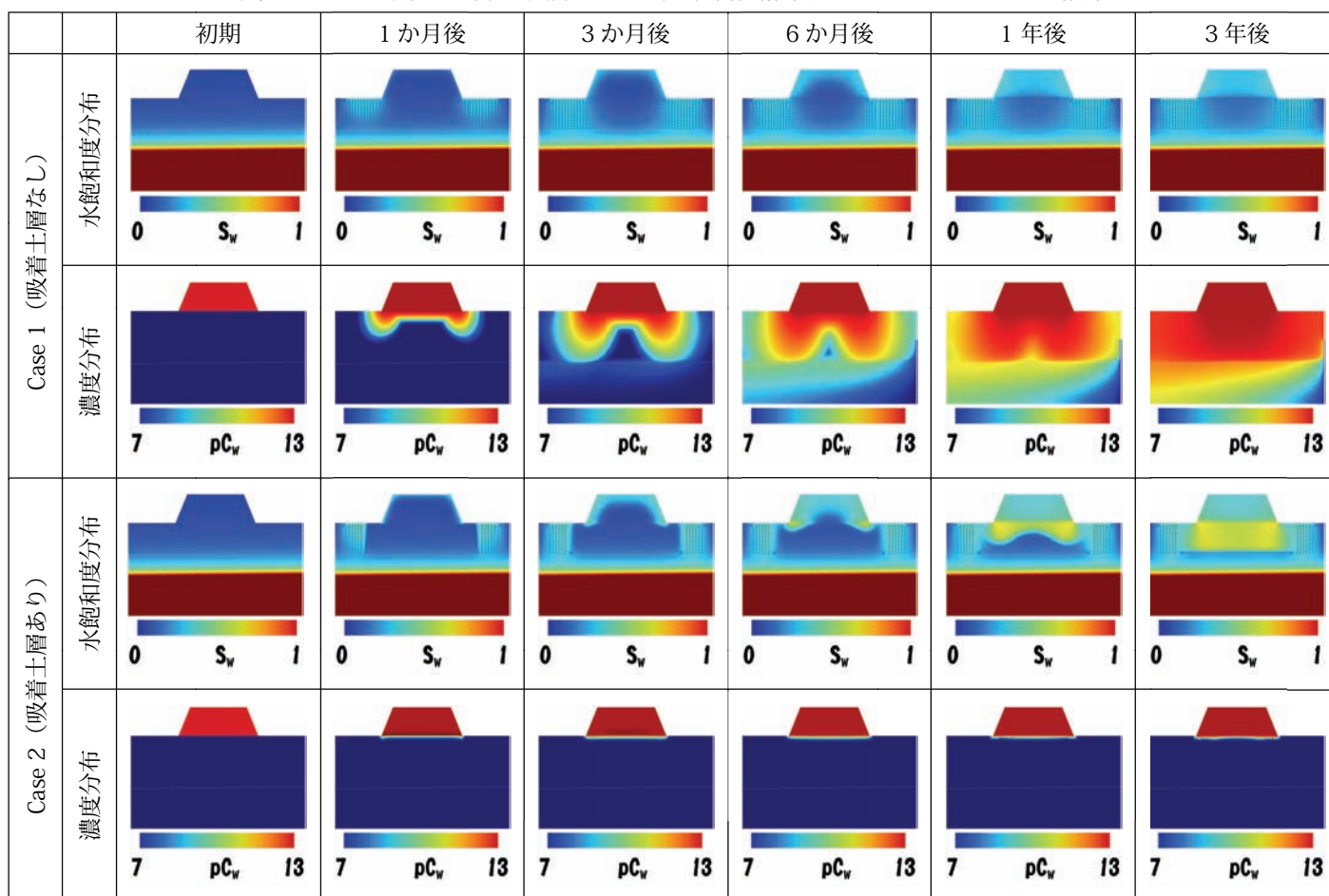
図3 化学物質溶出シミュレーションの例

あり、解析断面の右端から左端の方向へ動水勾配 1/100 で地下水が流れている。どのように拡散するのかを予測するとともに、その拡散防止対策としての吸着土層の効果を見る。

初期条件は、降雨前を想定し、地下水面の位置を基準とする静水圧を地盤中の初期水圧分布として与えた。また間隙水の初期濃度には、 $c_w = 10^{-4} \text{ mol/m}^3$ の条件を与えた。境界条件に関して、解析断面の左端と右端は所定位置に地下水面をもつ圧力固定条件として、盛土を含む地表面は浸出面境界条件とした。濃度に関しては、解析断面の左端および盛土を含む地表面は濃度勾配ゼロ条件とし、右端は濃度固定条件として $c_w = 10^{-4} \text{ mol/m}^3$ の条件を与えた。

解析は Case 1 と Case 2 の二通りの条件を実施し、前者は地盤上に直接再生製品を盛土した場合、後者は地盤の一部を吸着土層に置き換えてその上に再生製品を盛土した場合を想定した。再生製品からの化学物質の拡散防止対策としての吸着土層の効果を見るためである。計算条件は年間降雨量を 600 mm、縦分散長 α_L を 1 m、横分散長 α_T を 0.1 m、実効拡散係数 D_e を $3 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ とした。透水係数 k_{wsat} は原地盤で $1 \times 10^{-4} \text{ m/s}$ 、吸着土層で $1 \times 10^{-6} \text{ m/s}$ 、再生製品で $1 \times 10^{-5} \text{ m/s}$ とし、間隙率はいずれの材料においても 0.3 とした。再生製品からの化学物質溶出パラメータは、 $K = 279.3$ と $a = -1.61$ を用い、これらはシリアルバッチ試験より決定した値である。吸着土層の最大吸着量 β は 1.91 mol/kg とし

表 1 盛土に用いた再生製品からの化学物質溶出シミュレーションの結果



た。分散長や最大吸着量の値は、J. Bear 式による分散係数や Langmuir 式による分配係数の決定に使用される^{4),5)}。

表 1 に解析結果を示す。解析断面内の土壌水分量と化学物質濃度をそれぞれカラーマップで表現し、初期から 3 年後まで時間変化を示した。再生製品の直下に吸着土層を施工した Case 2 では、吸着土層をもたない Case 1 に比べて化学物質の拡散を効果的に抑制できている。このような現象論の定量的評価・予測には数値解析は大変便利な手段であり、その支援ツールである COMSOL Multiphysics は既往のシミュレーションモデルの計算のみならず、先に述べた化学物質溶出モデルのような自身のオリジナルモデルを組み込んだ計算をも可能にする。モデル開発の柔軟性に大きな優位性があると感じられる。

3. 化学平衡計算

3.1 目的

再生製品からの化学物質の溶出のように、安定した環境中に別の化学物質が入ると、それまで安定して存在していた化学物質の平衡状態は崩れ、環境中での化学物質の存在形態に変化を与える可能性がある。

先の 2.4 節において紹介した解析例では、再生製品からの溶出した化学物質が環境中に拡散する様子を計算したものであり、環境中に元々存在していた化学物質との相互作用は考慮されていない。よりよい環境影響評価を行うためには、ただ単に溶出した化学物質が環境中のどの範囲にまで拡散するのかという議論だけでなく、その結果環境中の化学物質の存在形態にどのような変化をもたらすのか

表 2 地下水と海水中の主要イオン⁶⁾

	地下水	海水
pH	6.70	8.53
Na ⁺ (mol/L)	1.61 x 10 ⁻³	4.85 x 10 ⁻¹
Ca ²⁺ (mol/L)	1.62 x 10 ⁻⁴	1.06 x 10 ⁻²
Mg ²⁺ (mol/L)	4.53 x 10 ⁻⁵	5.45 x 10 ⁻²
K ⁺ (mol/L)	7.68 x 10 ⁻⁵	1.06 x 10 ⁻²
Si ⁴⁺ (mol/L)	1.72 x 10 ⁻³	4.82 x 10 ⁻⁵
Cl ⁻ (mol/L)	4.80 x 10 ⁻⁴	5.65 x 10 ⁻¹
CO ₃ ²⁻ (mol/L)	1.28 x 10 ⁻³	4.65 x 10 ⁻⁴
SO ₄ ²⁻ (mol/L)	1.56 x 10 ⁻⁴	9.67 x 10 ⁻³

という議論にまで発展させる必要がある。そのためには、物質移動計算と化学平衡計算の連成解析が求められる。それに先立ち、ここでは、化学平衡計算を COMSOL Multiphysics ver3.5a でどのように解くのかを紹介する。

3.2 地下水と海水の組成解析

地下水や海水の組成は、一般に水中に含まれる各イオンの総量で与えられる。例えば、表 2 は代表的な地下水と海水の組成を表わしている⁶⁾が、各イオンの総量は与えられているものの、各イオンがどのように干渉し合い、水中でどのような存在形態にあるのかまでは知ることができない。存在形態までを把握するためには化学平衡計算が必要になる。このような組成解析では、(1) 物質収支式、(2) 電荷均衡式、(3) 化学平衡式が基礎方程式となる。以下に、地下水や海水の組成解析を行うための基礎方程式を示す。

(1) 物質収支式

水中に含まれるイオン種が表 2 に挙げる 8 種類 (Na⁺、Ca²⁺、Mg²⁺、K⁺、Si⁴⁺、Cl⁻、CO₃²⁻、SO₄²⁻) であると仮定すると、8 種類の各イオンから考えられる化学反応式は、例えば表 3 に示す内容となる。

これらの化学反応式より発生し得る化学物質は計 27 種類あり、各々の物質間には以下の物質収支式が成り立つ。

$$T_{\text{Na}} = c_{\text{wNa}^+} + c_{\text{wNaCO}_3^-} + c_{\text{wNaHCO}_3} + c_{\text{wNaSO}_4^-} \quad (7)$$

表 3 水の組成解析に係わる化学反応式

番号	化学反応式	pK _{eq}
01	Na ⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ NaCO ₃ ⁻	-1.27
02	Na ⁺ + H ⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ NaHCO ₃	-10.08
03	Na ⁺ + SO ₄ ²⁻ ⇌ NaSO ₄ ⁻	-0.73
04	Ca ²⁺ + H ₂ O ⇌ CaOH ⁺ + H ⁺	12.70
05	Ca ²⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ CaCO ₃	-3.20
06	Ca ²⁺ + H ⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ CaHCO ₃ ⁺	-11.60
07	Ca ²⁺ + SO ₄ ²⁻ ⇌ CaSO ₄	-2.36
08	Mg ²⁺ + H ₂ O ⇌ MgOH ⁺ + H ⁺	11.40
09	Mg ²⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ MgCO ₃	-2.92
10	Mg ²⁺ + H ⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ MgHCO ₃ ⁺	-11.34
11	Mg ²⁺ + SO ₄ ²⁻ ⇌ MgSO ₄	-2.26
12	K ⁺ + SO ₄ ²⁻ ⇌ KSO ₄ ⁻	-0.85
13	H ₄ SiO ₄ ⇌ H ₂ SiO ₄ ²⁻ + 2H ⁺	23.04
14	H ₄ SiO ₄ ⇌ H ₃ SiO ₄ ⁻ + H ⁺	9.84
15	2H ⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ H ₂ CO ₃	-16.68
16	H ⁺ + CO ₃ ²⁻ ⇌ HCO ₃ ⁻	-10.33
17	H ⁺ + SO ₄ ²⁻ ⇌ HSO ₄ ⁻	-1.99
18	H ₂ O ⇌ H ⁺ + OH ⁻	-14.00

$$T_{\text{Ca}} = c_{\text{wCa}^{2+}} + c_{\text{wCaCO}_3} + c_{\text{wCaHCO}_3^+} + c_{\text{wCaOH}^+} + c_{\text{wCaSO}_4} \quad (8)$$

$$T_{\text{Mg}} = c_{\text{wMg}^{2+}} + c_{\text{wMgCO}_3} + c_{\text{wMgHCO}_3^+} + c_{\text{wMgOH}^+} + c_{\text{wMgSO}_4} \quad (9)$$

$$T_{\text{K}} = c_{\text{wK}^+} + c_{\text{wKSO}_4^-} \quad (10)$$

$$T_{\text{Si}} = c_{\text{wH}_2\text{SiO}_4} + c_{\text{wH}_3\text{SiO}_4^-} + c_{\text{wH}_4\text{SiO}_4} \quad (11)$$

$$T_{\text{Cl}} = c_{\text{wCl}^-} \quad (12)$$

$$T_{\text{CO}_3} = c_{\text{wCaCO}_3} + c_{\text{wCaHCO}_3^+} + c_{\text{wCO}_3^{2-}} + c_{\text{wH}_2\text{CO}_3} + c_{\text{wHCO}_3^-} + c_{\text{wMgCO}_3} + c_{\text{wMgHCO}_3^+} + c_{\text{wNaCO}_3^-} + c_{\text{wNaHCO}_3} \quad (13)$$

$$T_{\text{SO}_4} = c_{\text{wCaSO}_4} + c_{\text{wHSO}_4^-} + c_{\text{wKSO}_4^-} + c_{\text{wMgSO}_4} + c_{\text{wNaSO}_4^-} + c_{\text{wSO}_4^{2-}} \quad (14)$$

ここで c_{wi} : 化学物質 i の濃度 (mol/L)、 T_j : イオン種 j の総量 (mol/L)、を表わす。平衡定数は濃度の単位を mol/L とした場合の値として定義されているため、式(7)-(14)における各濃度パラメータの単位は mol/L とする。

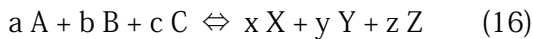
(2) 電荷均衡式

水中に存在する陽イオンと陰イオンの電荷総量は等しいため、次式が成り立つ。

$$\begin{aligned}
 & 2c_{wCa^{2+}} + c_{wCaHCO_3^+} + c_{wCaOH^+} + 2c_{wMg^{2+}} + \\
 & c_{wMgHCO_3^+} + c_{wMgOH^+} + c_{wNa^+} + c_{wK^+} + c_{wH^+} \\
 & = \\
 & c_{wCl^-} + 2c_{wCO_3^{2-}} + 2c_{wH_2SiO_4^{2-}} + c_{wH_3SiO_4^-} + \\
 & c_{wHCO_3^-} + c_{wHSO_4^-} + c_{wNaCO_3^-} + c_{wNaSO_4^-} + \\
 & c_{wKSO_4^-} + 2c_{wSO_4^{2-}} + c_{wOH^-}
 \end{aligned} \quad (15)$$

(3) 化学平衡式

各化学物質の濃度は、表 3 に示す化学反応式上の制約条件が課せられる。その制約条件式とは、例えば次の平衡反応があるとき、



化学平衡式は、

$$K_{eqk} = \frac{a_{wX}^x \cdot a_{wY}^y \cdot a_{wZ}^z}{a_{wA}^a \cdot a_{wB}^b \cdot a_{wC}^c} \quad (17)$$

として与えられる。ここで、 K_{eqk} ：化学反応式 k の平衡定数、 $a-z$ ：化学量論係数、 a_{wi} ：化学物質 i の活量 (mol/L) を表わす。つまり、例えば 18 種類の化学反応式 ($k = 18$) があるとき、式(17)に基づき 18 個の制約条件式が与えられることになる。

活量 a_{wi} は活量係数 γ_i と濃度 c_{wi} の積で与えられ、すなわち

$$a_{wi} = \gamma_i \cdot c_{wi} \quad (18)$$

となる。活量係数 γ_i は、その化学物質のみならず共存する他の化学物質の種類や濃度によっても影響を受ける。分析の実用上の面からは、活量係数の値はそのイオンの電荷と溶液のイオン強度によってほぼ決まる。ここでは活量係数の算定式として種々のイオンの混合溶液を対象とする次式を採用した⁷⁾。

$$\log \gamma_i = -Az_i^2 \left(\frac{\sqrt{I}}{1 + \sqrt{I}} - 0.2I \right) \quad (19)$$

ここで、 I ：イオン強度 (mol/L)、 z_i ：化学物質 i のイオン価数を表わし、 A は

$$A = 1.82 \times 10^6 \times (78.3 \times T)^{-1.5} \quad (20)$$

として与えられる。なお、イオン強度 I は次式で定義される。

$$I = \frac{1}{2} \sum c_{wi} z_i^2 \quad (21)$$

3.3 解析例

基礎方程式は、式(7)-(14)までの物質収支式 8 本と、式(15)の電荷均衡式、および式(17)で表わされる平衡式 18 本である。未知量が 27 種類に対し、方程式数は 27 本あることから、この問題を解くことができる。COMSOL Multiphysics ver3.5a において、アプリケーションモードの PDE 係数型の定常解析を用いて 27 種類の濃度変数をもつ化学平衡計算を実施した。

計算の対象は海水の組成解析の例として、表 2 で与えられるイオン量から海水中の化学物質の存在形態を推定した結果を表 4 に示す。特に、イオン量の多い Na^+ と Ca^{2+} 、 CO_3^{2-} 、および SO_4^{2-} の存在形態について整理した。弱酸性から弱アルカリ性の帯域では、炭酸イオンは重炭酸 (HCO_3^-) として存在することが知られているが⁸⁾、COMSOL Multiphysics を用いた化学平衡計算の結果からも、数ある炭酸イオンの存在形態の中で、海水の pH では重炭酸が最も濃度が高いことがわかる。

このように COMSOL Multiphysics においても化学平衡計算を取扱うことができる。化学平衡計算の解析コードには、PHREEQC や MINTEQA2、Geochemist's Workbench といったソフトウェアが知られているが、これらは複雑な物質移動計算と連成することは難しい。一方で、COMOL Multiphysics には現時点では物質移動計算と化学平衡計算を同時に扱うモジュールは開発されていないが、計算モデルを柔軟にカスタマイズできる特長をもつ。これまで開発されてきた物質移動計算用のモジュール (Chemical Engineering Module や Earth Science Module など) に、上述の化学平衡計算の基礎方程式を追加することで、化学平衡を考慮した物質移動解析が実現する可能性は高いと考えられる。

表 4 化学平衡計算に基づく地下水と海水の組成解析の結果

	Na ⁺	Ca ²⁺	CO ₃ ²⁻
地下水	<p>単位: mol/L</p>	<p>単位: mol/L</p>	<p>単位: mol/L</p>
海水	<p>単位: mol/L</p>	<p>単位: mol/L</p>	<p>単位: mol/L</p>

4. 化学平衡を考慮した物質移動解析

これまでの話を総括し、化学平衡計算を考慮した化学物質の溶出シミュレーションの例を紹介する。物質移動解析と化学平衡計算の連成において気を付けなければならない点は、計算量である。有限要素法において最も計算に時間を要するのは、基礎方程式を最終的に連立一次方程式に落とし込んだときのその求解計算においてである。連立一次方程式の規模は、未知数の数とメッシュ数の積で表現される。化学平衡計算を取り扱う場合、未知数の数が非常に多いため（先の 3.3 節に示した組成解析の例では 27 種類）、メッシュ数を抑制するために単純な解析空間が好ましい。

ここでは、海底地盤の一部に再生製品を用いた場合の環境影響評価を行う。解析断面は図 4 のような海域を考え、その底部に再生製品を敷き均した状況を想定する。海水流速は x 軸方向に 1 m/s とし、z 軸方向には二次関数的な速度分布をもつものとした。再生製品から溶出した化学物質が海水と反応し、海域にどのような影響が生じるのかを議論する⁹⁾。

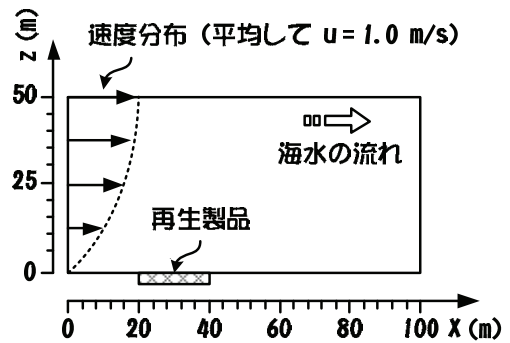
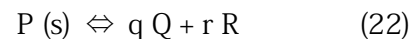


図 4 海域環境影響評価のための解析断面

解析結果を表 5 に示す。表 5 は、再生製品から溶出したある化学物質濃度 c_{wi} の時間変化とある沈殿物に関する飽和指数 SI_i を表わす。飽和指数とは、ある金属イオンが沈殿物を生成するとき

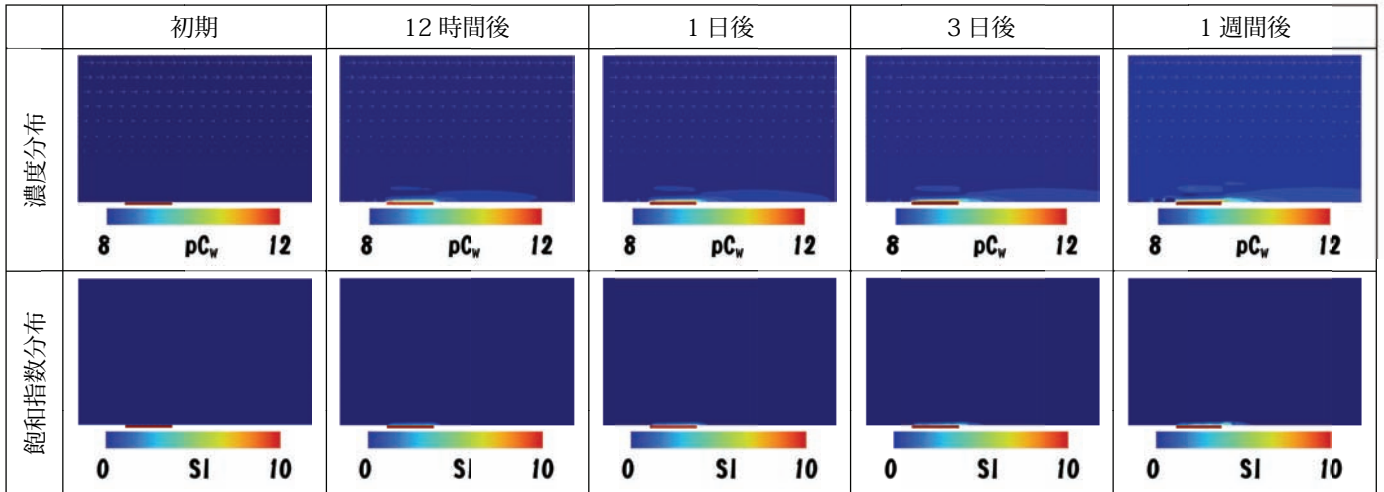


以下の式で与えられる。

$$SI_i = \log \left(\frac{a_{wQ}^q \cdot a_{wR}^r}{K_{spi}} \right) \quad (23)$$

SI_i : 沈殿物 i に対する飽和指数、 K_{spi} : 沈殿物 i に関する溶解度積である。飽和指数 SI_i がゼ

表5 海域用途での再生製品の環境安全性評価解析の結果



口よりも大きい場合、沈殿物 i が生成されていることを意味する。

解析結果をみると、再生製品の近傍に化学物質が溶出し、それに追従し沈殿物が生成していることがわかる。沈殿物は有色であり、その量と拡散範囲によっては海域環境を濁らせる可能性がある。このように化学平衡計算を踏まえた物質移動解析を行うことで、環境への影響を細かく評価でき、また環境影響を最小に抑えるための方策を具体的かつ定量的議論することができる。昨今の環境汚染問題の防止と解決には、こうした化学反応を考慮した物質動態解析技術は有効なツールとなるであろう。

5. 結び

COMOL Multiphysics を用いた物質移動計算と化学平衡計算の連成解析を紹介した。充分に実現可能な解析であると考えられるが、問題は、化学平衡計算では未知変数が多く、そのような計算を物質移動解析と連動すると、連立一次方程式の規模は大きくなり、計算時間が大幅に増加することである。今後の課題はこの計算時間の短縮化であり、影響力の小さい化学反応式はドロップすることや、化学平衡計算と物質移動解析はシーケンシャルで解くなどの工夫を検討する予定である。

参考文献

- 1) 肴倉宏史, 崎田省吾, 遠藤和人, 貴田晶子, 大迫政浩 (2007): 連続バッチ型溶出試験における再生材からの成分溶出挙動の解析, 第7回環境地盤工学シンポジウム論文集, pp163-168.
- 2) 肴倉宏史, 遠藤和人, 大迫政浩 (2007): シリアルバッチ試験で決定する速度定数を用いた再生材からの物質放出挙動モデルの試作, 第43回地盤工学研究発表会, 同講演論文集, pp.2177-2178.
- 3) van Genuchten, M. Th. (1980): A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, Soil Science Society of America Journal, Vol.44, pp.892-898.
- 4) Bear, J. (1972): Dynamics of fluids in porous media, New York, Elsevier.
- 5) Fetter, C.W. (1999): Contaminant hydrogeology - 2nd edition, Prentice Hall.
- 6) Nelson, D. (2002): Natural variations in the composition of groundwater, Groundwater Foundation Annual Meeting.
- 7) Benfield, L. D., Judkins, J. F., Weand, B. L. (1981): Process chemistry for water and wastewater treatment, Prentice Hall.
- 8) Drever, J. I. (1997): The geochemistry of natural waters: surface and groundwater environments (3rd edition), Prentice Hall.
- 9) 金山 進, 相場明郎, 田中裕一, 辻井正人, 木曾英滋, 中川雅夫 (2008): 浚渫土と転炉系製鋼スラッグの混合材の海域適用による pH の影響予測, 海洋開発論文集, Vol.24, pp.333-338.