

不均質多孔質媒体中の水理・物質移動に関する研究

—先行基礎工学分野に関する平成8年度報告書—

技術資料		
開示区分	レポートNo.	受 領 日
1	Y1606 97-001	97.7.22.

この資料は技術管理室保存資料です
閲覧には技術資料閲覧票が必要です
動力炉・核燃料開発事業団 技術協力部技術管理室

1997年3月

九州大学
動力炉・核燃料開発事業団

複製又はこの資料の入手については、下記にお問い合わせ下さい。

〒107 東京都港区赤坂 1-9-13

動力炉・核燃料開発事業団

技術協力部 技術管理室

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to :
Technical Evaluation and Patent Office, Technology Management Division.
Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation 9-13, 1-chome,
Akasaka, Minato-ku, Tokyo, 107, Japan

© 動力炉・核燃料開発事業団(Power Reactor and Nuclear Fuel Development
Corporation)1997

不均質多孔質媒体中の水理・物質移動に関する研究
 —先行基礎工学分野に関する平成8年度報告書—

神野 健二^{*1)}、中川 啓^{*1)}、細川 土佐男^{*2)}

畠中 耕一郎^{*3)}、井尻 裕二^{*3)}、亘 真吾^{*3)}、EKWebb^{*3)}、金澤 康夫^{*4)}、内田 雅大^{*3)}

要 旨

高レベル放射性廃棄物地層処分システムの核種移行評価上の重要パラメータとして分散係数がある。分散係数は平均的な流速からの変動成分により運ばれるフラックスが濃度勾配に比例すると仮定した場合の比例係数であるので、流速の関数として表される。また、媒体の幾何学的特徴に応じて、分散の効果が異なってくるので幾何学的特徴を代表する特徴的な長さ（分散率）の関数もある。分散率は地層の不均質な構造による影響を受けてスケール依存性を示す。したがって、分散係数が定義できる代表的な体積要素およびそのスケールに応じた適切な分散率を設定することは核種移行評価における重要な課題となっている。

この課題を解決するためには実験により不均質場での分散現象を解明し、既存の移流分散モデルの適用性および分散率のスケール依存性を確認する必要がある。このため動燃では、多孔質媒体水理試験設備（MACRO）を製作し、試験を行い、不均質場での分散現象の解明に取り組んでいる。MACRO 試験では、粒形の異なる数種類のガラスピーブズを用いて不均質な透水係数場を人工的に作成し、通水試験とトレーサ試験を行うことができる。トレーサとしては染料およびNaCl 溶液を使用している。

本研究では、MACRO 試験で得られるデータを用いて、動燃保有の解析モデル／手法と九州大学保有のモデル／手法を相互比較することによってこれらのモデルの特性や適用性を検討した。動燃では、物質移動について粒子追跡法およびオイラリアンーラグランジアン法を用いた。九州大学では、特性曲線法を用いた。

本共同研究により、動燃保有の粒子追跡法を適用した物質移動モデルはメッシュ分割、粒子数に解の精度が依存するため使用にあたっては注意が必要であることが分かった。特性曲線法を適用したモデルについては比較的精度良く物質移動現象を評価可能であることを確認した。また、不均質透水係数場において水理計算を行う場合、有限差分法と有限要素法では結果に差が生じる可能性があることが示された。

^{*1)} 九州大学 工学部 建設都市工学科

^{*2)} 九州産業大学 工学部 土木工学科

^{*3)} 動力炉・核燃料開発事業団 東海事業所 環境技術開発部 地層処分開発室

^{*4)} 検査開発(株)

目 次

1. はじめに	1
2. 動燃による解析	2
2. 1 不均質多孔質媒体試験 (MACRO 試験)	2
2. 1. 1 MACRO 試験の概要	2
2. 1. 2 不均質透水係数場モデル	3
2. 1. 3 トレーサ試験	4
2. 2 数値シミュレーション	5
2. 2. 1 MACRO-AFFINITY	6
2. 2. 2 DTRANSU	6
2. 2. 3 MODFLOW/MT3D	8
2. 2. 4 解析形状および境界条件	9
2. 2. 5 計算結果	10
3. 九州大学による解析	12
3. 1 はじめに	12
3. 2 不均質場について	12
3. 3 実験の概要	13
3. 4 数値シミュレーション	13
3. 4. 1 基礎式	13
3. 4. 2 数値シミュレーションの方法	15
3. 4. 3 計算条件	15
3. 4. 4 結果と考察	16
3. 5 おわりに	17
4. 解析結果の比較と考察	24
5. 参考文献	27
付録 A 不均質透水係数場において流れ場を計算するときの有限差分法と有限要素 法の特性について	A-1
付録 B MODFLOW/MT3D を用いた MACRO 試験解析	B-1

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物地層処分システムの核種移行評価上の重要パラメータとして分散係数がある。分散係数は平均的な流速からの変動成分により運ばれるフラックスが濃度勾配に比例すると仮定した場合の比例係数であるので、流速の関数として表される。また、媒体の幾何学的特徴に応じて、分散の効果が異なってくるので幾何学的特徴を代表する特徴的な長さ（分散率）の関数もある。分散率は地層の不均質な構造による影響を受けてスケール依存性を示す。したがって、分散係数が定義できる代表的な体積要素およびそのスケールに応じた適切な分散率を設定することは核種移行評価における重要な課題となっている。

この課題を解決するためには実験により不均質場での分散現象を解明し、既存の移流分散モデルの適用性および分散率のスケール依存性を確認する必要がある。不均質多孔質媒体中の物質移動に関しては、これまでに多くの不均質場のモデル化手法、移流分散モデルの解法が提案されているが、解析に耐えうる室内試験データや野外観測データが我が国に多くなく、これらのモデルの検証が十分に行われていないのが現状である。

このため動燃では、多孔質媒体水理試験設備（MACRO）を製作し、試験を行い、不均質場での分散現象の解明に資するためのデータ取得を行った。MACRO 試験では、粒径の異なる数種類のガラスピーブズを用いて不均質な透水係数場を人工的に作成し、通水試験とトレーサ試験を行った。トレーサとしては染料および NaCl 溶液を使用した。

上述したように不均質場での移流分散現象の解析にあたっては、種々の解析モデル／手法が用いられているが、それらを相互に比較し適用範囲を明らかにしておくことは核種移行評価に使用するモデルの選定、あるいは分散率の決定にあたっての重要な判断基準となる。

本研究では、モデルの相互比較／検証を目的として、MACRO 試験で得られるデータを用いて、動燃において実施可能なモデル／手法と九州大学が提案しているモデル／手法を用いて双方で解析し、モデルの妥当性について検討を行った。また、双方のモデル／手法を相互に比較することにより、それぞれの特性や適用性について検討した。

2 章においては動燃による解析手法および解析結果を示した。3 章においては九州大学による解析手法および解析結果を示した。4 章においては、動燃と九州大学の解析結果を比較し、それぞれの手法の特性および適用性の検討を行った。

2. 動燃による解析

2. 1 不均質多孔質媒体試験(MACRO 試験)

2. 1. 1 MACRO 試験の概要

不均質多孔質媒体試験装置（以下 MACRO 試験装置という）は、図 2-1 に示すように流れ場であるフローセル（高さ 1 m × 長さ 2 m × 奥行き 0.1 m）とフローセル左右両端に取り付けられた注水槽および排水槽からなる。流れ場は、フローセル内を 741 個（水平方向 39 × 鉛直方向 19）のブロック（高さ 5 cm × 長さ 5 cm × 奥行き 10 cm）に分割し、各ブロックに 6 種類の粒径の異なるガラズビーズを充填することによって不均質な透水係数場を構成することができる。MACRO 試験に使用したガラスビーズの仕様を表 2-1 に示す。

試験は、フローセル両端の注水槽と排水槽に水頭差を与えて定常な流れ場を作り、上流側の 1 点よりトレーサを連続注入した。トレーザとしては NaCl 溶液および染料を使用した。NaCl 溶液については導伝率を測定し、染料については目視により移行挙動を観察した。導伝率および圧力の測定位置は、それぞれ 100 点および 25 点である。

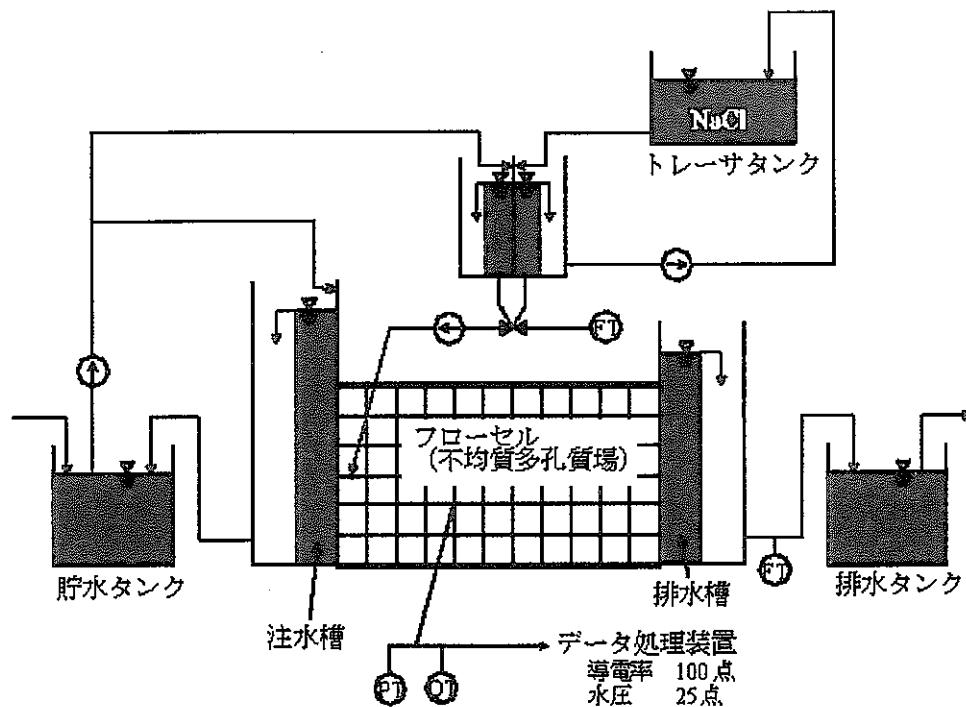


図 2-1 MACRO 試験装置概略図

表 2-1 ガラスピースの仕様

材質	形状	ビーズ 粒形 (mm)	粒形範囲 (mm)	透水係数 (m/s)	空隙率 (-)
ガラス	球	0.1	0.105-0.125	8.92E-05	0.379
		0.15	0.149-0.177	1.84E-04	0.376
		0.2	0.177-0.250	2.98E-04	0.376
		0.4	0.350-0.500	8.57E-03	0.373
		0.6	0.500-0.710	2.16E-03	0.373
		0.8	0.710-0.990	3.58E-03	0.373

2. 1. 2 不均質透水係数場モデル

透水量係数 T の空間的不均質性は、バリオグラム $\gamma_v(\hat{h})$ 、

$$\gamma_v(\hat{h}) = \langle |\psi(x) - \psi(x + h)|^2 \rangle \quad (2-1)$$

によって表現される。ただし、ここで、 x ：座標、 $\hat{h} = |h|$ 、 h ：2測定間の距離、 $\psi = \log_{10}(T)$ 、
 $\langle \rangle$ ：平均値である。現位置のデータセットによれば(1)式で定義される $\gamma_v(\hat{h})$ は、次のべき乗則
 で近似することが可能である。

$$\gamma_v(\hat{h}) = a\hat{h}^H \quad (2-2)$$

ここで、 H, a ：定数、 $H \in (0,1)$ である。この式はフラクタルスケーリング則と呼ばれ、こ
 のような $\psi(x)$ の場合は、長さのスケールに対して統計的自己相似性を有すると仮定される。ま
 た、フラクタル次元は n 次元空間において $n+1-H$ で与えられる。

本研究において(2-2)式のフラクタルスケーリング則により求められた不均質場のパター
 ンを図 2-2 に示す。また、このパターンにおけるバリオグラムを図 2-3 に示す。図 2-3 から
 示されるように、2点間の距離が $\log_{10}(X[m]) = -0.2$ すなわち $X=60[\text{cm}]$ 程度以内において
 は、前述のフラクタル次元算出式に従えば、この不均質場パターンのフラクタル次元を
 $D=2.7$ であると評価することができる。

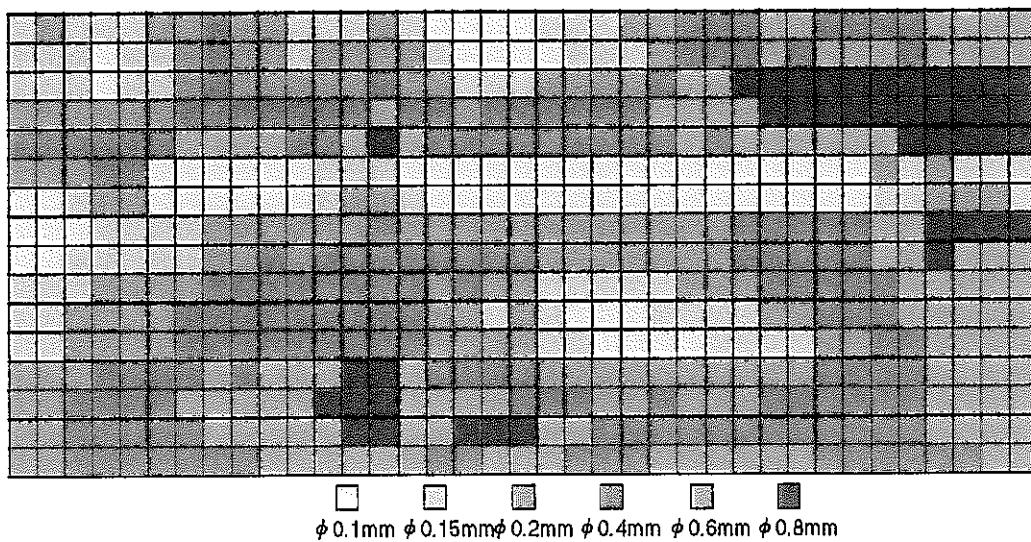


図 2-2 不均質透水量係数パターンに基づくガラスピーズ分布

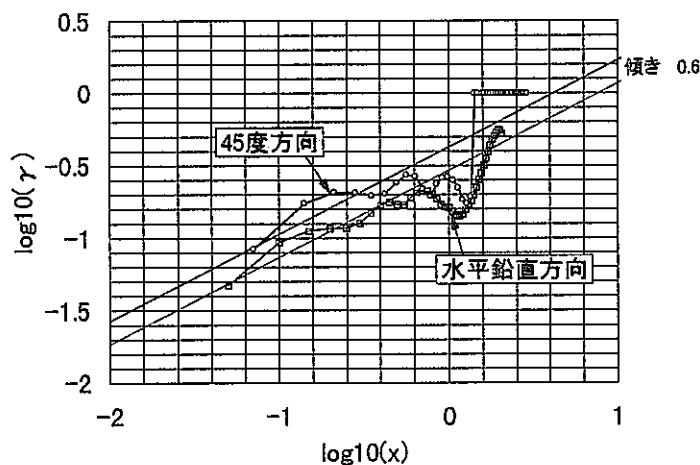


図 2-3 バリオグラム

2. 1. 3トレーサ試験

図 2-2 の不均質場を用いて、実際に作成した MACRO 試験のフローセル内におけるガラスピーズ分布と導伝率を測定するためのセンサー配置を図 2-4 に示す。フローセルの上流側境界と下流側境界との水頭差は 50. 5 cm とし、トレーサ注入点とフローセル下流側の水頭差を 50. 0 cm、40. 0 cm、30. 0 cm に変化させたケースについてそれぞれ試験を実施した。試験ケースを表 2-2 に示す。

NaCl トレーサ溶液濃度は、水との密度差による流れが生じないように 0. 5 % 以下に調整した。

表 2-2 試験ケース

試験ケース	上流側境界と下流側境界の水頭差(cm)	トレーサ注入点と下流側境界の水頭差(cm)
CASE1	50.5	50.0
CASE2		40.0
CASE3		30.0

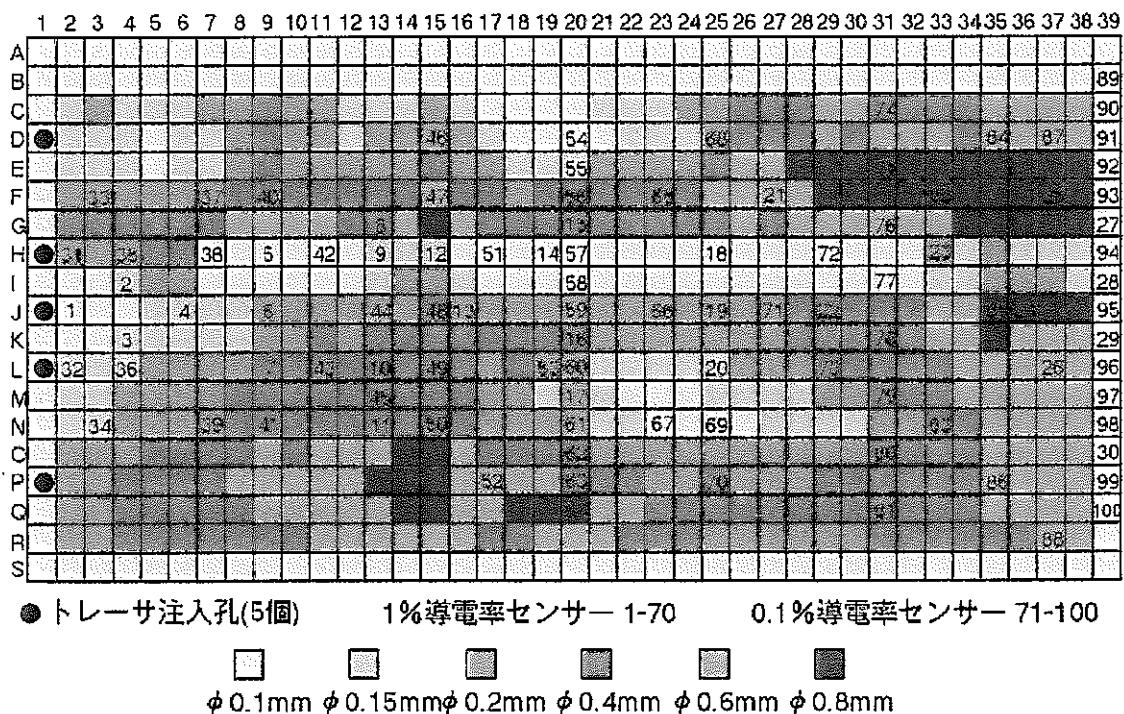


図 2-4 導伝率測定位置

2. 2 数値シミュレーション

動燃においては 3 つの数値シミュレーションモデル（MACRO-AFFINITY,DTRANSU,MODFLOW/MT3D）を使用して解析を実施した。MACRO-AFFINITY は動燃で所有するプログラムであり、DTRANSU,MODFLOW/MT3D は公開プログラムである。これらのモデルの概要を 2. 2. 1 節～2. 2. 3 節に示した。2. 2. 4 節においてはこれらの計算モデルに適用した解析形状と境界条件を示した。2. 2. 5 節では得られた計算結果を比較した。

2. 2. 1 MACRO-AFFINITY

MACRO-AFFINITY は動燃が開発・所有する計算プログラムであり、2次元定常飽和浸透流および移流分散問題を計算可能である。

水理モデル

質量保存則およびダルシー則から導かれた支配方程式は次の通りである。

$$e\theta u = T(x)\nabla P(x) \quad (3-1)$$

$$\nabla[u] = 0 \quad (3-2)$$

ここで、 $P(x)$ は圧力水頭、 $T(x)$ は透水量係数、 $u(x)$ は平均流速である。

上記の式は次の仮定に基づいている。

- ・解析領域内は2次元であり、領域内の空隙率、領域深さは一定である。
- ・定常流れである。
- ・非圧縮性流体を対象とし、ダルシー則に支配される。

離散化手法としては有限差分法を用いた。 $T(x)$ は差分グリッドの計算点間の調和平均により求められる。

物質移動モデル

物質移動計算手法はパーティクルトラッキング法である。これは、入力フラックスに応じて発生させた粒子（固定濃度を保持する）の移動を逐次追跡し、粒子の体積密度から濃度を計算する手法である。粒子を移動させる際に考慮する物質移動プロセスは移流のみである。分散効果は計算格子内の完全混合として表現される。分子拡散は考慮しない。

以上により計算格子間の移動は次式により計算される。

$$X(t + \Delta t) = X(t) + v\Delta t \quad (3-3)$$

ここで、 v は流速であり、 Δt は時間ステップである。

2. 2. 2 DTRANSU

DTRANSU は、2次元飽和・不飽和浸透流および移流分散問題を対象として岡山大学西垣教授らによって開発された（西垣,1991）。本プログラムは公開されており利用に関しては制限がない。

水理モデル

質量保存則とダルシー則から導かれる、密度依存を考慮した飽和・不飽和浸透流方程式は次式として表現される。

$$\rho_i \theta \gamma \frac{\partial c}{\partial t} + \rho \{ \beta Ss + Cs(\theta) \} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \rho K_i^s K_r(\theta) \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} + \rho K_i^s K_r(\theta) \rho_r \right\} \quad (3-4)$$

ここで、 φ ：圧力水頭、 θ ：体積含水率、 Ss ：比貯留係数、 $Cs(\theta)$ ：比水分容量、 K_i^s ：飽和透水テンソル、 $K_r(\theta)$ ：比透水係数、 C ：濃度（ $0 \leq c \leq 1$ 、飽和濃度を 1 として正規化）、 t ：時間、 ρ_i ：溶媒の密度、 ρ ：流体の密度、 ρ_r ： (ρ / ρ_i) 、溶媒の密度 ρ_i に対する流体の密度比、 ρ ：（= 1）飽和領域（= 0）不飽和領域、 γ ：溶質の密度比。
(3-4)式における密度 ρ は次式で濃度 C と関連付けられる。

$$\rho = \rho_i (1 + \gamma c) \quad (3-5)$$

MACRO 試験解析においては、トレーサ溶液と水との間に密度流が生じないように制御されているので、流れ場と物質移動を別々の問題として扱い、(3-4)式を用いて定常の流れ場の計算を実施した。

(3-4)式の離散化手法は有限要素法である。

物質移動モデル

DTRANSU において考慮する基礎式は次の通りである。

$$R \theta \rho \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta \rho D_i \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta \rho v_i c) - \theta \rho \lambda c - Q_c \quad (3-6)$$

この式に対して Neuman により提案されたオイラリアン-ラグランジアン法を用いるときに、移流分散の基礎式は次のように表現される。

$$(\text{移流項}) \quad \frac{d\bar{c}}{dt} = -\lambda c \quad (3-7)$$

$$(\text{移流項以外}) \quad R \theta \rho \left(\frac{dc}{dt} - \frac{d\bar{c}}{dt} \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta \rho D_i \frac{\partial c}{\partial x_i} \right) - \theta \rho \lambda R (c - \bar{c}) - Q_c \quad (3-8)$$

ここで、 \bar{c} ：移流に関する濃度、 c ：濃度 ($c = \bar{c} + \dot{c}$ 、 \dot{c} ：分散に関する濃度)、 λ ：減衰定数、 R ：遅延係数、 θ ：空隙率、 ρ ：密度、 D_{ij} ：分散テンソル、 Q_c ：源泉項である。

移流項に関しては、Single-step Reverse Particle Tracking 法(SRPT 法)を用いる。これは、節点に 1 つの粒子を配置し、 Δt 時間分の移流距離だけ流速方向とは逆に追跡し、その近傍に

存在する節点の濃度から ($t + \Delta t$) 時間後の濃度を補間的に求める手法である。さらに、より高精度な補間を実現するために、濃度変化がシャープなフロントを持つ領域に初期濃度を持たせた移動粒子を任意に配置し、濃度フロントと共に移流させ、これらの粒子濃度を基に節点濃度を補間的に解く手法 (Modified Continuous Forward Particle Tracking 法、MCFPT 法) を実施することが可能である。分散項等に関しては Galerkin 法による離散化を行い有限要素法により解く。このとき MCFPT 法を移流項に対して適用していた場合は、移流粒子の位置に節点を追加し要素を再分割することによって、より精度良く分散項を解くことが可能である。

ただし、本報告においては分散は考慮せず移流プロセスのみを考慮した計算を実施した。移流項を解く際は、計算時間等の都合により MCFPT 法は適用せずに SRPT 法により解析を実施することとした。

2. 2. 3 MODFLOW/MT3D

MODFLOW は U.S. Geological Survey において開発され、公開されたプログラムである (McDonald and Harbaugh, 1988)。本プログラムは 3 次元非定常飽和浸透流問題を対象とする。また、MT3D は S.S.Papadopoulos&Associates 社において開発され、公開されたプログラムである (Zheng, C., 1993)。本プログラムを用いて、MODFLOW により計算された流れ場とともに物質の移流分散問題を解くことが可能である。

水理モデル

MODFLOW において考慮する飽和浸透流の基礎式は次の通りである。

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) - W = Ss \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3-9)$$

ここで、 K_{xx} 、 K_{yy} 、 K_{zz} ：各座標軸と平衡な方向の透水係数、 h ：水理水頭、 W ：SOURCE または SINK の流量、 Ss ：貯留係数、 t ：時間である。

離散化手法としては有限差分法を用いる。透水係数は差分グリッドの計算点間の調和平均により求める。

本報告においては定常計算を実施した。

物質移動モデル

MT3D において考慮する移流分散の基礎式は次の通りである。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_i \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_s}{\theta} C_s + \sum_{k=1}^n R_k \quad (3-10)$$

ここで、 C ：濃度、 t ：時間、 D ：分散係数、 v ：流速、 q_s ：SOURCE または SINK の流量、 C_s ：SOURCE または SINK の濃度、 θ ：空隙率、 $\sum_{k=1}^N R_k$ ：化学反応項である。

(3-10)式に対して DTRANSUにおいて採用されている手法と同様のオイラリアンーラグランジアン法(EL 法)を適用する。EL 法とはすなわち(3-10)式を移流項と、それ以外の項(分散項等)等の 2 式にわけて、移流項をラグランジ的に解いた後、分散項等を有限要素法によりオイラー的に解く手法である。ただし、ラグランジ的解法に関しては Method of Characteristics(MOC)法(Garder et al., 1964; Konikow and Bredehoeft, 1978)または Modified Method of Characteristics(MMOC)法(Russell and Wheeler, 1983; Cheng et. al., 1984)を採用することが可能である。MOC 法は計算格子内に複数の粒子を配置することにより高精度な濃度の補間を実現する、いわゆる特性曲線法である。MMOC 法は DTRANSUにおいて移流を解く際に適用されている SRPT 法と同様である。MT3D は、MOC 法または MMOC 法のどちらを適用するかを計算格子内の濃度勾配により自動的に判別して手法を切り替えることが可能である。これにより過剰に粒子数が増加することを避け計算時間の効率化を図る。

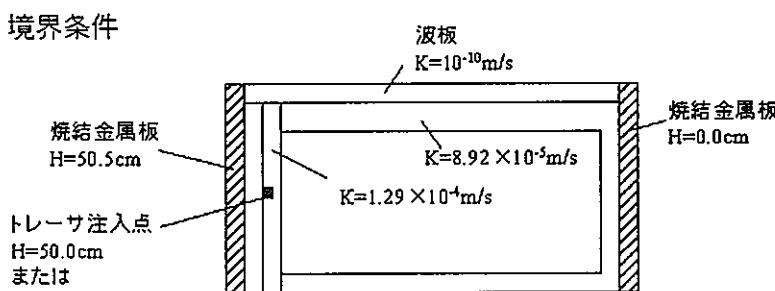
2. 2. 4 解析形状および境界条件

MACRO-AFFINITY および DTRANSU を用いた解析において適用した解析条件は図 2-5 に示す通りである。MODFLOW においては図 2-5 に示す解析形状上部の波板部分を除いた形状を用いて解析を実施した。

フローセルの解析メッシュとしては 1 辺 1.67cm の正方格子を用いた。

解析条件

- 解析モデルサイズ $1 \times 2.1 \times 0.1$ [m]
- 格子サイズ メイングリッド 5[cm], サブグリッド 1.667[cm]
- 空隙率 0.375[-]
- ガラスビーズ透水係数[m/s]
 $8.92 \times 10^{-5}, 1.84 \times 10^{-4}, 2.98 \times 10^{-4}, 8.57 \times 10^{-4}, 2.16 \times 10^{-4}, 3.58 \times 10^{-4}$
- 境界条件



- トレーサ注入点位置(X, Y)=(0.525, 0.116)[m](原点左上)

図 2-5 解析条件

2. 2. 5 計算結果

トレーサ注入部の圧力水頭を変化させることにより表2-2に示すように3ケースの試験を実施したが、解析ケースとしてはCASE1(トレーサ注入圧力水頭:50cm)およびCASE2(トレーサ注入圧力水頭:40cm)を用いた。

計算を実施するにあたっては、まず流れ場を計算し各計算点における流速を求める必要があるが、フローセルの上流側、下流側とトレーサ注入パイプ部分において多孔質金属が用いられておりこれらの部分は試験を繰り返すことによって目詰まりが生じるために透水係数が低下し、直接的には解析に用いるべき値を知ることが不可能である。したがって、試験において測定されているトレーサ注入流量、フローセル排水流量に解析結果が一致するようにこれらの透水係数が未知な部分をキャリブレーションによって推定することとした。キャリブレーションは各計算モデル毎に行っており、流量のキャリブレーションの精度が当然ながら濃度解析結果に影響を与えていていることに注意すべきである。

計算される圧力分布は、同様の解析メッシュ幅、境界条件、透水係数分布を用いれば数値化手法には依存せず同様の結果が得られ、キャリブレーションを各モデル毎に実施する必要はないと考えられる。しかし、実際には離散化手法により流量結果が異なったため上述したように各モデル毎にキャリブレーションを実施した。この問題については付録Aにおいて議論する。

CASE1 および CASE2 の流量のキャリブレーション結果を表2-3 および表2-4 に示す。

表2-3 流量キャリブレーション結果 (CASE1)

	トレーサ注入流量(ml/min)	フローセル排水流量(ml/min)
試験結果	92	251
MACRO-AFFINITY	92	266
DTRANSU	94	245
MODFLOW	92	272

表2-4 流量キャリブレーション結果 (CASE2)

	トレーサ注入流量(ml/min)	フローセル排水流量(ml/min)
試験結果	82	244
MACRO-AFFINITY	71	253
DTRANSU	71	249
MODFLOW	82	244

キャリブレーションにより得られた流速分布のもとで物質移動計算を実施した。濃度センサー位置は図2-4に示したように100点測定しているが、計算結果の比較としてはNO.10, 16, 19の3点を選択した。これらの測定点におけるCASE1 および CASE2 の破過曲線の結果を図2-6 および図2-7 に示す。

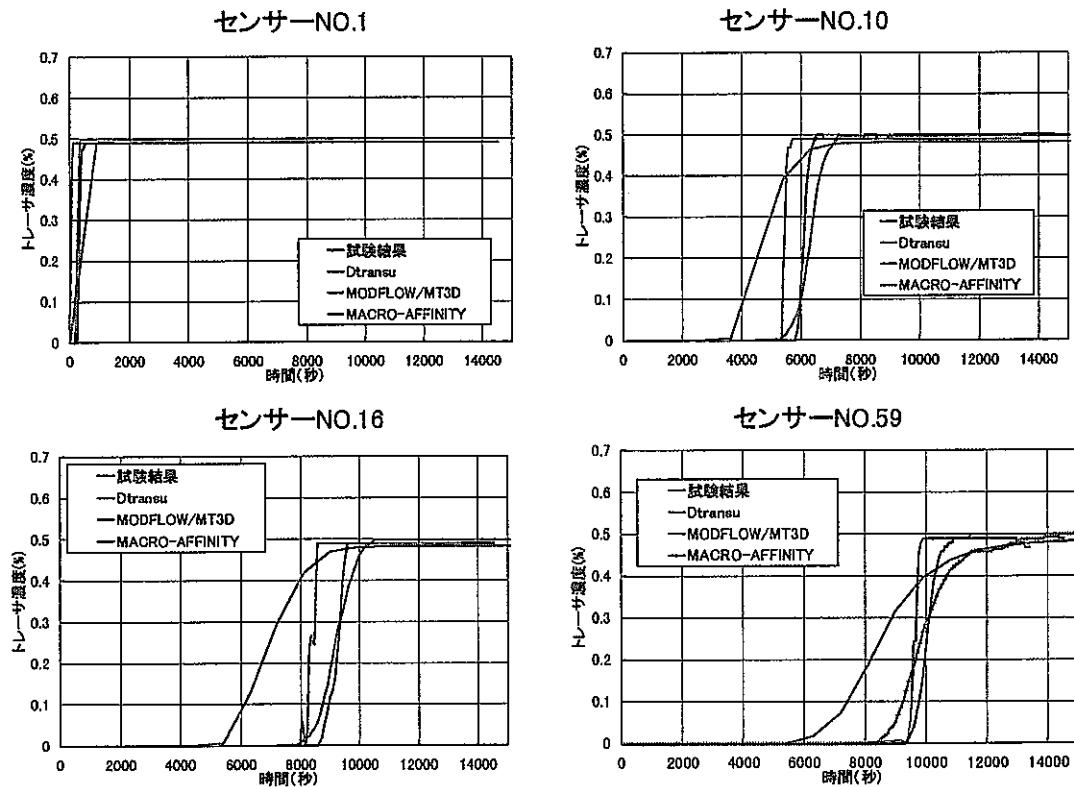


図 2-6 CASE1 破過曲線結果

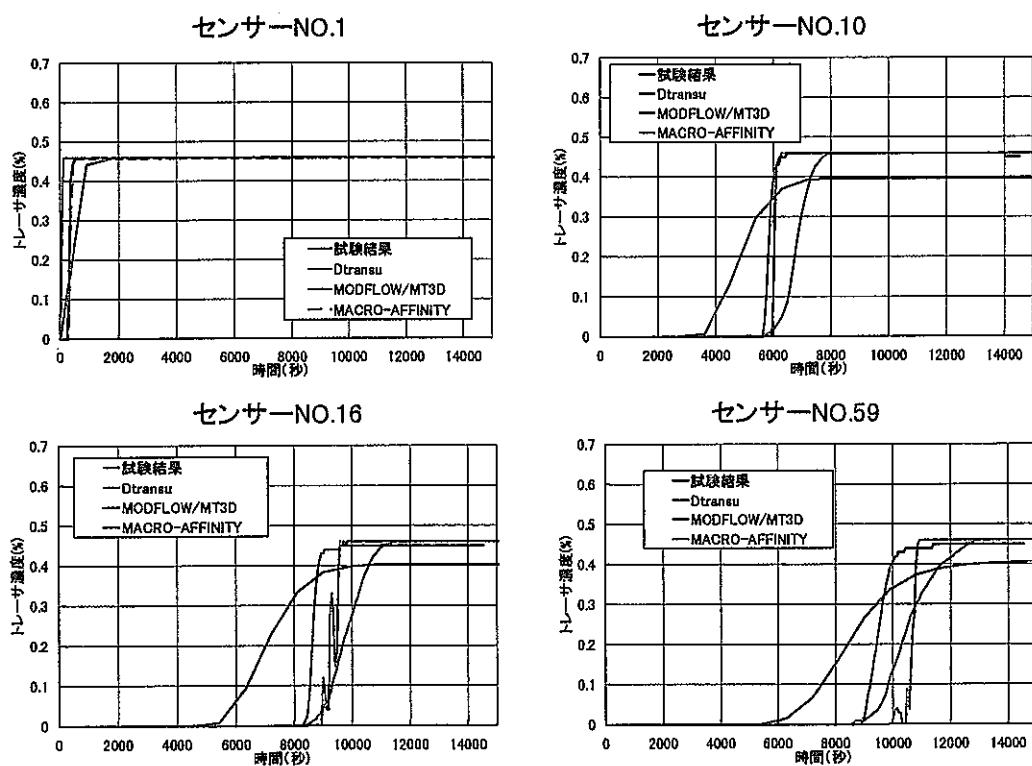


図 2-7 CASE2 破過曲線結果

3. 九州大学による解析

3. 1 はじめに

海岸地域における過剰揚水に伴う塩水侵入や、廃棄物処分場からの浸出水、農薬や肥料の施肥などによる汚染、有機塩素化合物などによる汚染といった地下水中での物質輸送問題がクローズアップされている。このため、対象物質に応じた輸送過程に対して、数値シミュレーションモデルを用いた現状再現と将来予測などが多く行われている。しかしながら、帶水層が不均一・非等方な透水係数や分散係数で構成されている場合も多く、適用される数値シミュレーションモデルがどの程度の精度を持つのかについては、必ずしも十分には吟味されていない。このような不均一・非等方な場での流れや輸送過程を詳細に把握し、帶水層の特性との関連を明らかにする必要がある。

そこで本研究では、粒径の異なるガラスピーブを用いて、確率統計的な手法により人工的に不均質場を作成し、着色された低濃度の塩水によるトレーサ試験を行い、数値シミュレーションモデルによる解析を行い、解析の妥当性と不均質多孔媒体中の流れと輸送過程についての検討を行った。

3. 2 不均質場について

地盤における透水係数の不均質性はバリオグラムによって表現することができる。

$$\gamma(h) = \langle [\Psi(x) - \Psi(x+h)] \rangle \quad (1)$$

ここに、 x ：座標、 $h = |h|$ 、 h ：2測定点間の距離、 $\Psi(x) = \log k(x)$ 、 $k(x)$ ： x 座標における透水係数、 $\langle \rangle$ ：多くの測定の平均である。現地によれば(1)式で定義される $\gamma(h)$ は、次のべき乗則で近似される場合が多い。

$$\gamma(h) = a h^{2H} \quad (2)$$

ここに、 H, a ：定数、 $H \in (0, 1)$ である。この式はフラクタルスケーリング則と呼ばれ、このような $\Psi(x)$ の場合は長さのスケールに対して統計的自己相似性を有すると仮定される。フラクタル次元は、 n 次元空間において $n+1-H$ で与えられる。本実験のためのバリオグラムによる不均質パターンの生成手法はスペクトル法である。この手法は $\Psi(x)$ の場におけるフーリエ級数の収束とそのべき乗則とに関係があるという事実の上に成り立っている。スペクトルを求めるのに要求される収束を満たす場合は乱数発生法により、そうでない場合は高速フーリエ変換により求めた。実験装置の不均質場の生成に際し、 H は0.3を選んでいる。これはフラクタル次元の2.7に相当する。これは、現地のデータセットに合うように求められた代表値である。結果として求められた不均質パターンは図-1に示す。このパターンは38×19のガラスピーブプロックとして生成された。プロック内では均一・等方であり、プロックレベルで見れば不均一・非等方となっている。

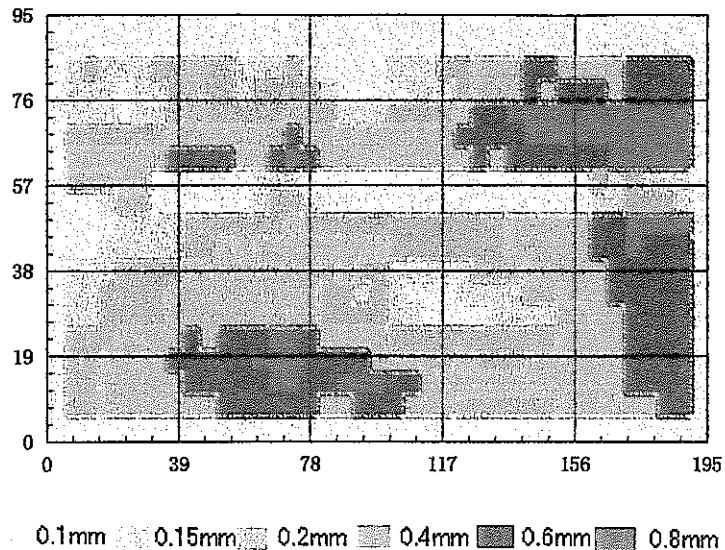


図-1 不均質場におけるガラスピーツの分布

3.3 実験の概要

図-2に実験装置の概略を示す。幅195cm、高さ150.5cm、奥行き10cmのガラスピーツを敷き詰めた水槽である。実験装置には、100点の濃度測定点、25点の圧力測定点が設けられている。装置の上流側と下流側での水頭差は50.5cmで、トレーサとしてNaClを0.5%で、トレーサの水槽高さ50cmとした場合をcase-1、注入濃度を0.46%で注入高さを40cmとした場合をcase-2とし、注入濃度0.5%で注入高さを30cmとしたcase-3の3ケースで行っている。

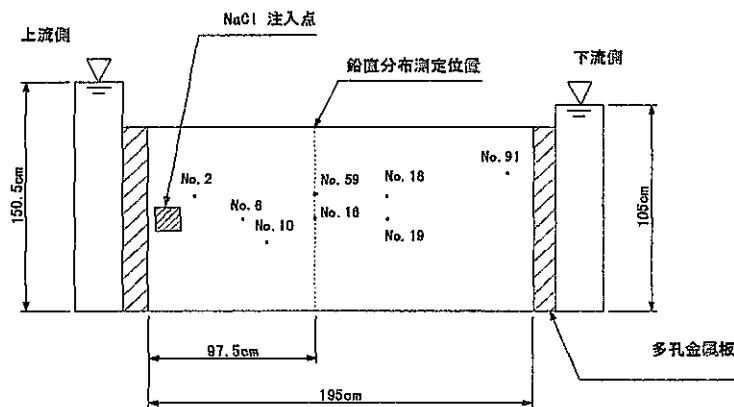


図-2 実験装置概略図

3.4 数値シミュレーション

3.4.1 基礎式

基礎式は、次に示す(a)地下水流れの式と塩分濃度に関する(b)2次元移流分散方程式から成る。

(a) 地下水流れの式（圧力水頭に関する基礎式）

2次元地下水流れの基礎式は、水平方向にx軸、鉛直上向きにy軸をとると次式で示される。

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = - \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \quad (3)$$

$$u = - k \frac{\partial h}{\partial x} \quad (4)$$

$$v = - k \left(\frac{\partial h}{\partial y} + \frac{\rho}{\rho_f} \right) \quad (5)$$

ここで、 t :時間(s), h :圧力水頭(cm), k :透水係数(cm s⁻¹), u, v :x, y方向のダルシーフ流速(cm s⁻¹), ρ :流体密度(g cm⁻³), ρ_f :淡水密度(=1.0g cm⁻³)である。 ρ/ρ_f は、塩水の密度効果を表している。 S_s は比貯留係数とよばれるもので、単位の水頭上昇が起きたときに単位体積の土中に貯留される水量である。不圧帶水層では、10⁻¹~10⁻²cm⁻¹, 被圧帶水層では、10⁻⁶~10⁻⁷cm⁻¹程度であると言われている。

(b) 2次元移流分散方程式（塩分濃度に関する基礎式）

塩分濃度 $C(x, y, t)$ に関する基礎式は、次式に示す2次元移流分散方程式である¹⁾。

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (u' C)}{\partial x} + \frac{\partial (v' C)}{\partial y} = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

ここに、 u', v' はX方向およびY方向の実質流速であり式のダルシーフ流速との間には $u' = u/\theta$, $v' = v/\theta$ の関係がある。上式の分散係数 $D_{xx}, D_{xy}, D_{yx}, D_{yy}$ は、Huyakorn & pinderによれば帶水層の分散についての等方性を仮定し、次式のように流速依存型の分散と分子拡散の和で表される²⁾。

$$D_{xx} = \frac{\alpha_L u'^2}{V} + \frac{\alpha_T v'^2}{V} + D_M \quad (7)$$

$$D_{yy} = \frac{\alpha_T u'^2}{V} + \frac{\alpha_L v'^2}{V} + D_M \quad (8)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = \frac{(\alpha_L - \alpha_T) u' v'}{V} \quad (9)$$

ここに、 $V = (u'^2 + v'^2)^{1/2}$ であり、 α_L :縦方向分散定数(cm), α_T :横方向分散定数(cm), D_M :水

の分子拡散係数(cm^2s^{-1})である。式の塩分濃度 C と式の流体密度 ρ との間には次の関係がある。

$$C = \frac{100 (\rho - \rho_f)}{(\rho_s - \rho_f)} \quad (10)$$

ここに、 ρ_s :塩水密度($=1.025\text{g cm}^{-3}$)、塩分濃度 C は%表示である。

4-2. 数値シミュレーションの方

数値シミュレーションに関して、基礎式(a)地下水流れの式については、陰形式の差分法で繰り返し計算をおこない、基礎式(b)2次元移流分散方程式については、移流項の離散化誤差の発生がなく、数値解の精度がよいことが確認されている粒子移動法(特性曲線法)を用いる³⁾。

3. 4. 3 計算条件

図-1に不均質場の分布を示している。各々の粒径に関する透水係数と空隙率、縦方向分散定数および横方向分散定数については表-1に示している。

表-1 ガラスビーズの透水係数、空隙率、縦方向分散定数

ガラスビーズの粒径(mm)	透水係数(cm s ⁻¹)	空隙率(%)	縦方向分散定数(cm)
0.1	8.92×10^{-3}	0.379	3.77×10^{-2}
0.15	1.84×10^{-2}	0.376	6.01×10^{-2}
0.2	2.98×10^{-2}	0.376	8.36×10^{-2}
0.4	8.57×10^{-2}	0.373	1.85×10^{-1}
0.6	2.16×10^{-1}	0.373	2.95×10^{-1}
0.8	3.58×10^{-1}	0.373	4.11×10^{-1}

また、縦方向分散係数については次のようにして求めた。まず、本実験装置により求められた分散係数とレイノルズ数との関係より(11)式が求められる⁴⁾。

$$\frac{D_L}{v} = 0.7285 * Re^{1.149} \quad (11)$$

ここに、 D_L :縦方向分散係数、 Re :レイノルズ数、 v :動粘性係数(cm^2s^{-1}) (今回は $1.0 \times 10^{-2}\text{cm}^2\text{s}^{-1}$ を用いた)とする。また、 D_L と α_L との関係式(12)式から α_L について(13)式が求まる。

$$D_L = \alpha_L * u \quad (12)$$

$$\alpha_L = \frac{0.7285}{100 * u} * \left[\frac{u * d_m}{0.01} \right]^{1.149} \quad (13)$$

ここに, α_L : 縦方向分散定数(cm), u : x方向のダルシー流速(cm s⁻¹) (今回は 1.2×10^{-2} cm s⁻¹を用いた.), d_m : ガラスビーズの粒径(cm)とする. 本解析では(13)式によって求められた値を用いている. なお, α_T については, Klotz, Seilerによる室内実験による α_T と α_L 関係式(14)により求めた⁵⁾.

$$\alpha_T = 0.1 * \alpha_L \quad (14)$$

本実験装置は, 両側を多孔金属板で挟まれており, この部分については実験の繰り返しによる目づまりなどが生じており, 今回の解析では, 解析領域の両側に4カラムずつ透水性の低い部分を仮定して解析を行った. それらの透水係数は, 上流側でcase-1の場合 4.2×10^{-4} cm s⁻¹, case-2の場合 4.3×10^{-4} cm s⁻¹, case-3の場合 5.8×10^{-4} cm s⁻¹とし, 下流側では全ケースとも 1.0×10^{-4} cm s⁻¹を与えた. また, トレーサーの注入に関しては, 各実験ケースにおいて計測されたトレーサー流入量を15分毎に与えている.

さらに, 実験とは別に, case-2の諸条件のもとでトレーサーとして注入される塩水の濃度を100%として与えた場合の解析も行った. これをcase-4とする.

3. 4. 4 結果と考察

図-3には, 本研究で扱った不均質場の流速分布を示している. 流れは, 透水係数の高い部分が卓越しており, 透水係数の低い部分では高い部分へ向かって流れている. 全体としては, 実験装置の中間までは, 粒径0.6mmと0.8mmの存在する部分に向かって下向きに流れ, その部分をすぎるあたりから下流側上部の粒径0.8mmの存在する透水性の高い部分に向かって流れ, 下流部に至っている.

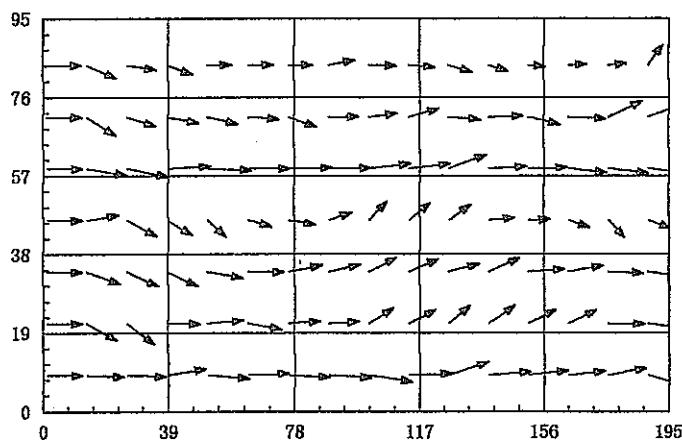


図-3 不均質場の流速分布 (case-1: トレーサー無注入状態)

図-4には, case-1の場合の着色塩水トレーサーの等濃度分布の計算値と, 実験結果の写真

との比較を示している。15分後、75分後、135分後、210分後、270分後の様子をそれぞれ示している。染料を用いたトレーサーの分布と計算結果とは概ね一致している。図-5には、case-2の場合のトレーサーの挙動の時系列変化を示しているが、こちらも概ね計算結果は実験結果を表現できている。図-6には、case-2の場合の代表的な測定点における塩分濃度の時系列変化を示している。若干計算値の方が濃度の増加が早い部分も見られるものの両者は概ね一致している。なお本計算では写真撮影時のトレーサーの流入流量を注入点の境界条件として与えている。図-7には、case-2の場合の鉛直濃度分布の実測値と計算値を比較して示している。実測値は計算結果とかけ離れておらず、おおよそ正確な塩分濃度の鉛直分布が示されていると考えられる。図-8には他ケースと同様に、case-3についての着色塩水トレーサーの経時変化を示している。およそ計算による再現ができていると考えられるが、270分後において計算結果におけるプリュームの先端部分の形状が写真と異なっている。これは、計算結果におけるオレンジや黄色の部が、ごく低濃度のため実験撮影時にその濃度まで可視できていないとも考えられる。図-9には、case-4すなわち注入点濃度を100%にした場合の計算結果を示す。これを図-5と比較すれば、明らかに密度効果が効いていることがわかる。すなわち、135分後以降の計算結果の比較からもわかるように、プリュームの先端部分が下向きである点に特に表れている。ただし、今回の場合、上下流の水頭差が50.5cmと大きいため水平方向の流れが卓越していることから、その濃度は異なるもののプリュームの形状自体は低濃度の塩水を注入した場合と似たような形となった。

3. 4 おわりに

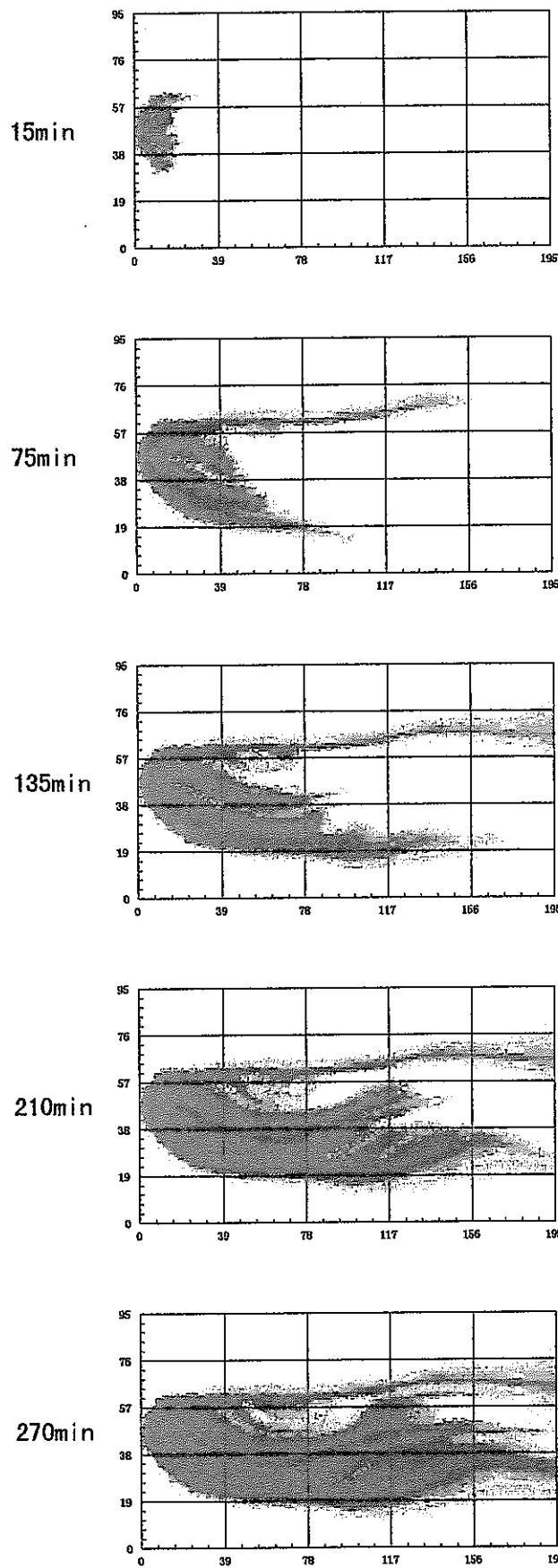
本研究で得られた知見を整理すると以下のようである。

- 1) 不均質場における混合分散を考慮した解析を行うことにより、トレーサーの挙動や濃度の経時変化を概ね再現できた。
- 2) 不均質場においては、透水性の高い部分での流れが卓越しており、透水性の低い部分では高い部分へ向かって流れることを示した（図-3を参照）。
- 3) 注入点の濃度を100%塩水とした場合の計算を行った結果、プリュームの先端部分で下方に向かっていく様子が見られ、密度流の効果が確認された。
- 4) 水平方向の流れが卓越する場合は、密度効果が効いている場合でもプリュームの形状自体は注入点濃度によらず似たような形となる。
- 5) 注入量の相違によって、プリュームの形状が大きく異なることを示した。

参考文献

- 1) 粕井和朗・細川土佐男・神野健二・伊藤敏郎：海岸帶水層における鉛直塩分濃度分布に基づく横方向分散定数の推定法方、土木学会論文集、第411号、II-12、pp. 45-53, 1989.
- 2) Huyakorn, P. S. and G. F. Pinder: Computational method in subsurface flow, Academic Press, pp. 186-187, 1983.
- 3) 神野健二・上田年比古：粒子の移動による移流分散方程式の数値解法の検討、土木学会論文集、第271号、pp. 45-53, 1978.
- 4)
- 5) Klotz, D., Seiler, K.-P.: Labor- und Geländeversuche zur Ausbreitung konservativer Tracer in fluvioglazialen Kiesen von Oberbayern, Traceruntersuchungen in der Hydrogeologie und Hydrologic, GSF, report No. 250, Munich, 1980.

計算結果



実験結果

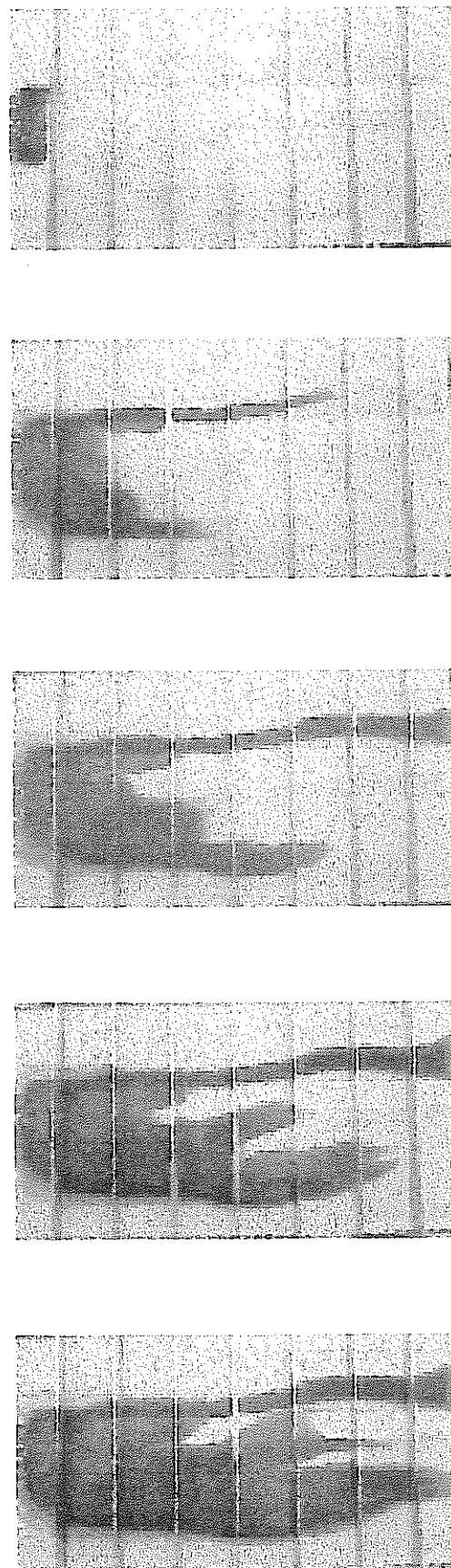


図-4 着色塩水トレーサーの挙動の経時変化(case-1)

計算結果

実験結果

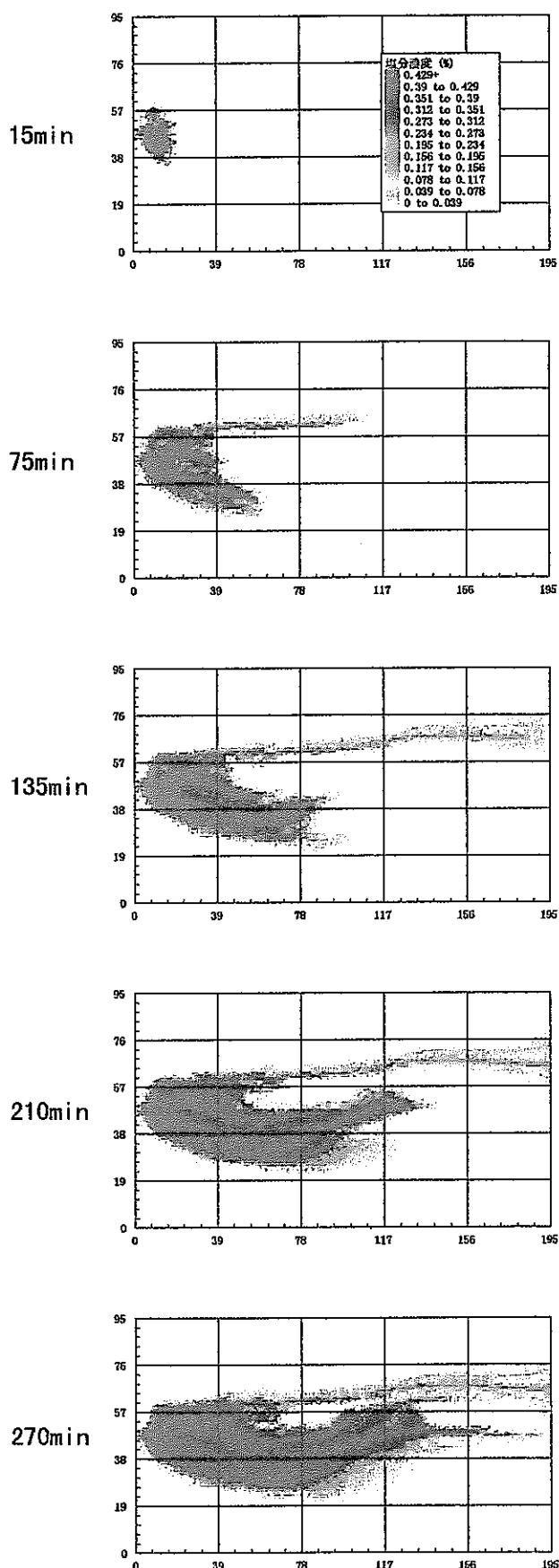


図-5 着色塩水トレーサーの挙動の経時変化(case-2)

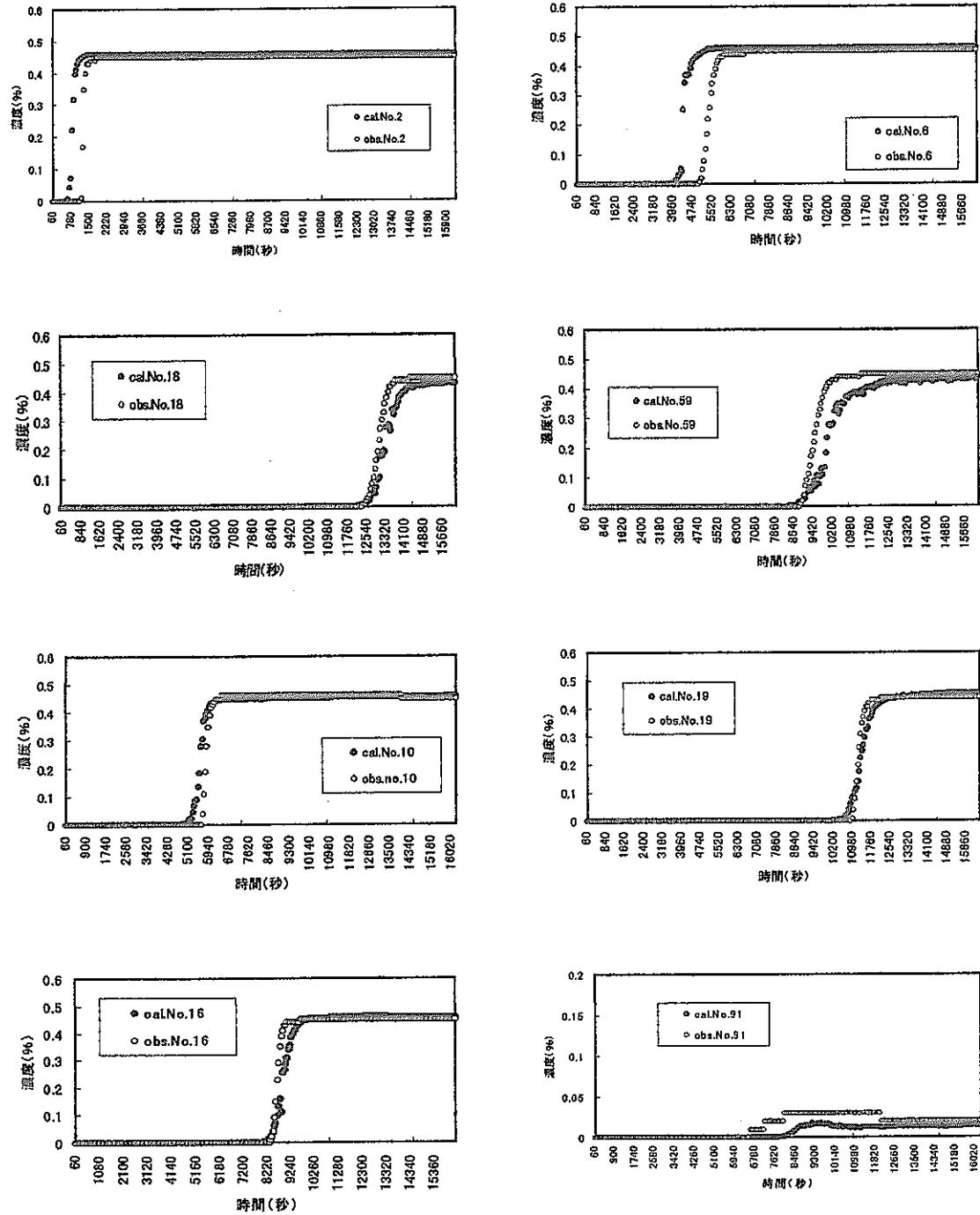


図-6 代表的な点における塩分濃度の時系列変化

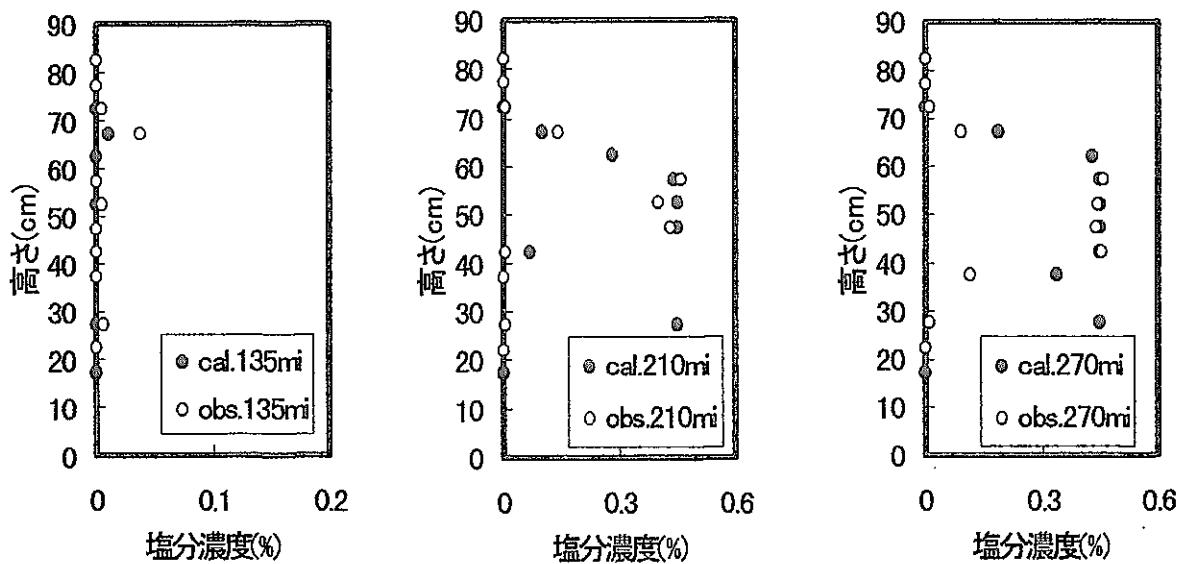


図-7 鉛直塩分濃度分布 (左 : 135min, 中 : 210min, 右 : 270min)

計算結果

実験結果

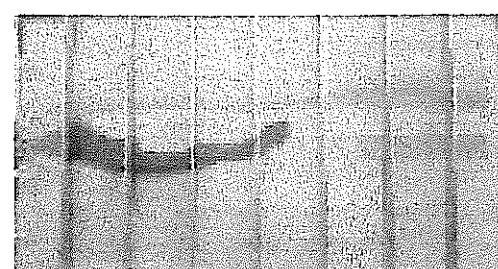
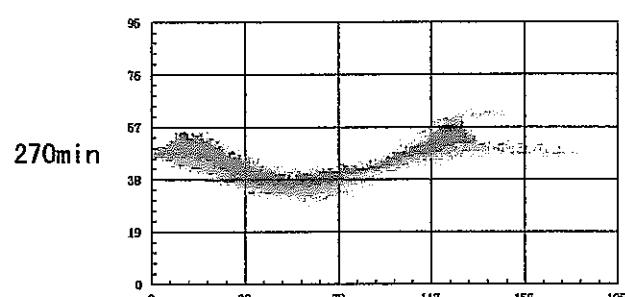
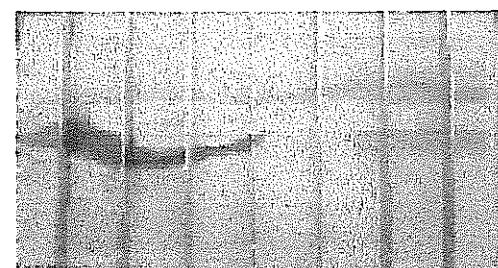
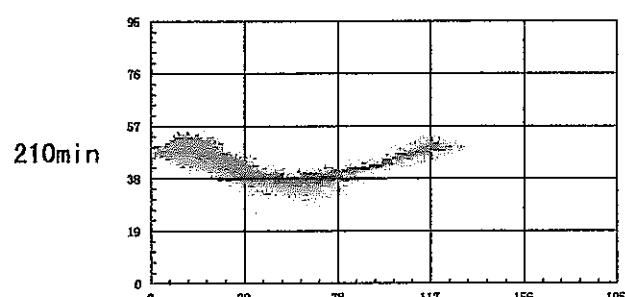
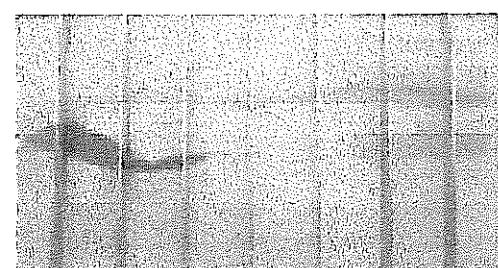
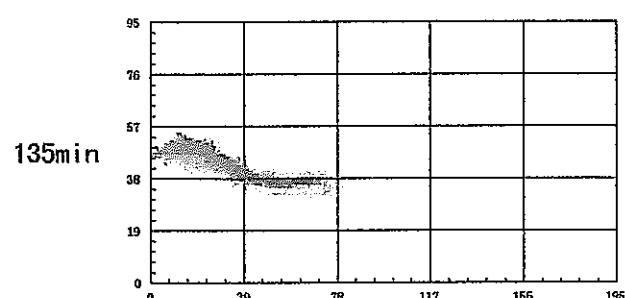
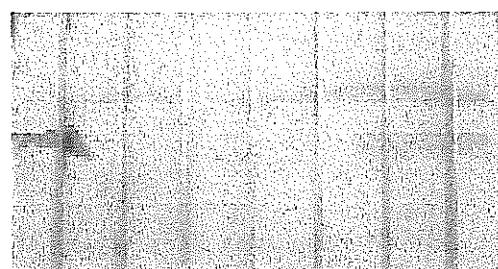
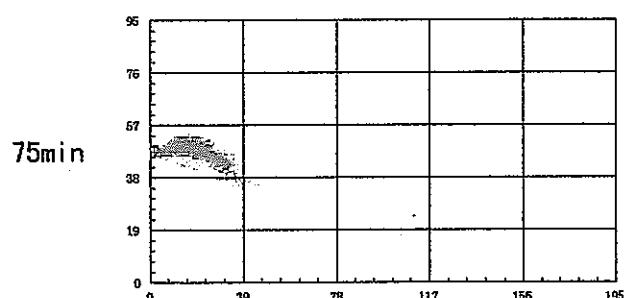
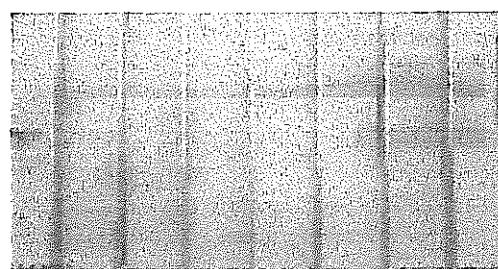
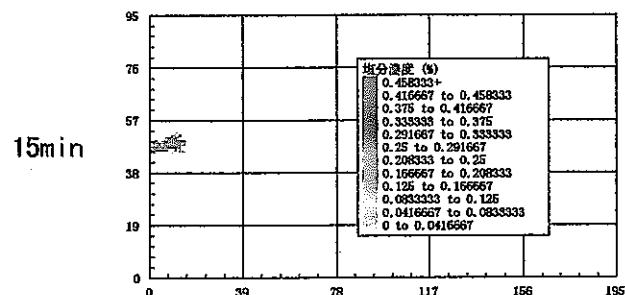


図-8 着色塩水トレーサーの挙動の経時変化(case-3)

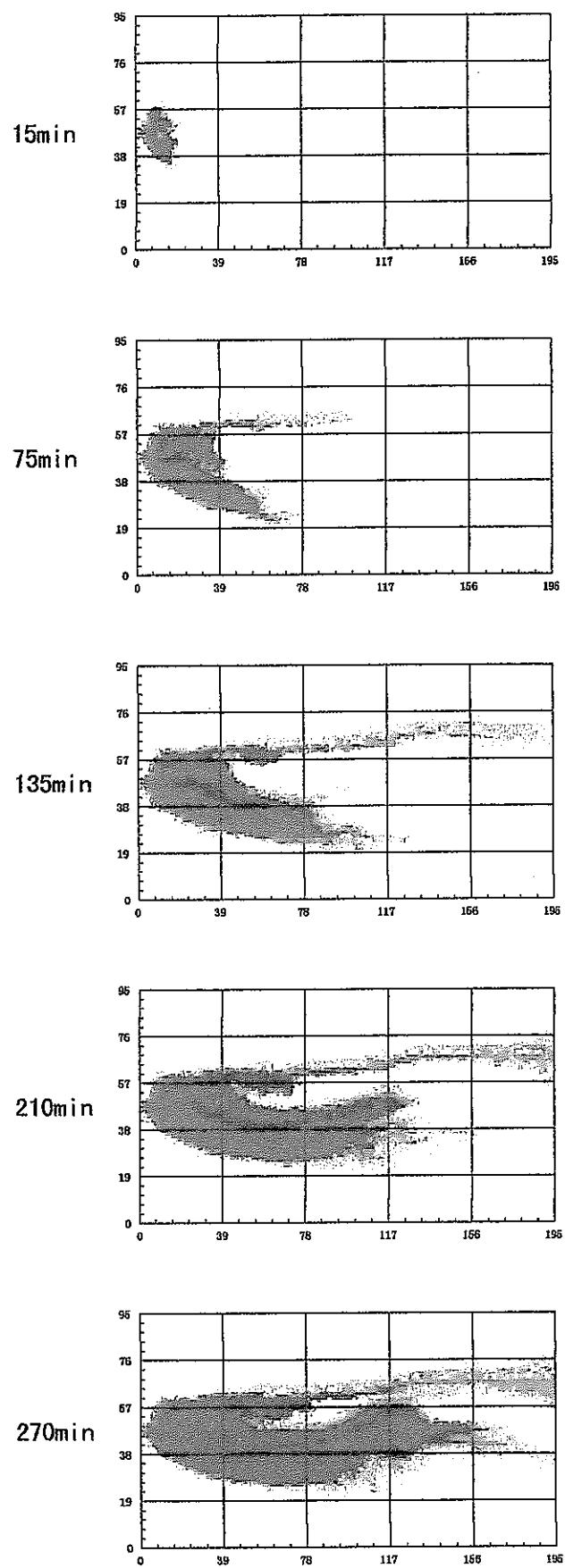


図-9 塩分濃度100%とした場合の結果

4. 解析結果の比較および考察

本報告においては、水理物質移動解析において異なるモデル／手法を用いた。物質移動解析結果の相互比較を検討する上ではこれらモデル／手法の違いを明らかにしておく必要がある。水理解析および物質移動解析のモデル／手法の違いを次に示す。

水理解析としては、九州大学を除く他のモデルでは定常流を仮定した。九州大学のモデルではトレーサ注入量変化（最大 3ml/min 程度）を流量境界条件として与えた。

九州大学では、トレーサ注入流量にたいして試験で測定した時間変化を流量境界条件として入力し、下流側焼結金属板透水係数を固定値(1.0×10^{-4} cm/s)として与え、上流側焼結金属板透水係数を変化させて試験結果で得られた流量と一致するようにキャリブレーションを行った。ただし、キャリブレーションに使用したトレーサ注入量の条件は、MACRO 試験においてトレーサとして染料を用いたときの結果を使用した。（MACRO 試験は、同一の水頭境界条件にたいしてトレーサとして染料を用いた場合と NaCl 溶液を用いた場合と 2 回実施している。これら 2 回の試験から測定されたトレーサ流量およびフローセル排水流量の結果は必ずしも同じ結果ではない。これは試験を継続することによる焼結金属板の目詰まりによる影響である。）動燃で実施した MACRO-AFFINITY、DTRANSU、MODFLOW の水理解析では、3 領域（上下流側焼結金属板、トレーサ注入点）の透水係数を対象としてキャリブレーションを行った。

各水理解析手法におけるキャリブレーション対象の比較を表 4-1 に示す。また CASE1(上下流側境界水頭差 50.5cm, トレーサ注入点/下流側境界水頭差 50.0cm)および CASE2(上下流側境界水頭差 50.5cm, トレーサ注入点/下流側境界水頭差 40.0cm)のキャリブレーション結果を表 4-2 に示す。表 4-1 に示すようにキャリブレーション方法は全モデルに対して同様でなく、またキャリブレーション対象領域の解析格子サイズについても同様ではないため表 4-2 における透水係数値自体を比較することは特に意味はない。

表 4-1 キャリブレーション対象領域

	キャリブレーション対象		
	上流側焼結金属板	下流側焼結金属板	トレーサ注入点
九州大学	○	× (透水係数固定)	× (流量境界)
MACRO-AFFINITY	○	○	○
DTRANSU	○	○	○
MODFLOW	○	○	○

表 4-2(1) 流量キャリブレーション結果 (CASE1)

	上流側焼結金属 板透水係数 (cm/s)	下流側焼結金属 板透水係数 (cm/s)	トレーサ注入点 透水係数(cm/s)	トレーサ注入流 量(ml/min)	フローセル 排水流量 (ml/min)
試験結果(染料 トレーサ使用) ^{*1}	-	-	-	124	217
試験結果(NaCL トレーサ使用) ^{*2}	-	-	-	92	251
九州大学	4.2×10^{-4}	-	-	-	213
MACRO-AFFINITY	5.0×10^{-4}	1.0×10^{-2}	1.0×10^{-3}	92	266
DTRANSU	7.9×10^{-4}	2.0×10^{-3}	6.3×10^{-3}	94	245
MODFLOW	6.3×10^{-4}	2.9×10^{-2}	3.9×10^{-4}	92	272

*1: 試験日 H8.6.13 *2: 試験日 H8.6.21

表 4-2(2) 流量キャリブレーション結果 (CASE2)

	上流側焼結金属 板透水係数 (cm/s)	下流側焼結金属 板透水係数 (cm/s)	トレーサ注入点 透水係数(cm/s)	トレーサ注入流 量(ml/min)	フローセル 排水流量 (ml/min)
試験結果(染料 トレーサ使用) ^{*1}	-	-	-	75	255
試験結果(NaCL トレーサ使用) ^{*2}	-	-	-	82	244
九州大学	4.3×10^{-4}	-	-	-	227
MACRO-AFFINITY	5.0×10^{-4}	1.0×10^{-2}	1.3×10^{-3}	71	253
DTRANSU	6.3×10^{-4}	1.0×10^{-2}	6.3×10^{-3}	71	249
MODFLOW	5.1×10^{-4}	1.0×10^{-2}	6.3×10^{-4}	82	244

*1: 試験日 H8.7.9 *2: 試験日 H8.7.4

物質移動解析手法一覧を表 4-3 に示す。九州大学のモデルでは移流計算手法として特性曲線法を使用し、また分散効果は実験式に基づいて考慮した。次に動燃で用いたモデルについて示す。MACRO-AFFINITY では移流計算手法としてパーティクルトラッキング法を使用した。分散効果は差分格子内の完全混合として表現される。DTRANSU では移流計算手法として SRPT 法のみを用いた。分散効果は考慮しなかった。MT3D では移流計算手法として MOC 法および

MMOC 法を用いた。MOC 法は特性曲線法と同様であり、MMOC 法は SRPT 法と同様の計算手法である。

表 4-3 物質移動解析手法

	物質移動計算手法	分散効果の考慮
九州大学	特性曲線法	○
MACRO-AFFINITY	パーティクルトラッキング法	○
DTRANSU	SRPT 法	×
MT3D	MOC/MMOC 法	×

九州大学の計算モデルを用いた計算結果および動燃側で実施した計算結果（MACRO-AFFINITY、DTRANSU、MODFLOW/MT3D）を、CASE1 および CASE2 についてそれぞれ図 4-1 および図 4-2 に示す。試験結果は NaCl 溶液をトレーサとして使用したときの結果である。

次に計算モデルによる結果の考察をそれぞれ示す。

九州大学の結果は CASE2 については破過曲線の濃度の立ち上がり時間に関して良い一致を示した。CASE1 については濃度立ち上がり時間に関して若干早めに評価した。この原因是、トレーサ注入流量が試験条件よりも多かったためと考えられる。しかしキャリブレーション方法が他の手法で使用した方法とは異なる（染料をトレーサとして使用したときの条件でキャリブレーションを実施）にもかかわらず物質移動結果が NaCl 溶液トレーサを用いた試験結果とほぼ一致したことは、焼結金属板の目詰まりの影響はフローセル全体の流れ場については大きな影響を与えていなかったと思われる。分散効果については測定位置が下流側になるにつれ若干の過大評価が見られた。この原因は分散効果にたいして適用した実験式の精度に問題があったと考えられる。

MACRO-AFFINITY により得られた破過曲線の立ち上がり時間は CASE1 については試験結果と良い一致を示した。CASE2 については破過曲線の立ち上がり時間が遅い結果となっているが、これは水理解析における注入流量キャリブレーションの精度に問題があったためであると表 4-2(2)から推察される。また、濃度の立ち上がりにおいて測定位置が下流側になるほど試験結果よりも分散効果を大きい点については、MACRO-AFFINITY では分散の効果を計算格子内の完全混合として表現しており、この効果が過大であったことを示している。

DTRANSU については、分散の効果を試験結果よりも過大に評価した。この原因としては DTRANSU の移流計算手法として SRPT 法のみを使用したためであり、SRPT 法と MCFPT 法を併用すれば精度が改善されると考えられる。

MODFLOW/MT3D については、濃度の立ち上がり時間に関して試験結果とよく一致した。したがって水理解析については試験をよく再現したものと考えられる。分散効果については、試験結果よりも若干過小に評価した。これは本報告においては移流プロセスのみを考慮した解析を実施したためであり、適度な分散効果を与えればより試験の傾向に近い結果が得られると考えられる。

本研究において得られた成果は次の通りである。

- ・特性曲線法(MT3D,九州大学)は移流プロセスを精度良く評価できることが確認できた。
- ・EL 法(DTRANSU)は、MCFPT 法を用いず SRPT 法のみで物質移動計算を実施すると数値拡散を抑えることができない。
- ・MACRO-AFFINITY はメッシュ分割の大きさ、粒子数に解の精度が依存するため使用にあたっては注意が必要である。
- ・同等の解析メッシュ幅で不均質透水係数場に有限差分法と有限要素法を適用したときは有限差分法のほうが計算精度が低くなる可能性がある。(付録 A 参照)

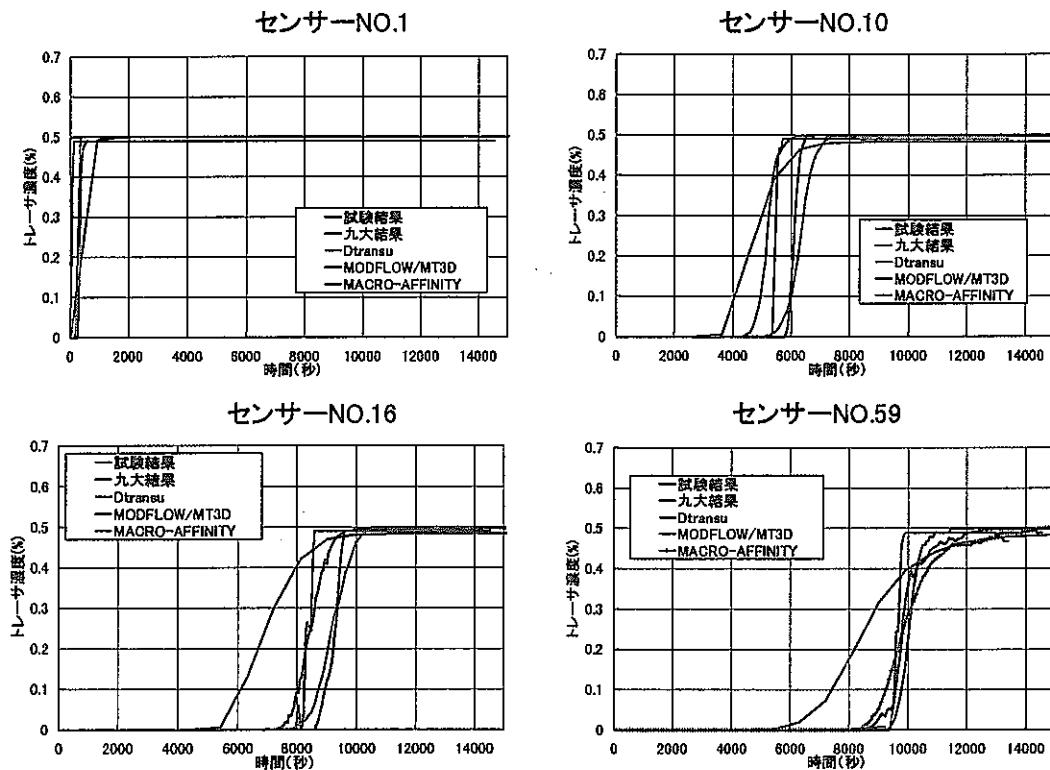


図 4-1 CASE1 破過曲線結果

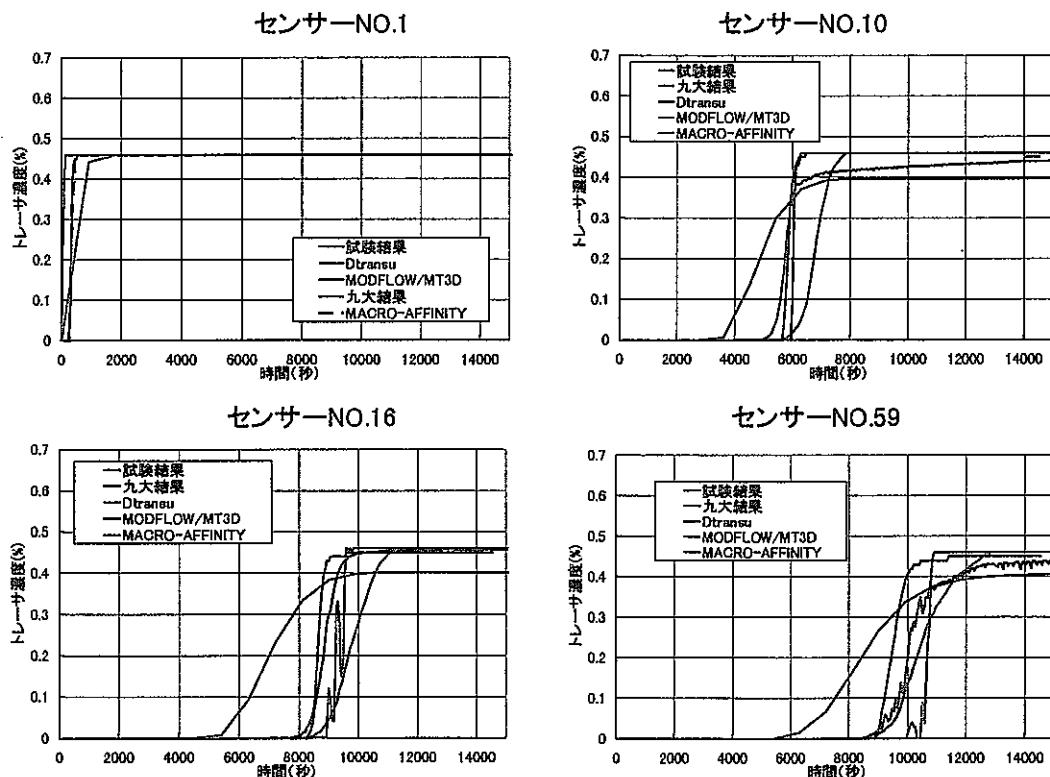


図 4-2 CASE2 破過曲線結果

5. 参考文献

西垣誠(1991):物質輸送のその他の解法—オイラリアン・ラグランジアン法(EL法)－、地下
水学会誌第33巻 265-276

McDonald,M.G.,and A.W.Harbaugh(1988):A modular three-dimensional finite-difference
ground-water flow model in U.S. Geological Survey Open File Report 83-875 Book 6,
chapter 1.

Garder,A.O.,Jr.,D.W.Peaceman and A.L.Pozzi,Jr.(1964):Numerical calculation of
multidimensional miscible displacement by the method of
characteristics.Soc.Pet.Eng.J.,6(2),p.175-182

Konikow,L.F and J.D.Bredehoeft(1978):Computer model of two-dimensional solute
transport and dispersion in ground water.U.S.Geol.Surv. Water Resour.Book7,Chapter
C2,90pp.

Russell,T.F. and M.F.Wheeler.(1983):Finite element and finite difference methods for
continuous flows in porous media.SIAM The Mathematics of Reservoir
Simulation.R.E.Ewing(ed.),Chapter II.,p.35-106.

Cheng,R.T.,V.Casulli and S.N.Milford.1984,Eulerian-Lagrangian solution of the
convection-dispersion equation in natural coordinates. Water
Resour.Invest.Book7,Chapter C2,90pp.

Appendix

付録 A 不均質透水係数場において流れ場を計算するときの有限差分法と有限要素法の特性について

はじめに

本文2.2.5節で記述したように、同等の解析メッシュ幅において不均質透水係数場の水理解析を実施する場合、有限差分法と有限要素法において違いが生じることが問題となった。これを確認するために非常に単純な計算形状と不均質透水係数場を設定し、有限差分法と有限要素法による計算を実施した。その結果、有限差分法を用いた場合は、計算格子幅が有限要素法と同等の場合は有限要素法の結果よりも精度が低くなる可能性が示された。

計算条件

図1のように不均質透水係数場および境界条件を設定した。有限差分法の計算点は均質格子の中心とし、有限要素法の計算節点は均質格子の周辺に位置する4点とした。

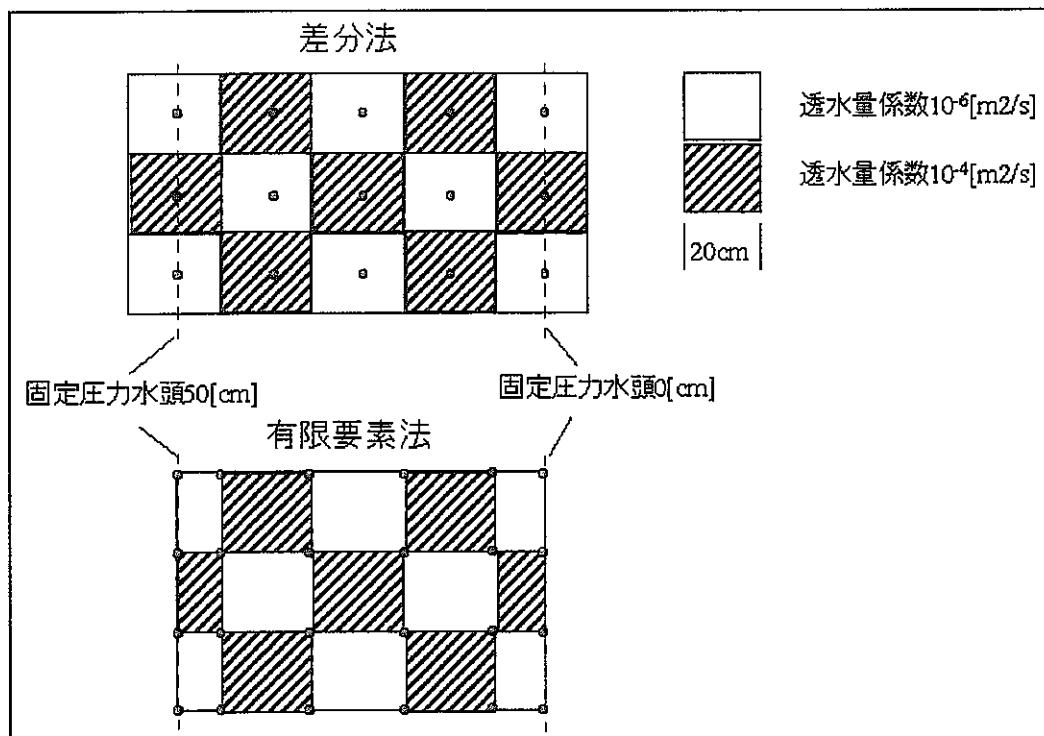


図1 解析条件

計算結果

有限差分法および有限要素法による圧力水頭計算結果を図2および図3に示す。また、下流側での全体流量を比較した結果を表1に示す。

有限差分法においては計算格子間の透水係数を調和平均によって均質化するために、全領域にわたって均質な透水係数場と評価された。一方、有限要素法では要素内において圧力変化が考慮できた。したがって、流量の比較では大きな差が生じた。

これと同様の問題が MACRO 試験の解析においても生じたため有限差分法と有限要素法の流量の結果に違いが現れたものと考えられる。

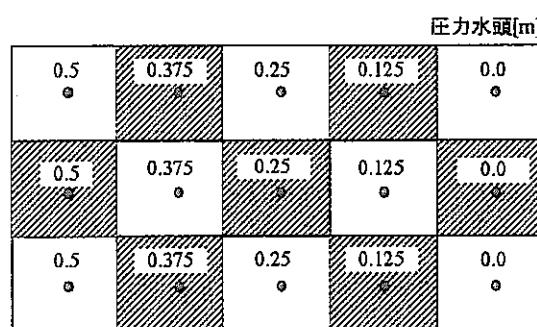


図2 有限差分法結果

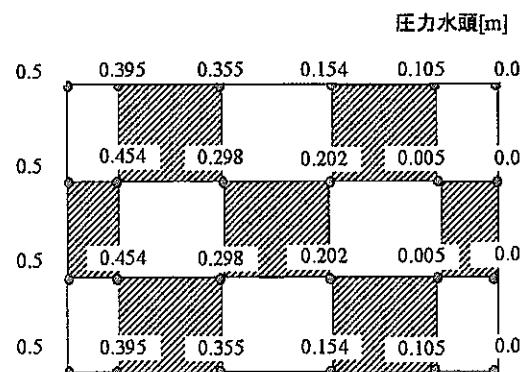


図3 有限要素法結果

表1 全体流量計算結果

	有限差分法	有限要素法
流量[mL/min]	45	692

付録B MODFLOW/MT3Dを用いたMACRO試験解析

MODFLOW DESCRIPTION

Theory

MODFLOW is a public domain code developed and distributed by the U.S. Geological Survey (McDonald and Harbaugh, 1988). This code solves the three-dimensional partial differential equation describing fluid flow under non-equilibrium conditions in heterogeneous and anisotropic conditions with the assumption that the principle axes of hydraulic conductivity are aligned with the orthogonal model grid coordinate directions. The governing equation is thus:

$$\frac{\partial}{\partial x}(K_{xx}\frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K_{yy}\frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K_{zz}\frac{\partial h}{\partial z}) - W = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

where

K_{xx} , K_{yy} , and K_{zz} - (L^{-1}) hydraulic conductivity along the x, y, z coordinate axes

h - (L) potentiometric head

W - (t^{-1}) volumetric flux per unit volume for sources or sinks

S_s - (t^{-1}) specific storage

t - time

A finite-difference scheme is applied to discretize space and develop a set of algebraic expressions to represent the partial differential equation. The properties of each cell represent effective or spatial averages over the space of the cell. In general a harmonic mean is used to represent conductivity between block centered nodes. Rows, columns or layers can vary in height, width, or thickness respectively. This particular scheme can be solved using either of two iteration schemes: the Strongly Implicit Procedure, or the Slice-Successive Overrelaxation approaches. The Strongly Implicit procedure first substitutes similar coefficients to produce a symmetric and sparse matrix. Then the matrix of coefficients is factored to accumulate non-zero values in an area above the main diagonal. Then "backward and forward" substitution is used to find a suite of suitable values for "h" at each node that satisfies the matrix equation. The Slice-Successive Overrelaxation approach divides the finite-difference grid into slices which values are processed together in the solution approach using Gaussian Elimination where the values of adjacent heads are treated as knowns and the process iterates through individual nodes on the slice and through series of slices in different orientations.

Implementation

The code that implements this approach is written in a modular set of algorithms in FORTRAN and released to the public. The main program calls a series of algorithms in sequence to first set up the geometry, then solve the matrices, and then write the results. The first two input packages are necessary for all model runs. These two, BAS and BCF establish the size of the grid, the definition of boundary types both along the edges and internal to the grid, defines the initial head conditions, and the arrays of properties including geometry, conductivity, and so forth. After selecting the solution approach, either the SIP or SOR package is necessary to establish maximum numbers of realizations, closure criteria, and acceleration parameters. In addition, a series of different source, sink terms can be applied including ones that apply point-specific discharge specific injection or withdrawal (WEL), areal specified flux (RCH), head dependent recharge discharge (RIV), elevation specific discharge (DRN) or specified withdrawal or space (EVT). These set of source/sink packages can be used either alone, in combination or not at all depending on the problem. Each package has a separate input file, necessary to implement that package. All these are written in ASCII code in highly specific formats.

Output from the code is in a series of either formatted or unformatted files as specified in the input. These can include node specific estimates of head, flow velocity, and discharge rates at specific nodes in addition to standard output that describes the model closure, head distribution and mass balance of the solution.

MT3D DESCRIPTION

Theory

MT3D is a simulation approach based on application of the Method of Characteristics (MOC) or the Modified Method of Characteristics (MMOC) to solve the classical advection, dispersion, reaction chemical transport equation.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + q_s / \theta (C_s) + \sum_{k=1}^N R_k$$

where:

C - (ML^{-3}) concentration dissolved in water

t - (T) time

x - (L) distance along the respective Cartesian coordinate axes

D - ($L^2 T^{-1}$) hydrodynamic dispersion coefficient

v - (LT^{-1}) seepage or linear pore water velocity

q - (T^{-1}) volumetric flux of water per unit volume of aquifer (sources and sinks)

C - (ML^{-3}) concentration of sources and sinks

θ - (dimensionless) porosity of media

$\sum R_k$ - ($ML^{-3} T^{-1}$) chemical reaction term

It is assumed that only equilibrium-controlled linear or non-linear sorption, and first-order irreversible rate reactions are possible. Other assumptions include having the principle direction of the hydraulic conductivity tensor aligned with the orthogonal model grid, macroscopic dispersion can occur in three directions, longitudinal, and two transverse dispersivities (horizontal and vertical). Chemical boundary conditions can be either specified concentration (Dirichlet), specified concentration gradient (Neumann) or a mixed form of the two. A Eulerian-Lagrangian approach is used to transform the equations and apply a discretization scheme. In this approach the advection term is solved with the Lagrangian (moving) coordinate system, whereas the dispersion, source/sink, chemical reactions and so forth are solved using a Eulerian (fixed) coordinate grid system. The Lagrangian approximation can be performed using either the Method of Characteristics (MOC) (Garder et al., 1964; Konikow and Bredehoeft, 1978) or the Modified Method of Characteristics (MMOC) (Russell and Wheeler, 1983; Cheng et. al., 1984).

Implementation

MT3D is a FORTRAN based code. Similar to the structure of MODFLOW, MT3D uses a modular system of algorithms that first read a series of input packages, then process the transport functions, then write to a series of output files. Space is discretized along an orthogonal three-dimensional grid, and advection of particles uses either a first-order Euler algorithm or a forth-order Runge-Kutta method. There are a series of ASCII input files corresponding to the individual processes to which they apply. The BTN package establishes the grid size, the time and initial conditions, as well as the location of observation points. The ADV packages specifies which of the MOC, MMOC or combination, Euler or Runge-Katta or combination methods are used, and under what concentration conditions. It also specifies maximum numbers of particles and other solution parameters. The DSP package specifies the dispersion characteristics. SSM package defines the number, type and concentration characteristics of sources or sinks. And the RCT package specifies chemical reaction terms.

APPLICATION TO THE 1996 MACRO EXPERIMENT

General Description

A series of three experiments were conducted using the same general geometry and boundary conditions with one exception. The head and rate of injection were varied between experiments (Table 1)

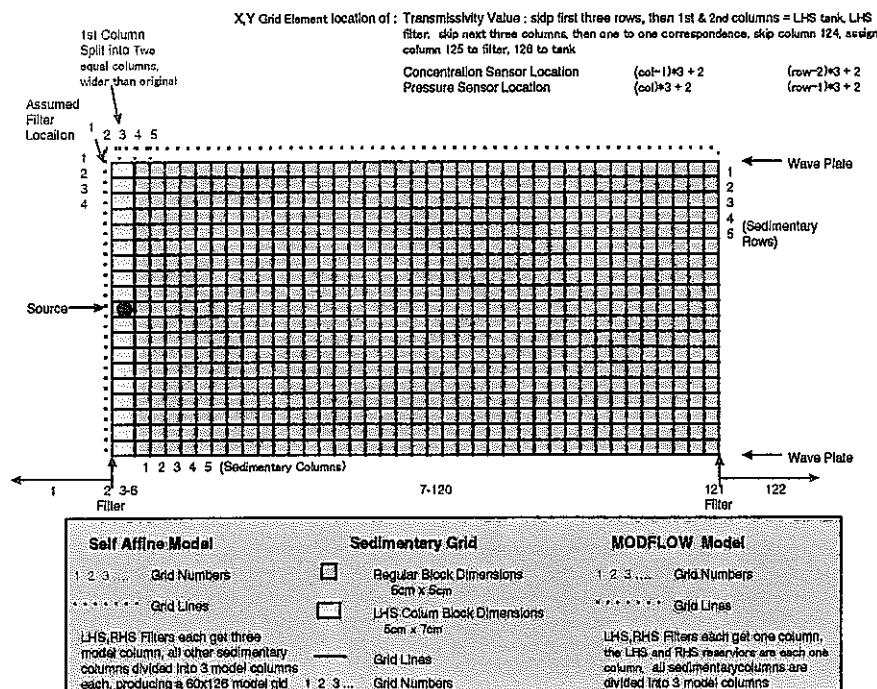
Experiment	Injection Head	Injection Rate
1	30 cm	16 ml/min
2	40 cm	82.2 ml/min
3	50 cm	92.2 ml/min

Transport simulations were performed using four different model combinations for each of the tracer tests. An un-named model was used by Dr. Jinno from Kyushu University to simulate flow and transport using a slightly modified form of the Method of Characteristics. In addition, the codes DTRANS and MACRO-AFFINITY were used by Mr. Watari. The following is a description of the fourth set of simulations which used MODFLOW and MT3D described above.

Overall Geometry

The MACRO experiments were carried out in a parallel plate, sand tank approximately 10 cm thick, 1 meter high and 2 meters long. A set of 25 pressure sensors, and 100 concentration sensors were embedded in the tank, and surrounded by 5 cm square, 10 cm thick blocks of sand from six different sand grain (glass bead) size units. The sedimentary grid was 19 rows high and 39 rows long. The injection source was located near the left hand side (LHS) boundary and consists of a 2 cm diameter porous pipe that extends through the entire thickness of the tank. Filters at both the LHS and the right hand side (RHS) of the tank provide porous interface with water reservoirs maintained at specified heads. Thus the LHS and RHS have specified head boundaries. In the tracer experiments a solution of 0.5% saline water mixed with a dye were injected and the concentration of specific points was monitored over a period of 240 minutes for Experiment 2 and 270 minutes for Experiment 3.

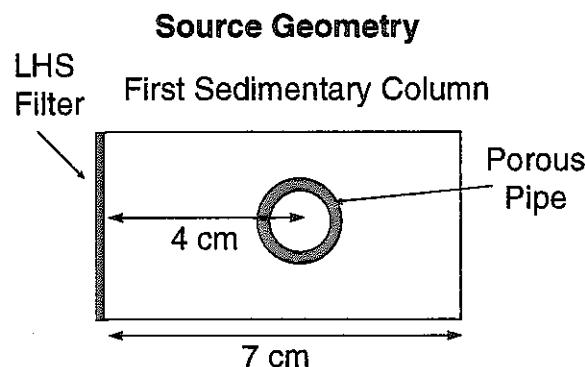
Since each of the models has slightly different capabilities for handling grid dimensions and other input parameters, the following graphic was developed to express the difference between the MACRO-AFFINITY and the MODFLOW geometry's.



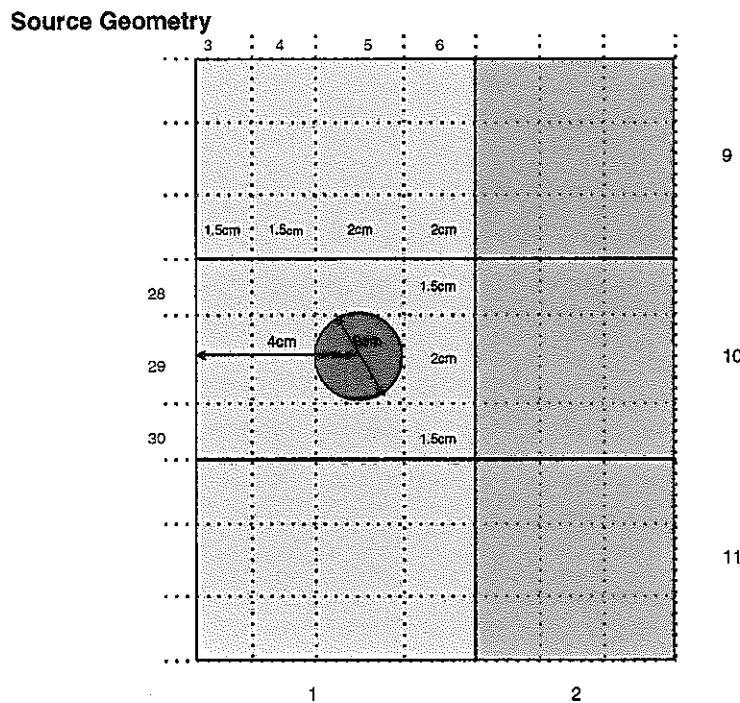
MODFLOW/MT3D were run with 57 rows and 122 columns. Each of the 19 sedimentary rows was divided into three model rows of height of 1.667 cm. The three rows corresponding to the source location were 1.5 cm, 2.0 cm, and 1.5 cm respectively. Each of the 39 standard sedimentary columns was also divided into three 1.667 cm wide columns (for a total of 117) except that the LHS column was divided into four model columns of 1.5 cm, 1.5 cm, 2.0 cm, and 2.0 cm to accommodate the source. In addition , each of the LHS and RHS filters and reservoirs was represented by one column.

Source Geometry

The source point is located in the middle or 10th row and the first column of the sedimentary grid. The following schematic shows the source geometry.

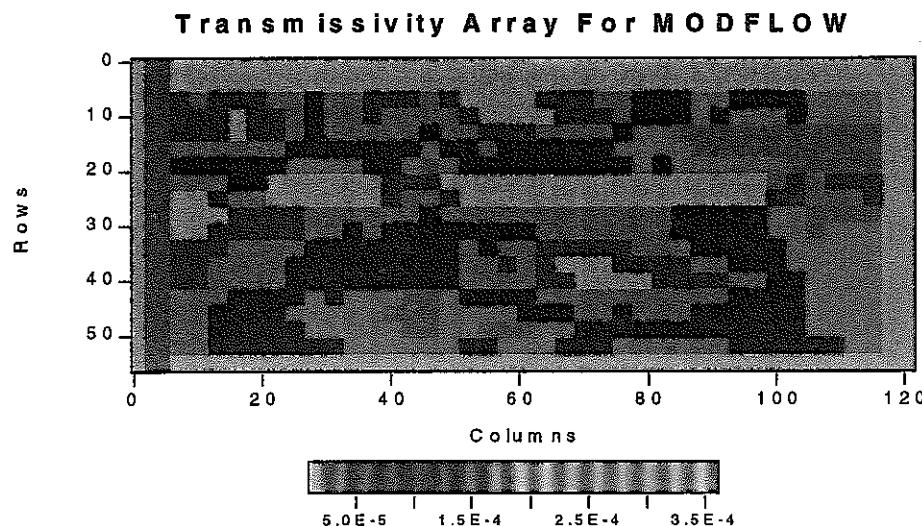


Within the MODFLOW/MT3D combination, this basic geometry became a grid node (in the block-centered arrangement of grid nodes) located at row 29, column 5.



Conductivity Field

The conductivity field was originally developed using a fractal simulator as part of the MACRO-AFFINITY code. The basic pattern was simulated then the pattern was used as a template for building the actual laboratory experimental apparatus. The pattern of heterogeneity used in this simulation is :



Simulation Approach

MODFLOW was run steady-state and calibrated to the average head value of the 19 pressure sensors that returned accurate values. Following the calibration of the MODFLOW flow model, the resulting head and velocity information was used in MT3D to track concentration transport. This second phase model was not calibrated, but was instead run in a single forward realization.

The location of the sensors was interpreted from a graphical image prepared by Mr. Watari for the MACRO-AFFINITY model. The 25 sensors locations are:

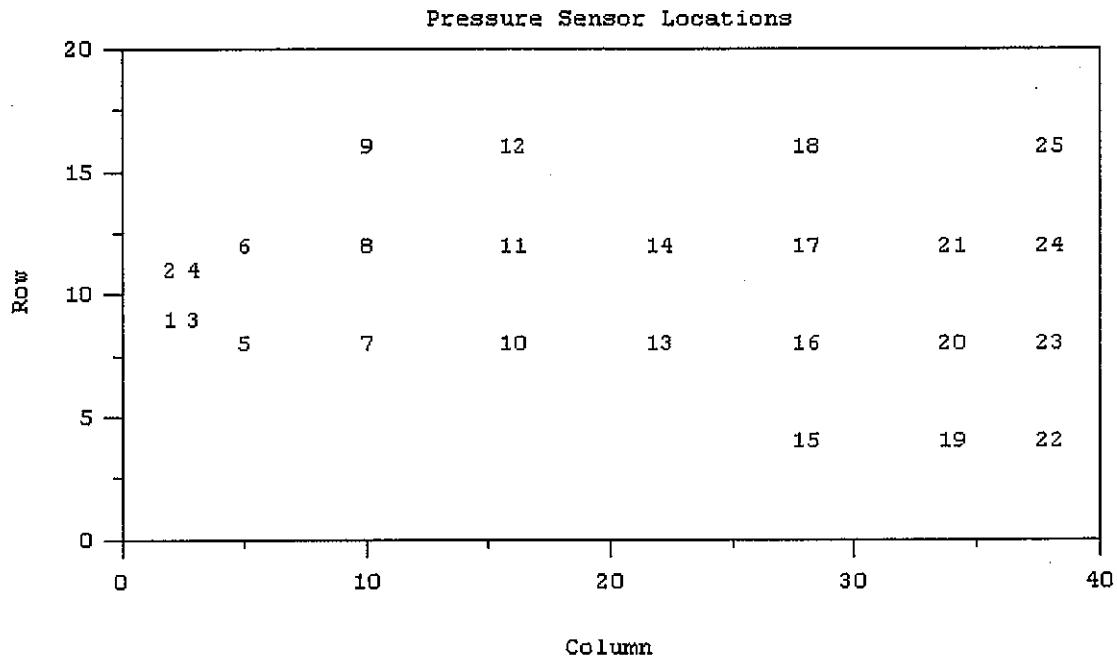
Pressure Sensor Locations

Interpreted from Graphic Image from Mr. Watari

Self Affine Model			MODFLOW Model		
Sensor #	Location		57x122 model grid		
	Row	Column	Row	Column	
1	9	2			
2	11	2	1	26	8
3	9	3	2	32	8
4	11	3	3	26	11
5	8	5	4	32	11
6	12	5	5	23	17
7	8	10	6	35	17
8	12	10	7	23	32
9	16	10	8	35	32
10	8	16	9	47	32
11	12	16	10	23	50
12	16	16	11	35	50
13	8	22	12	47	50
14	12	22	13	23	68
15	4	28	14	35	68
16	8	28	15	11	86
17	12	28	16	23	86
18	16	28	17	35	86
19	4	34	18	47	86
20	8	34	19	11	104

21	12	34	21	35	104
22	4	38	22	11	116
23	8	38	23	23	116
24	12	38	24	35	116
25	16	38	25	47	116

Sensors number 2, 6, 11, 21, 23, and 25 were not used.



MODFLOW Calibration

Calibration involved adjusting three regions of conductivity. The calibration process was performed for each of the two Experiment number 2 and Experiment number 3. The values for the left hand side filter, the right hand side filter and the effective conductivity of the injection point were adjusted until a set of calibration targets including the pressure head, the discharge, and the injection location head matched measured values. The various calibration targets and final calibration points for Experiment 2 are listed below. The calibration of Experiment 3 was similar.

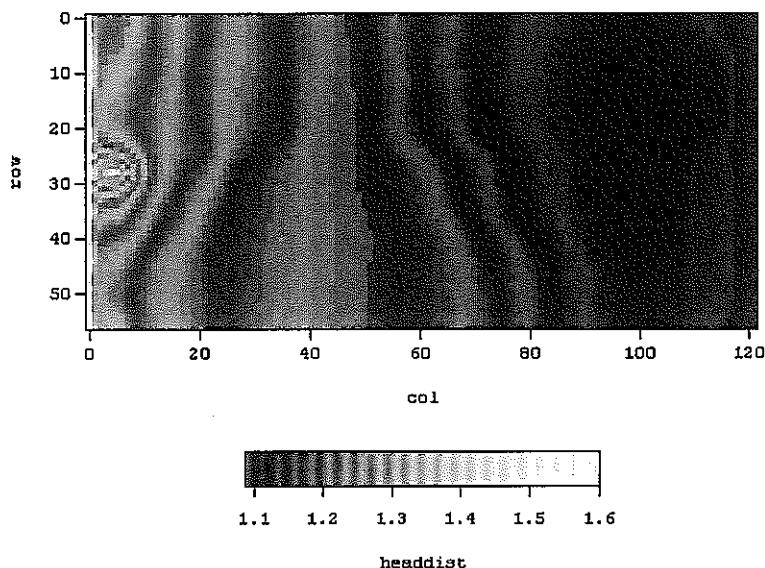
1996 Macro Experiment 2 Calibration Targets (Final)

Sens #	Row	Column	Target (m)	Sim Val (m)	Differenc e (mm)
1	26	8	1.296	1.299	3
3	26	11	1.279	1.277	-2
4	32	11	1.29	1.275	-15
5	23	17	1.232	1.253	21
7	23	32	1.24	1.224	-16
8	35	32	1.238	1.216	-22
9	47	32	1.193	1.215	22
10	23	50	1.206	1.202	-4
12	47	50	1.176	1.204	28
13	23	68	1.182	1.164	-18
14	35	68	1.177	1.177	0
15	11	86	1.134	1.133	-1

16	23	86	1.148	1.134	-14
17	35	86	1.134	1.137	3
18	47	86	1.129	1.145	16
19	11	104	1.121	1.124	3
20	23	104	1.138	1.123	-15
22	11	116	1.121	1.119	-2
24	35	116	1.112	1.116	4

Closure Error	0.1	-0.02
Tot Disch	244.4	244.4
Inject	1.49	1.49
Head		0

The resulting calibrated MODFLOW model provided a steady state distribution of head at each node point. The resulting head distribution for Experiment 3 is shown below. The head distribution for experiment 3 was similar.



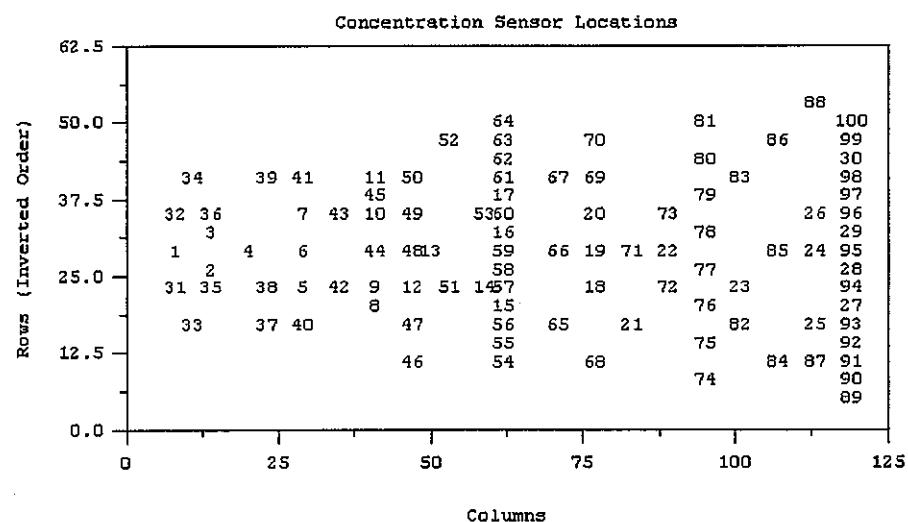
MT3D Simulation

Once the head was complete, a series of transport simulations was performed. MT3D in the mixed MOC, MMOC mode was used. The series of calculations was necessary in order to achieve completion of the simulation with a reasonable number of particles. The concentration of tracer at each grid node was saved for each of 18 specified times at increments of 15 minutes from 15 minutes to 270 minutes (Experiment 2) and to a total 240 minutes for Experiment 3. In addition, the concentration at each time step was saved for each of the 100 observation points. This very long list of output was filtered and values of concentration at each observation point at 1 minute increments was saved and plotted. The location of the 100 observation points is listed below. As subset (numbers 1, 9, 10, 16, 19, 59 were used to compare results produced by each of the different modeling approaches.

Input and output file for each of these simulations are contained in the directory :

Dec Alpha /usr2/pncgiswa/webb/lib/proj/macro96.

A list of input and output files for each of the simulations is included in hard copy with this report.



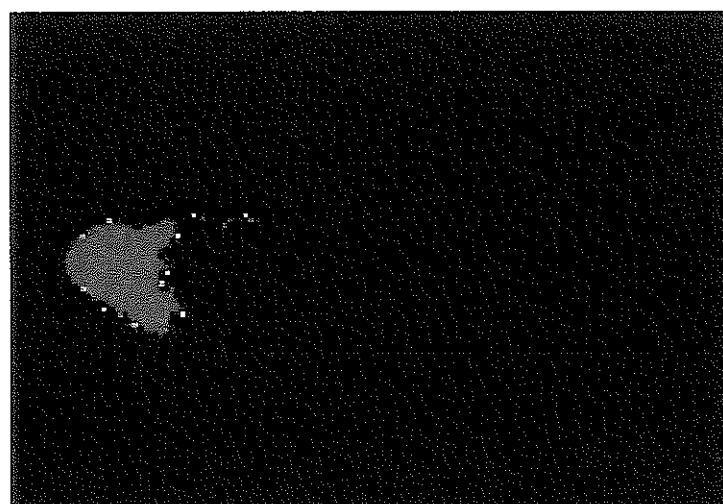
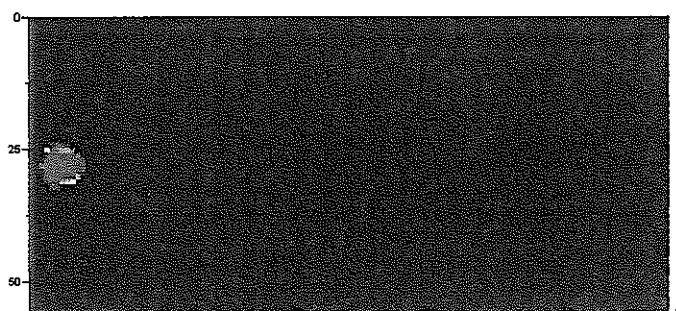
Results

The results consist of breakthrough curves at specific observation points and concentration maps in space at specified times.

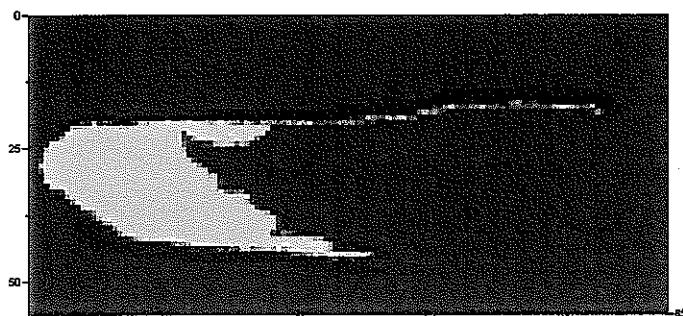
Experiment 2

The following 5 images represent concentration maps at specified times.

15 Minutes



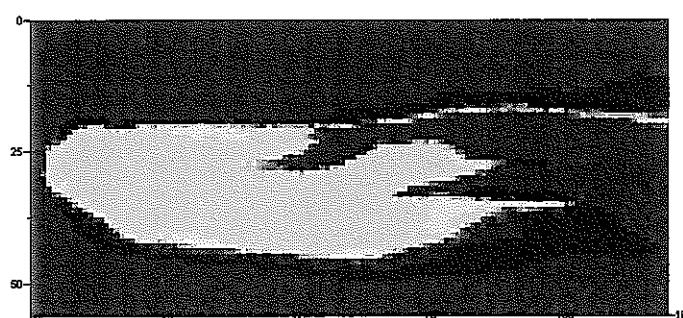
135 Minutes



210 Minutes

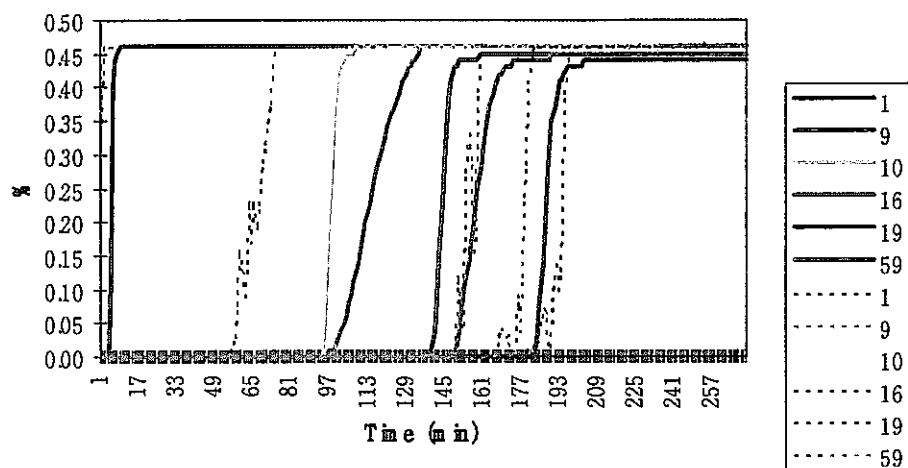


270 Minutes



The following is a set of breakthrough curves for both the original experiment (shown in bold) and the simulated results at the comparison set of sensor locations (1, 9, 10, 16, 19, 59).

1996 MACRO Exp 2

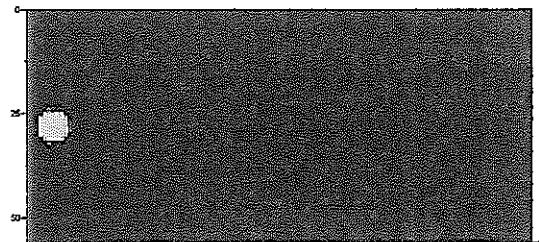


Experiment 3

The following 5 images represent concentration maps at specified times.

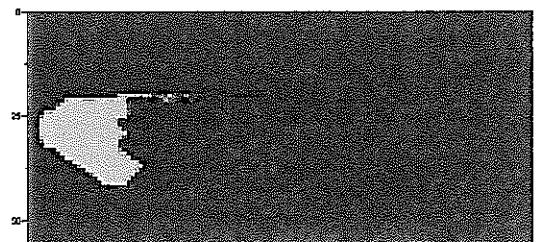
15 Minutes

1996 MACRO



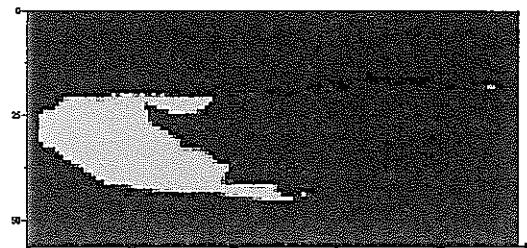
75 Minutes

1996 MACRO



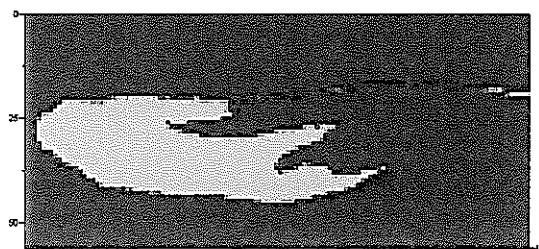
135 Minutes

1996 MACRO



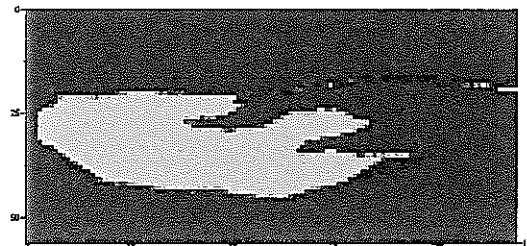
210 Minutes

1996 MACRO

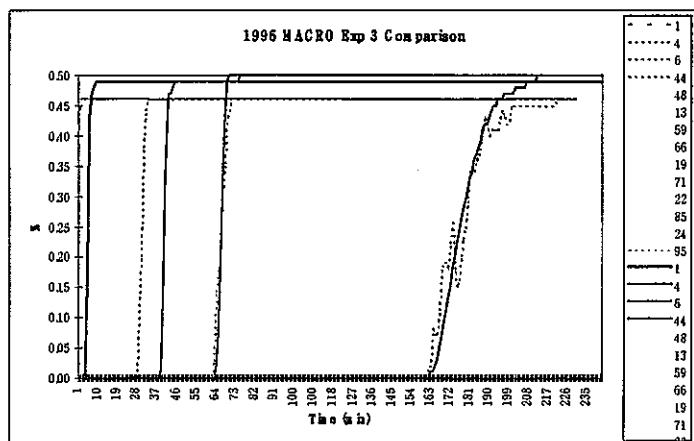


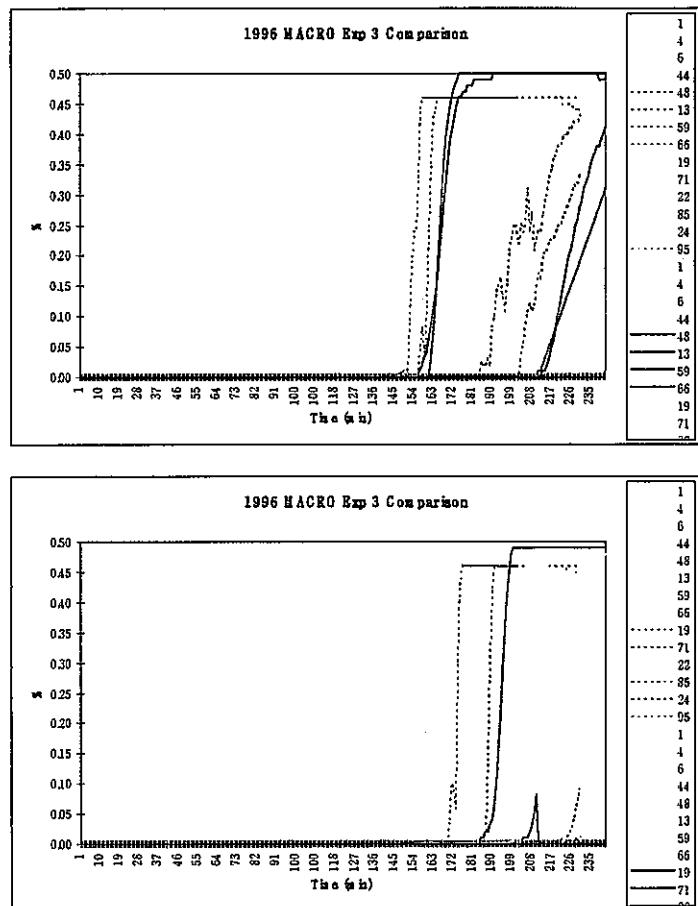
240 Minutes

1996 MACRO

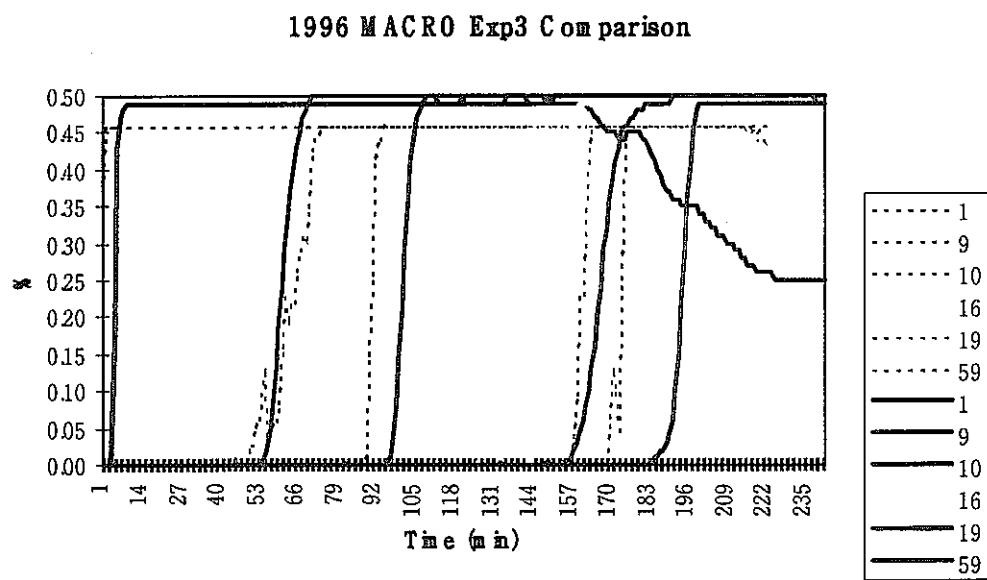


Breakthrough curves for the line of sensors along the centerline of the experiment.





Standard comparison set of sensors located at 1, 9, 10, 16, 19, and 59.



Discussion

The MODFLOW simulations are rapid and accurate, easy to perform and I think that this code should be strongly considered for any future saturated flow simulation. The version of MT3D used for this simulation was adequate and moderately accurate. It has the advantage of allowing for spatial heterogeneity of any type through its flexible input array / file structure. However, the solution process

seems relatively sensitive to the parameters that control the solution techniques. In particular the number of particles, the size of the maximum step and the concentration gradient designation that separates those portions of the system solved using MOC and those solved using MMOC. It is also important to understand that these simulations were performed under the assumption that there was no physical dispersivity (either diffusion or dispersion) below the current model grid scale.

References

- Cheng, R.T., V. Casulli and S.N. Milford. 1984, Eulerian-Lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates. *Water Resourc. Res.*, 20(7), p. 944-952.
- Garder, A.O., Jr., D.W. Peaceman and A.L. Pozzi, Jr., 1964, Numerical calculation of multidimensional miscible displacement by the method of characteristics. *Soc. Pet. Eng. J.*, 6(2), p. 175-182
- Konikow, L.F and J.D. Bredehoeft, 1978, Computer model of two-dimensional solute transport and dispersion in ground water. U.S. Geol. Surv. Water Resour. Invest. Book 7, Chapter C2, 90 pp.
- McDonald, M.G., and A.W. Harbaugh, 1988, A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model, in U.S. Geological Survey Open File Report 83-875 Book 6, chapter 1.
- Russell, T.F. and M.F. Wheeler. 1983, Finite element and finite difference methods for continuous flows in porous media. SIAM The Mathematics of Reservoir Simulation. R.E. Ewing (ed.), Chapter II., p. 35-106.
- Zheng, C., 1990, A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems, S.S. Papadopoulos & Associates Inc. report prepared for the U.S. Environmental Protection Agency's Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory.

