

汚染地下水への反応性バリアの性能評価について

勝見 武*・石森洋行**・遠藤和人***・嘉門雅史*・深川良一****

*京都大学大学院地球環境学堂

**立命館大学大学院理工学研究科

***京都大学大学院工学研究科

****立命館大学理工学部

要 旨

土壌・地下水汚染対策工法の反応透過壁工法（反応性バリア）を対象として、その設計パラメータを平面2次元浸透流解析により評価した。その結果に基づき、汚染サイトの特性に応じた最適な反応透過壁構造を見出すことができる設計手法を提案した。汚染サイトを正常に浄化することのできる条件を満たし、なおかつ施工費用が最小になるという視点から最適な反応透過壁構造を議論した。

キーワード：反応透過壁、浸透流解析、最適化問題、Retention Time、Capture Zone

1. はじめに

土壌・地下水汚染対策では、一般に、汚染源対策に重点が置かれる場合が多いが、特に立地条件等により汚染源対策に限界がある場合、汚染源そのものを取り除くよりも、汚染物質の流出を防止する方が合理的であると考えられる場合もある。このような場合における汚染物質の拡散防止対策は、地下水の流れを阻害する方法（遮水壁）や地下水の流動をコントロールする方法（バリア井戸）によって行われるのが一般的であった。しかしながら、近年、汚染物質の拡散防止の機能だけではなく浄化の機能も併せもつ新しい工法として、反応透過壁（Permeable Reactive Barrier）を用いた浄化システムが注目を集めている。地下水の流れを遮水壁（Funnel）で1ヶ所に集中させ、そこに設置した反応透過壁（Gate）を通過する汚染物質を浄化させるシステムをFunnel-and-Gate System（以下FGS）と呼ぶ。この工法は維持管理が容易であり、また、反応剤を変えることで様々な物質による汚染に対応できる特徴をも

つ。しかし、FGSを設置するまでに、大規模な掘削工事を伴うので、他の対策工法に比べて初期費用が高くなる傾向がある（Fig.1）。したがって、所要の性能水準を満たし、なおかつ費用節減を考慮した設計手法、すなわち設計手法の最適化が望まれる。

本研究では、パラメトリックスタディからFGSの性能評価を行い、FGSの最適設計手法の提案を試みた。本報では、その結果について報告する。

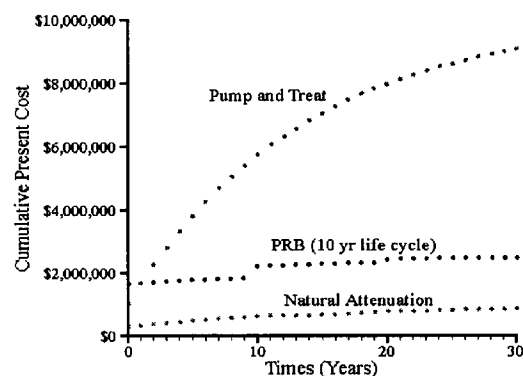


Fig.1 Cumulative costs associated with geoenvironmental remediation works

2. 反応透過壁

2.1 反応剤

反応透過壁を用いた浄化システムのメカニズムは、反応透過壁を汚染地下水が通過することによって浄化される。通過中は反応透過壁内の反応剤と接触し、化学反応が生じている。反応剤には零価鉄粉 (Fe^0) が用いられることが多く、それは TCE や Cr^{6+} による汚染に対して特に有効であるといわれている。前者は鉄粉の腐食により TCE の脱塩素反応が生じ、一方、後者は鉄粉との酸化還元反応により Cr^{6+} の還元が生じて無害化される。零価鉄粉を反応剤とする浄化メカニズムは、主に脱塩素反応と酸化還元反応によるものであるが、反応透過壁内部での生分解反応により NO_3^- や SO_4^{2-} の浄化例もある。Table 1 に零価鉄粉で浄化が期待できない汚染物質を、Table 2 に反応透過壁に用いられる反応剤の例を示す。

2.2 零価鉄粉との化学反応

(1) 脱塩素反応

脱塩素反応を引き起こす汚染物質には、TCE や PCE に代表される有機塩素化合物が挙げられる。零価鉄粉と有機塩素化合物が水中で接触すると、鉄粒子表面でアノードとカソードの分極が生じ、Fig.2 に示すように酸化還元反応的に脱塩素反応（腐食）を引き起こす。なおその際、鉄粉表面に不溶性の水酸化鉄が生成される。現状では脱塩素反応の具体的なメカニズムには不明確な点が多い。一般に脱塩素反応は、脱塩化水素反応、還元的脱塩素反応、加水分解的脱塩素反応の3つに分類される。脱塩化水素反応は塩素と水素の置換反応により生じる反応であり、 CCl_4 から CHCl_3 、 $\text{Cl}_2\text{C}=\text{CCl}_2$ から $\text{Cl}_2\text{C}=\text{CHCl}$ への反応がその代表例である。還元的脱塩素反応は塩素の脱離反応により生じる反応であり、 $\text{Cl}_3\text{C}_2\text{Cl}_3$ から $\text{Cl}_2\text{C}=\text{CCl}_2$ への反応がその代表例である。加水分解

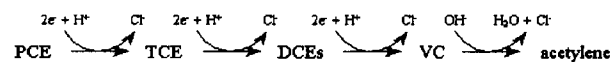
Table 1 Contaminants for which Fe^0 is not able to work

Organic Compounds	Inorganic Compounds
dichloromethane	chloride
1,2-dichloroethane	perchlorate
chloroethane	
chloromethane	

Table 2 Contaminants and reactive media

Type	Components	Reactants
Chlorinated	PCE, TCE, DCE	Fe^0
Hydrocarbon	PCBs	Pd/Fe (Bimetallic Metal)
Nutrients	Nitrogen ammonia	Zeolite
	Phosphorous	SM slag, Wastelime
Heavy Metals	Cr^{6+}	Fe^0 , Zeolite, SM slag
	Cd, Zn, Cu, Pb, CN, Hg	Zeolite, SM slag
Sulfate	SO_4^{2-}	$\text{Al}(\text{OH})_3$, SM slag, Wastelime

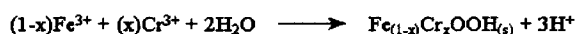
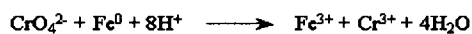
的脱塩素反応には CCl_4 から CO への反応がその代表例であるが、これは偶発的に生じる反応とされている。Cipollone ら (1995) は PCE の脱塩過程に次のモデルを提案している。



Roberts ら (1996) は、脱塩化水素反応および還元的脱塩素反応がどれくらいの割合で発生するのかをバッチ試験により評価しており、その結果 trans-DCE は cis-DCE に比べて還元的脱塩素反応を起こしやすい (VC は発生しにくい) という結果を得ている。

(2) 酸化還元反応

酸化還元反応を引き起こす汚染物質には、 Cr^{6+} に代表される重金属元素が挙げられる。 Cr^{6+} の反応は鉄粒子表面でアノードとカソードの分極が生じ、Fig.3 に示すように酸化還元反応を引き起こす。



脱塩素反応と異なる点は鉄粒子表面に水酸化鉄だけではなく、水酸化クロムも生成される。脱塩素反応に比べて多くの不溶性の沈殿物が生成されるため、

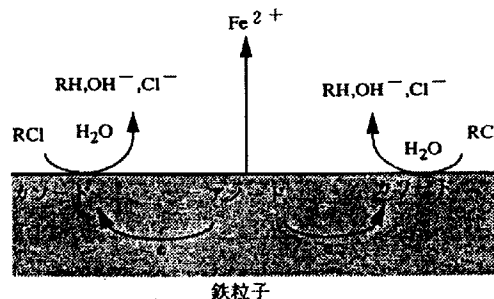


Fig.2 Dechlorination mechanism on Fe^0

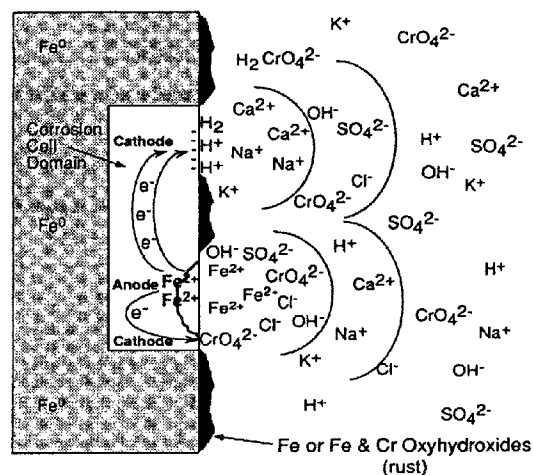


Fig.3 Redox reaction mechanics for Cr^{6+}

反応透過壁が透水性に悪影響を及ぼすと考えられる。

2.3 性能評価に関する従来の研究

反応透過壁を用いた浄化システムには、Continuous PRB (Fig.4) と FGS (Fig.5) がある。Continuous PRB は、流況に影響を与える Funnel を設置しないため、汚染地下水は周辺地盤の動水勾配、流速を維持したまま、反応透過壁を通過することができる。したがって、汚染領域の鉛直断面積と同等の Continuous PRB を設置する必要がある。Continuous PRB の設計方法については、EPA による指針 (1998) のとおり、反応透過壁に必要な鉄粉の量およびその厚さを決定することが出来る。一方、FGS は、Funnel の設置により、反応透過壁内の流速は周辺地盤のそれに比べて高くなり、また、汚染地下水の捕捉範囲も複雑化する。このような流況変動を定量的に評価することは困難であり、そのため、明確な FGS の設計手法が確立されていないのが現状である。FGS の設計手法ないし、性能評価に関する研究は、Starr と Cherry (1994) や Shikaze (1996) によって行われているが、その数はまだまだ不十分であると考えられる。なお、Starr と Cherry は平面 2 次元飽和定常浸透流解析 (解析コード: FLONET) により Gate を通過する流量を、Gate の幅、透水係数、Funnel の幅を変化させ評価しており、また Funnel の角度の有効性を地下水流向の点から評価している。一方、Shikaze は 3 次元飽和定常浸透流解析 (解析コード: FRAC3DVS) により Gate を通過する流量およ

び汚染地下水の捕捉範囲を、Gate の透水係数と地盤の透水係数の比、Funnel の幅と FGS の深さの比、Funnel の幅と Gate の幅の比、動水勾配を変化させ評価している。

3. Funnel-and-Gate System の性能評価

3.1 概要

FGS に対して最適設計を行う場合、まず FGS の性能に影響を及ぼす因子を把握する必要がある。FGS の性能には、浄化性能および集水性能が挙げられる。これらは、FGS の形状特性や材料特性ならびに周辺地盤環境に依存すると考えられる。そこでまず、FGS の特性がその浄化性能及び集水性能にどのような影響を及ぼすかを平面 2 次元飽和定常浸透流解析から評価した。

3.2 浸透方程式

地盤中の微小要素への質量収支を考え、質量保存則を導くと次式が成立する。

$$\frac{\partial \rho \theta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

ここに、 ρ : 水の密度、 θ : 体積含水率、 u : 地下水流速を表わす。地下水流速 u は、ダルシーの法則を準用して次式で与えられる。

$$u_i = -K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (2)$$

ここに、 K_{ij} : 透水テンソル、 $h (= p / \rho g + z)$: ピエゾ水頭を表わす。(1)式に(2)式を代入することによって、浸透方程式が次式により導かれる。なお、水は非圧縮性としている。

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (3)$$

3.3 解析手法と解析条件

(3)式に対して、平面 2 次元飽和定常条件のもとに有限要素法を用いてパラメトリックスタディを実施した。解析平面図を Fig.6、そのメッシュ図を Fig.7 に示す。なお、解析平面は y 軸方向に面対象としている。地下水の流向は x 軸方向で、動水勾配 $i = 1/100$ と仮定し、Funnel の厚さを 1 m とした。その他の解析条件は図中に示す通りである。解析は Table 3、Fig.8 に示すように、Gate の幅 (W_{gate})、Gate の長さ (L_{gate})、Gate の透水係数 (k_{gate})、Funnel の幅 (W_{funnel})、Funnel の角度 (θ_{funnel}) をそれぞれパラメトリックに

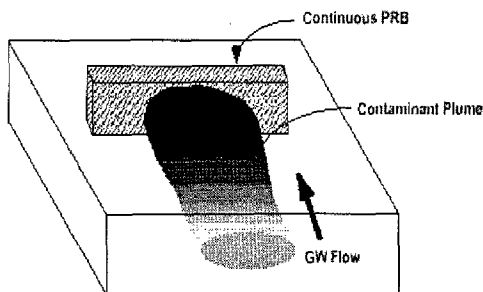


Fig.4 Continuous permeable reactive barrier (PRB)

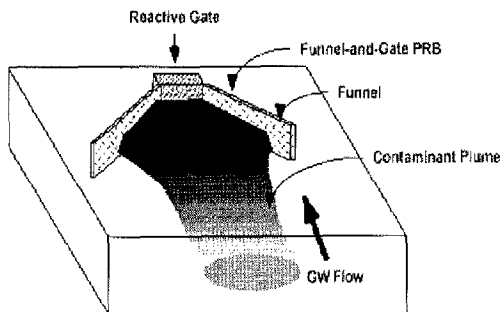


Fig.5 Funnel-and-gate system (FGS)

Table 3 Conditions of the numerical analysis

	k_{aquifer} (cm/s)	W_{gate} (m)	L_{gate} (m)	$k_{\text{gate}}/k_{\text{aquifer}}$	W_{funnel} (m)	θ_{funnel} (deg)	k_{funnel} (cm/s)
GW-Series	5.0×10^{-3}	2 ~ 12	1	10	8	180	1.0×10^{-6}
GL-Series	5.0×10^{-3}	4	1 ~ 11	0.1 ~ 1000	8	180	1.0×10^{-6}
GK-Series	5.0×10^{-3}	4	1	10	8	180	1.0×10^{-6}
FW-Series	5.0×10^{-3}	4	1	10	2 ~ 32	180	1.0×10^{-6}
FA-Series	5.0×10^{-3}	4	1	10	8	20 ~ 180	1.0×10^{-6}

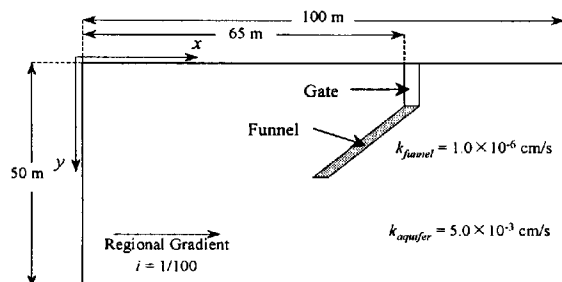


Fig.6 Plan used for the numerical seepage analysis

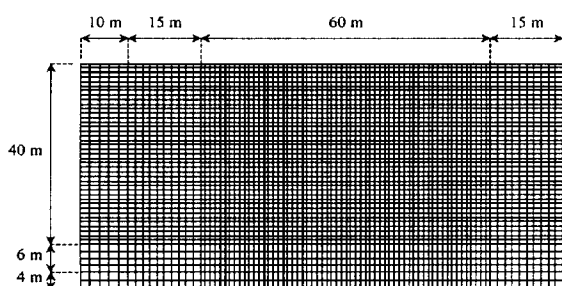


Fig.7 Mesh plan for the numerical analysis

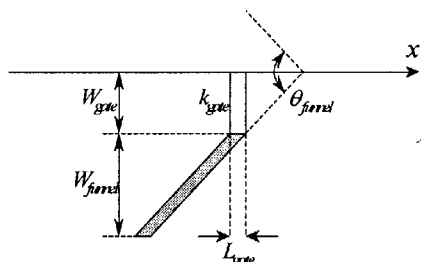


Fig.8 Parameters for the analysis

変化させて実施した。FGS の性能を表わす指標としては、浄化性能、集水性能を挙げ、これらを定量化するため、Retention Time、Capture Zone を解析により評価した。

Retention Time は地下水の Gate 内での滞留時間を表わし、次式で評価した (Fig.9)。

$$\text{Retention Time} \approx \sum_{i=1}^{n_{gl}} \left\{ \frac{(l_g)_i}{\max_{j=1, \dots, n_{gw}} (u_x(i, j))} \right\} \quad (4)$$

ここに、 u_x : x 軸方向のダルシー流速、 n_{gw} : Gate の η 方向のメッシュ数、 n_{gl} : Gate の ξ 方向のメッシュ数を表わす。Retention Time が大きいほど汚染物質を十分に減衰できる。なお、減衰速度は、対象とする汚染物質および反応剤とその量に依存する。

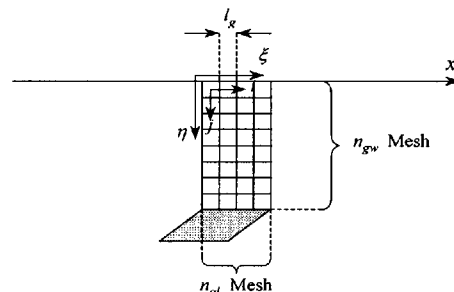


Fig.9 Drawing illustrating how to obtain the retention time

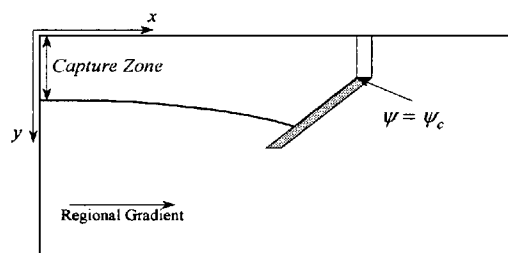


Fig.10 Drawing illustrating how to obtain the capture zone

Capture Zone は FGS による汚染地下水の捕捉可能範囲を表わし、次式で評価した (Fig.10)。

$$\text{Capture Zone} = y_{x=0, \varphi=\varphi_c} \quad (5)$$

ここに、 φ_c : Gate と Funnel 境界部における流れ関数を表わす。なお、流れ関数についてはコーシー・リーマンの関係式より求めている。

3.4 解析結果

(1) Gate の幅による影響 (GW-Series)

GW-Series の解析結果を Fig.11 に示す。Retention Time は Gate 内流速、すなわち Gate 単位長さあたりの汚染地下水処理量に依存する。そのため、FGS の集水性能が変化すると、Retention Time も変化する。ここでは、他の要因が集水性能へ及ぼす変化が小さい FGS が小規模の場合で検討を行ったため、Retention Time には、ほとんど影響を及ぼさない結果を示した。しかしながら、集水性能を向上させる要因 Gate の厚さ、透水係数、Funnel の幅を増加させると、Gate の幅の影響が顕著に表われるだろう。一方、Capture Zone への影響は、Gate の幅を増加させると Capture Zone に線形的な増加がみられた。また、その勾配は 1 に近いことから、Gate の幅がそのまま

Capture Zone に影響したと考えられる。

(2) Gate の厚さによる影響 (GL-Series)

GL-Series の解析結果を Fig.12 に示す。Retention Time への影響は、Gate の厚さを増加させると Retention Time に線形的な増加がみられた。これは、Gate の厚さを増加させることによって、汚染地下水の Gate 内滞留時間が増加したためである。一方、Capture Zone への影響は、ほとんどみられなかった。

(3) Gate の透水係数による影響 (GK-Series)

GK-Series の解析結果を Fig.13 に示す。Retention Time は、Gate と地盤との透水係数比が 10 以下では減少するが、透水係数比が 10 以上になると減少しない。これは、Gate の透水係数を向上させても、Gate 背面の地盤の透水係数が Gate のそれよりも著しく低いために、Gate からの地下水の流出を妨げているためと考えられる。一方、Capture Zone は、透水係数比が 10 以下では増加するが、透水係数比が 10 以上になると増加しない。なお、周辺地盤の透水係数 $k_{aquifer}$ のオーダーを変化させて同条件で解析を試みると、Retention Time へは同オーダーの変化がみられたが、Capture Zone への影響はみられなかった。

(4) Funnel の幅による影響 (FW-Series)

FW-Series の解析結果を Fig.14 に示す。Retention Time への影響は、Funnel の幅が増加すると Retention Time の減少がみられた。これは集水範囲が増加し、Gate 単位長さあたりの汚染地下水処理量が増加したためと考えられる。一方、Capture Zone への影響は、Funnel の幅が増加すると Capture Zone の増加がみられた。

(5) Funnel の角度による影響 (FA-Series)

FA-Series の解析結果を Fig.15 に示す。Funnel の角度が 90° 以下の場合、角度の減少に伴い Retention Time の増加がみられたが、Capture Zone に変化はみられなかった。本解析の条件は W_{funnel} 一定で行っており、角度の減少は Funnel の実質長さの増加を意味することから、効率的ではないと考えられる。また、Funnel に角度がある場合、Capture Zone は上流側に減少する傾向がある。そのため、Funnel の角度の小さい FGS を設置するよりも、Funnel を取付けずに Gate のみで浄化を行う Continuous PRB を設置する方が効率的な場合も考えられる。Funnel の角度の有効性は、地下水流向が変動する場合や不均一な地盤に対して有効と考えられる。

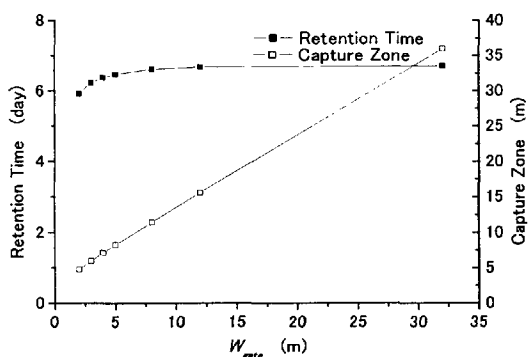


Fig.11 Results of numerical analysis on the effect of gate width: gate width versus retention time and capture zone

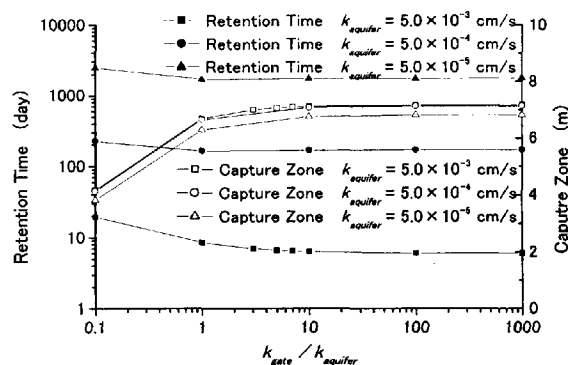


Fig.13 Results of numerical analysis on the effect of gate hydraulic conductivity: gate hydraulic conductivity versus retention time and capture zone

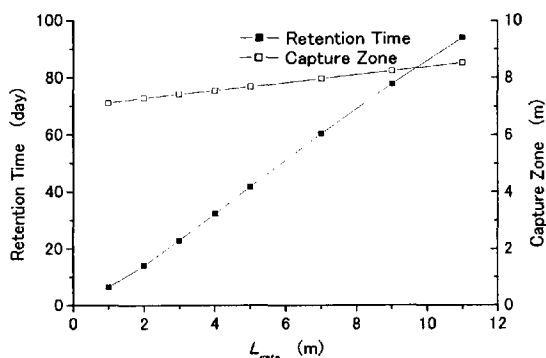


Fig.12 Results of numerical analysis on the effect of gate length: gate length versus retention time and capture zone

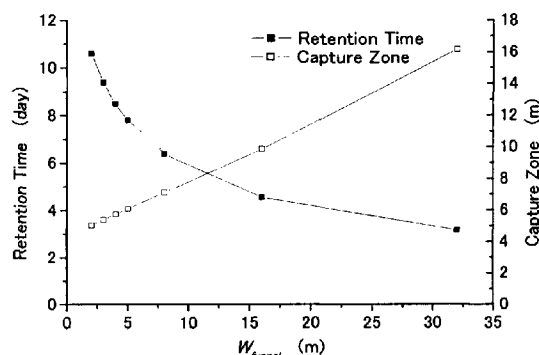


Fig.14 Results of numerical analysis on the effect of funnel width: funnel width versus retention time and capture zone

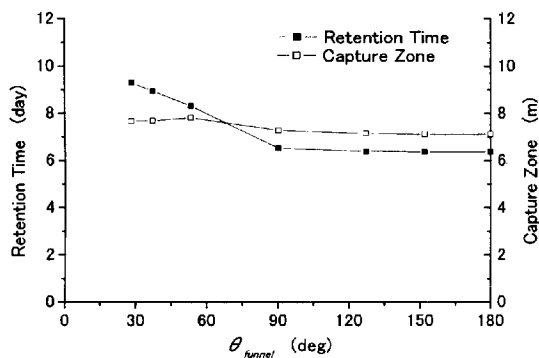


Fig.15 Results of numerical analysis on the effect of funnel angle: funnel angle versus retention time and capture zone

3.5 まとめ

Funnel-and-Gate System に及ぼす要因を浸透流解析によって調べた。透水係数比 ($k_{gate}/k_{aquifer}$) 10 以下では、Retention Time および Capture Zone への感度が非常に大きい。また Funnel の角度は 90° 以下では Retention Time の向上が得られるが、それは Funnel の実質長さの増加を意味するので効率的ではない。以上から、設計には、透水係数比 10 以上、 $90^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ の条件が有効であり、さらに性能評価を行う上で Gate の幅と厚さ、Funnel の幅を検討する必要があることが示唆された。

そこで、透水係数比を 10、Funnel の角度を 180° と固定し、Gate の幅と厚さ、Funnel の幅をパラメトリックに変化させ、同様の解析を行った結果を Fig.16 に示す。また、解析結果を Table 4 に整理した。Retention Time および Capture Zone は次式に示すように、任意関数 f_1, f_2 によって表わされることが示唆された。

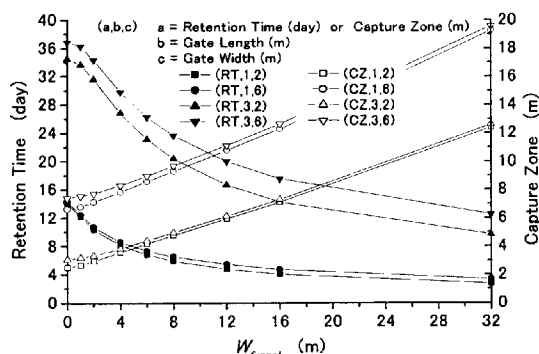


Fig.16 Effect of some geometrical conditions on retention time and capture zone

Table 4 Summary of the sensitivity results of parameters

	Retention Time	Capture Zone
W_{gate}	great effect	significant effect
L_{gate}	significant effect	minor effect
W_{funnel}	minor negative effect	minor effect

$$Retention Time = f_1(W_{gate}, L_{gate}, W_{funnel}) \quad (6)$$

$$Capture Zone = f_2(W_{gate}, L_{gate}, W_{funnel}) \quad (7)$$

ただし、小規模の Gate ($W_{gate} \leq 3 \text{ m}$, $L_{gate} \leq 3 \text{ m}$) をもつ FGS を解析する場合には Capture Zone に対するパラメータ L_{gate} の感度は低いいため、(7)式中の L_{gate} は無視しても構わないと考えられる。なお、Retention Time については動水勾配 i 、地盤の透水係数 $k_{aquifer}$ にも影響を受けるが、ともに線形的なオーダー変化を及ぼすに過ぎないので無視した。

4. 最適設計手法の提案

4.1 概要

FGS 設計方法の考え方は、Gate へ流入する高濃度の汚染地下水を低濃度まで減衰させる浄化性能を有すること、そして対象とする汚染領域を捕捉する集水性能を有することである。汚染調査から得られる汚染濃度、汚染領域から所要の性能を満たす FGS の条件を見出し、その中から最も施工費用が低くなる条件をパラメトリックスタディの結果から検討した。

4.2 Residence Time

汚染地下水と Gate 内の反応剤が接触すると、化学反応が起こる。Fig.17 のように反応が開始してから、汚染地下水がある濃度になるまでに必要な時間を Residence Time とする。汚染地下水と反応剤が一次反応で進行すると仮定すると、Residence Time は次式を解くことによって求められる。

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_A[A] \quad (8)$$

ここに、 $[A]$: 汚染物質の濃度、 k_A : 反応速度定数を表わす。反応速度定数は汚染物質の種類と反応剤の種類によって定まるものである。また、Fig.18 に示



Fig.17 First-order reaction

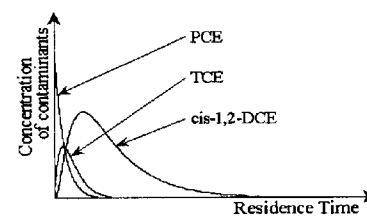


Fig.18 Sequential reaction

すように、汚染地下水と反応剤の反応から副汚染物質を生成する場合（例えば PCE から TCE が副生成される等）、Residence Time の評価には副汚染物質の減衰も考慮する必要がある。このとき、Residence Time は次式を解くことによって求められる。

$$\begin{aligned} d[A]/dt &= -k_A[A] \\ d[B]/dt &= k_A[A] - k_B[B] \\ d[C]/dt &= k_B[B] - k_C[C] \\ d[D]/dt &= k_C[C] - k_D[D] \\ d[E]/dt &= k_D[D] \end{aligned} \quad (9)$$

ここに、[B]～[D]：副生成物の濃度、[E]：最終生成物の濃度、 $k_B \sim k_D$ ：反応速度定数。各汚染物質に対する反応速度定数の代表的な値を Table 5 に示す。なお表中の数値は、溶液 1 mL あたり鉄粉総表面積 1 m² に対する値である。一例として、汚染物質 PCE と零価鉄粉との反応における Residence Time の計算例を Table 6 に示した。なお、Table 6 は(9)式に対して Runge-Kutta 法を用いて計算している。ここでは、PCE から副生成される TCE、cis-1,2-DCE および VC の減衰を考慮し、cis-1,2-DCE が地下水環境基準値 0.04 mg/L に達するまでの時間を Residence Time とした。一般に、VC の反応速度定数は cis-1,2-DCE に比べて大きいため、cis-1,2-DCE が 0.04 mg/L まで減衰するとき、VC も同等の濃度まで減衰していると考えられるからである。

Table 5 Published reaction rates of contaminants with Fe⁰

Type	Organic Compounds	Reaction Rate (1/hr)	
		Pure Iron	Commercial Iron
Ethenes	Tetrachloroethene	0.133 (min) – 2.476 (max)	0.064 (min) – 0.330 (max)
	Trichloroethene	0.071 (min) – 1.035 (max)	0.151 (min) – 0.151 (max)
	1,1-Dichloroethene	0.126 (min) – 0.248 (max)	0.019 (min) – 0.046 (max)
	trans-1,2-Dichloroethene	0.108	0.091 (min) – 0.141 (max)
	cis-1,2-Dichloroethene	0.035	0.015 (min) – 0.064 (max)
	Vinyl Chloride	0.055	0.056 (min) – 0.148 (max)
Ethanes	Hexachloroethane	53.329	—
	1,1,2,2-Tetrachloroethane	13.081	—
	1,1,1,2-Tetrachloroethane	14.148	—
	1,1,1-Trichloroethane	0.495 (min) – 10.666 (max)	0.169 (min) – 0.408 (max)
	1,1-Dichloroethane	—	—
Methanes	Carbon Tetrachloride	30.142 (min) – 231.091 (max)	0.816 (min) – 2.236 (max)
	Chloroform	0.465 (min) – 0.950 (max)	0.144
	Bromoform	16.909	—
Other	1,1,2-Trichlorotrifluoroethane	0.680	—
	1,2,3-Trichloropropane	—	0.029
	1,2-Dichloropropane	—	0.154
	1,3-Dichloropropane	—	0.315
	1,2-Dibromo-3-chloropropane	—	0.963
	1,2-Dibromoethane	—	0.107 (min) – 0.462 (max)
	n-Nitrosodimethylamine	0.379	—
	Nitrobenzene	86.659	—

Notes: These values are normalized to 1 m² iron surface per mL solution.

Table 6 Examples of the calculated residence time

Initial Concentration of PCE (mg/L)	Reaction Rate (1/hr)				Residence Time (day)
	PCE	TCE	cis-1,2-DCE	VC	
10 (fastest case)	2.476	1.035	0.064	0.148	3.65
10 (slowest case)	0.064	0.071	0.015	0.055	16.74
100 (fastest case)	2.476	1.035	0.064	0.148	5.15
100 (slowest case)	0.064	0.071	0.015	0.055	23.14

4.3 目的関数と制約条件式

FGS の設計を最適化問題とするため、目的関数と制約条件式を定義した。ここでは、最適化の目的として FGS 施工費用の最小化を取り上げ、目的関数として次式を定義する。

【 Minimize 】

$$\text{Cost index} = a \cdot W_{\text{gate}} \cdot L_{\text{gate}} + b \cdot W_{\text{funnel}} \quad (10)$$

ここに、Cost index：施工費用を表わす指標、 a ：Gate を 1 m² 施工するのに必要な費用係数 (1/m²)、 b ：Funnel を 1 m² 施工するのに必要な費用係数 (1/m²) を表わす。なお、ここでは問題を単純化させるために鉄粉の含有量による費用は考慮していない。また、FGS が所要の性能を満たす必要があるため、制約条件式として次式が定義できる。

【 Subject to 】

$$\text{Retention Time} \geq \text{Residence Time} \quad (11)$$

$$\text{Capture Zone} \geq \text{Contaminant Width} \quad (12)$$

ここに、Contaminant Width は汚染領域幅の半分の値である (Fig.19)。汚染調査から得られる汚染濃度をもとに(8)式もしくは(9)式を解けば Residence Time が得られ、一方、汚染領域から Contaminant Width が得られるので、これらは既知量となる。

4.4 最適化問題の解法例

(6)(7)式に示すように、Retention Time は W_{gate} 、 L_{gate} 、 W_{funnel} 、Capture Zone は W_{gate} 、 L_{gate} 、 W_{funnel} によって決まる。ゆえに、(10)式を目的関数、(11)(12)式を制約条件式とするならば、式 3 つに対して独立変数も 3 つとなり、この最適化問題は閉じる。(10)～(12)式を数学的に解くには、(6)(7)式における任意関数 f_1 、 f_2 を特定する必要がある。しかし、現状ではこれらの関数を特定するまでに至っていないので、ここでは Retention Time および Capture Zone が Fig.16 中のプロットのように離散値として与えられた場合の解法例を示す。

(1) 変数の定義

目的関数(10)式および制約条件式(11)(12)式を次のような数式で表わす。

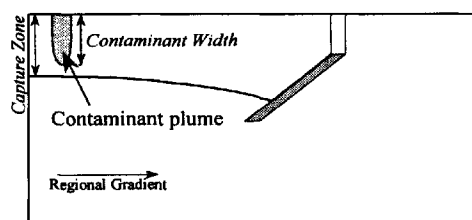


Fig.19 Relation between capture zone and contaminant width

$$\text{【Minimize】} \quad \text{Cost index} = c(x) \quad (13)$$

$$\text{【Subject to】} \quad f_i(x) = y_i \quad i = 1, 2 \quad (14)$$

ここに、 $x = (x_1, x_2, x_3)$ 、 $x_1 = W_{\text{gate}}$ 、 $x_2 = L_{\text{gate}}$ 、 $x_3 = W_{\text{funnel}}$ 、 $c(x) = ax_1x_2 + bx_3$ ((10)式の右辺)、 $y_1 = \text{Residence Time}$ 、 $y_2 = \text{Contaminant Width}$ を示し、 f_1 は Retention Time を与える関数、 f_2 は Capture Zone を与える関数を表わす。また、数値計算結果として与えられるある FGS 幾何条件 ($x_1 = x_1[l]$ 、 $x_2 = x_2[m]$ 、 $x_3 = x_3[n]$) に対する Retention Time を $f_1(x_{l,m,n})$ 、Capture Zone を $f_2(x_{l,m,n})$ と表わす。ここに、 $x_{l,m,n} = (x_1[l], x_2[m], x_3[n])$ であり、 l は 1 から l_{end} まで、 m は 1 から m_{end} まで、 n は 1 から n_{end} まで動く。 l 、 m 、 n はそれぞれ x_1 (Gate の幅)、 x_2 (Gate の厚さ)、 x_3 (Funnel の幅) の標本点を表わすものであり、例えば $1 \leq l \leq 5$ の場合、

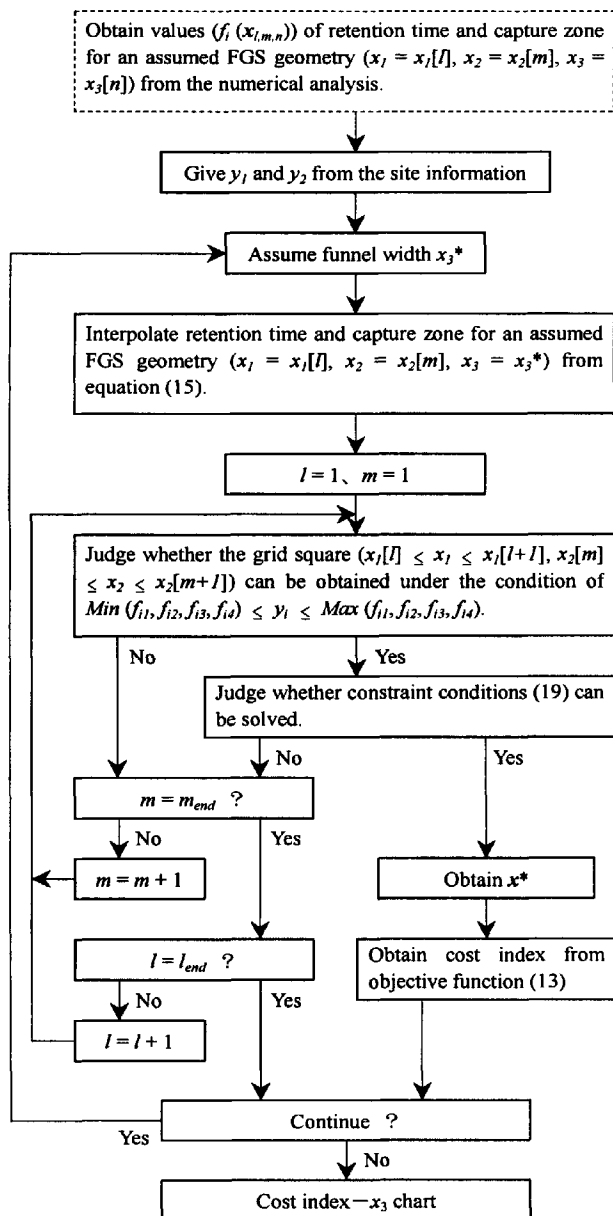


Fig.20 Optimum design flow of FGS

数値計算は x_1 を 5 ケース、パラメトリックに変化させている。なお、 l_{end} 、 m_{end} 、 n_{end} はそれぞれの総標本数を表わす。

(2) 最適化問題解法の流れ (Fig.20)

(13)(14)式からなる最適化問題を解くには、標本点外の任意の点 x での関数値 $f(x)$ が必要になる。ここで必要な作業は、各標本点 $x_{l,m,n}$ 通って何らかの滑らかな曲線 (直線) を描き、任意の点 x についての関数値 $f(x)$ を推測 (補間) することである。

(13)(14)式からなる最適化問題を解くには、任意の Funnel の幅 x_3^* を仮定し独立変数を 2 つに減らし、まず(14)式の 2 次元連立方程式を 2 次元補間計算より解く。すると、 $x_3 = x_3^*$ のときに制約条件式を満たすべき x_1 、 x_2 が求まる (このときの解を x^* とする)。解 x^* を(13)式に代入すれば、 $x_3 = x_3^*$ ときの Cost index が求まる。以上を仮定する Funnel の幅 x_3^* をパラメトリックに変化させ、その都度 Cost index を計算し評価すれば、最小の Cost index を与える FGS 最適幾何条件 x が求まる。なお、(13)(14)式を 3 次元連立方程式とみなし 3 次元補間計算を用いて最適解 x を求めることはできない ((13)式は目的関数であり、左辺と右辺が等しいことを示す方程式ではない)。

(3) 最適化問題解法の詳細

① 任意の Funnel の幅 x_3^* を仮定し、その条件下での関数値 $f_i(x_{l,m}^*)$ を補間計算する。ここに、 $x_{l,m}^* = (x_1[l], x_2[m])$ である。

$x = x_3^*$ における関数値 $f_i(x_{l,m}^*)$ を計算する。補間計算には線形補間を適用し、次式により補間する。

$$f_i(x_{l,m}^*) = f_i(x_{l,m,n}) - \frac{\partial f_i}{\partial x_3} \cdot (x_3[n] - x_3^*) \quad (15)$$

$$\text{ここに、} \frac{\partial f_i}{\partial x_3} = \frac{f_i(x_{l,m,n}) - f_i(x_{l,m,n+1})}{x_3[n] - x_3[n+1]}$$

② $x_3 = x_3^*$ における関数値 $f_i(x_{l,m}^*)$ を用いて、(14)式を満たす解 x^* を求める。なお、 $x^* = (x_1, x_2)$ at $x_3 = x_3^*$ である。

$x_3 = x_3^*$ の条件下において、独立変数を x_1 、 x_2 とする(14)式、すなわち 2 元連立方程式を解く。(14)式を満足する解 x^* を得るためには、 x_1 、 $x_2 - f_1$ 系 (f_1 : Retention Time) にて y_1 の等値線 ((14)式における $i = 1$ の条件、Fig.21(a)) を描き、また同様に、 x_1 、 $x_2 - f_2$ 系 (f_2 : Capture Zone) にて y_2 の等値線 ((14)式における $i = 2$ の条件、Fig.21(b)) を描き、この 2 つのグラフを重ね合わせときの y_1 と y_2 の等値線の交点を求めればよい (Fig.21(c))。ここで重要な概念は、交点 (x_1, x_2) が含まれる格子の目、すなわち目的の点を囲む 4 つの標本点である。便宜上、Fig.21(d)のように、この 4 点に左下から反時計回りに 1 から 4 までの番

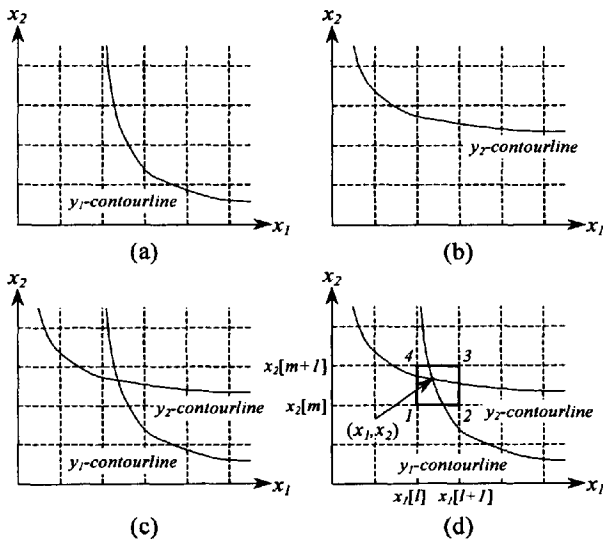


Fig.21 The state of constraint conditions: (a) in $x_1, x_2 - f_1$ coordinate system, and (b) in $x_1, x_2 - f_2$ coordinate system, and (c) in $x_1, x_2 - f_1, f_2$ coordinate system, and (d) labeling points of a

号を付ける。正確に言うと、

$$\begin{aligned} x_1[l] &\leq x_1 \leq x_1[l+1] \\ x_2[m] &\leq x_2 \leq x_2[m+1] \end{aligned} \quad (16)$$

により l, m を定め、

$$\begin{aligned} f_{i1} &= f_i(x_{1,m}^*) \\ f_{i2} &= f_i(x_{1+1,m}^*) \\ f_{i3} &= f_i(x_{1+1,m+1}^*) \\ f_{i4} &= f_i(x_{1,m+1}^*) \end{aligned} \quad i = 1, 2 \quad (17)$$

とする。 $f_{i1} \sim f_{i4}$ は格子の目（各標本点）における Retention Time あるいは Capture Zone の値であり、既知である。必要なことは交点 (x_1, x_2) を求めることであり、それは y_1 と y_2 が交わると考えられる格子内の点 (x_1, x_2) を、格子を形成する 4 つの標本点での関数値 $f_{i1} \sim f_{i4}$ から補間（2 次元補間）することである。補間計算には双 1 次補間（Bilinear 法）を適用し、その公式は次式で与えられる。

$$f_i(x^*) = (1-t)(1-u)f_{i1} + t(1-u)f_{i2} + tuf_{i3} + (1-t)uf_{i4} \quad i = 1, 2 \quad (18)$$

$$t = (x_1 - x_1[l]) / (x_1[l+1] - x_1[l])$$

$$u = (x_2 - x_2[m]) / (x_2[m+1] - x_2[m])$$

続いて、(14)式に(18)式を代入することにより、制約条件式を満足する解 x^* を求めるための方程式が次のように導かれる。

$$\begin{aligned} (1-t)(1-u)f_{i1} + t(1-u)f_{i2} \\ + tuf_{i3} + (1-t)uf_{i4} = y_i \quad i = 1, 2 \end{aligned} \quad (19)$$

ただし、 $\min(f_{i1}, f_{i2}, f_{i3}, f_{i4}) \leq y_i \leq \max(f_{i1}, f_{i2}, f_{i3}, f_{i4})$

基本的には、(19)式を満たす x_1, x_2 を求めれば、(14)式を満足する解 x^* を求めたことになる。また、 $\min(f_{i1}, f_{i2}, f_{i3}, f_{i4}) \leq y_i \leq \max(f_{i1}, f_{i2}, f_{i3}, f_{i4})$ は等値線 y_1 および y_2 が対象とする格子内を通過するため条件である。 $\min(f_{i1}, f_{i2}, f_{i3}, f_{i4}) \leq y_i \leq \max(f_{i1}, f_{i2}, f_{i3}, f_{i4})$ の条件を満足している状態は、Fig.22 に示すとおりである。注意すべきことは、Fig.22(b)に示すような y_1, y_2 が交わらない場合である。このような場合は 2 つ考えられる。1 つは解析結果である $f_i(x_{1,m,n})$ の絶対数が少ないとき、もう 1 つは他の格子内で y_1 と y_2 の等値線が交わる時である。これらの問題を回避するためには、(19)式の連立方程式数値解法として反復法を用いるのが妥当と考えられる。ある規定反復回数内で収束すること、許容誤差内におさまることなど、 y_1 と y_2 の等値線が交わるための条件を付加させればよい。このような条件を吟味しても x_1, x_2 を求めることができないならば、それは手持ちの解析結果では $x_3 = x_3^*$ においては(14)式を満足できないということである。なお、本解析では反復法として Newton-Raphson 法を用いている。

③ 目的関数から x^* における Cost index を算出する。

④ ①～③までのサイクルを x_3^* を変化させて行い、最小の Cost index を与える x^* を求める。

4.5 計算結果

前章の解析結果（動水勾配 $i = 1/100$ 、地盤の透水係数 $k_{aquifer} = 5.0 \times 10^{-3}$ cm/s、透水係数比 $k_{gate} / k_{aquifer} = 10$ 、Funnel の角度 $\theta_{funnel} = 180^\circ$ の条件下での性能評価：Fig.16）から、Fig.20 のフローチャートに基づき最適化問題を解いた結果を Fig.23 に示す。Fig.23 は、横軸に Funnel の幅、左縦軸に Cost index、右縦軸にある Funnel の幅で FGS を設計した際に必要とされる Gate の幅、厚さ（解 x^* ）を示し、黒プロットは Cost index を、白プロットは Gate の幅（右下がりの傾向を示す曲線）、厚さ（右上がりの傾向を示す曲線）に対応する。汚染サイトの特徴（Residence Time、Contaminant Width）や Gate の費用係数と Funnel の費用係数の比（ a/b ）によって最小の Cost index を

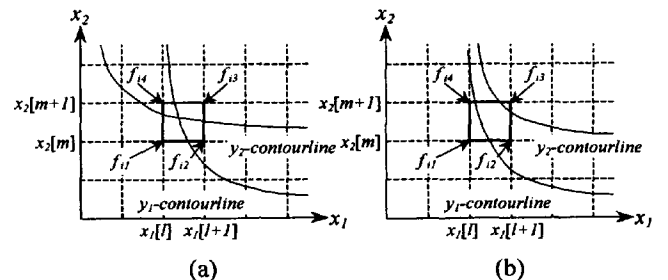


Fig.22 Interpolation from labeled points: (a) a case when the solution can be found, and (b) a case when the solution cannot be found

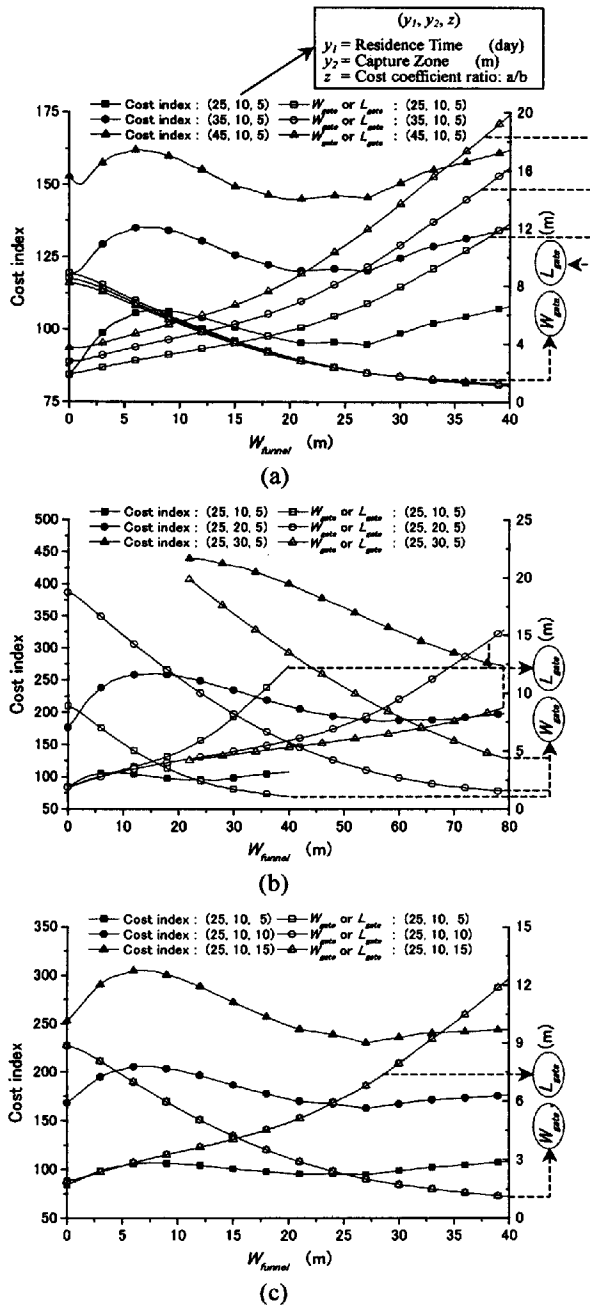


Fig.23 Cost index - x_3 charts from optimum design flow: (a) effect of residence time, (b) effect of capture zone and (c) effect of cost coefficient ratio

与える最適な Funnel の幅は異なる。特に、Contaminant Width は最適な Funnel の幅へ与える影響は大きく、また Cost index への影響も大きい。おおむね、最小の Cost index を与える最適な Funnel の幅は 2 通り考えられ、1 つは Funnel を設置しない ($W_{funnel} = 0$ m) 場合であり、もう 1 つは Funnel を設置する場合である。前者はまさに Continuous PRB に相当し、一方、後者は FGS に相当する。Continuous PRB と FGS、どちらがより小さな Cost index を与えるかは、Residence Time、Contaminant Width および

費用係数比によって決まる。それを示したのが Fig.24 である。Fig.24 は、Fig.23 において $W_{funnel} = 0$ m における Cost index と $W_{funnel} > 0$ m における最小の Cost index が等しくなる Residence Time、Contaminant Width および費用係数比を調べたものである。曲線上の点は $W_{funnel} = 0$ m における Cost index と $W_{funnel} > 0$ m における最小の Cost index が等しいことを示している。汚染調査から得られる Residence Time および Contaminant Width が、区分曲線に対して正の領域 (右上) に属するならば FGS が有効であり、一方、区分曲線に対して負の領域 (左下) に属するならば Continuous PRB が有効になる。図中の破線部は推定値であり、本解析条件では求めることができなかった (最小の Cost index を与える最適な Funnel の幅が 1 m 以下になる)。

Fig.24 に加えて、FGS の最適な幾何条件 (最小の Cost index を与える Gate の幅、厚さおよび Funnel の幅) を記したものを Fig.25 に示す。Fig.25 は、各々の費用係数比における FGS の最適な幾何条件を示したものである。いかなる Residence Time、Contaminant Width および費用係数比においても、最適な Gate の幅は 2~3 m の範囲にあった (Fig.23)。前章の解析結果 (Table 4) では Capture Zone の向上には Gate の幅を増加させることが特に有効であると示されたが、実際に Gate と Funnel の施工費用を勘案したとき、Capture Zone の向上には Funnel の幅を増加させる方が効果的であったと考えられる。また、Funnel の幅が増加すると Retention Time の低下が起るため、それを補うだけの Gate の厚さを増加させる必要がある。このようなことから、Contaminant Width が増加すれば最適な Gate の厚さと Funnel の幅が増加し、Residence Time が増加すれ

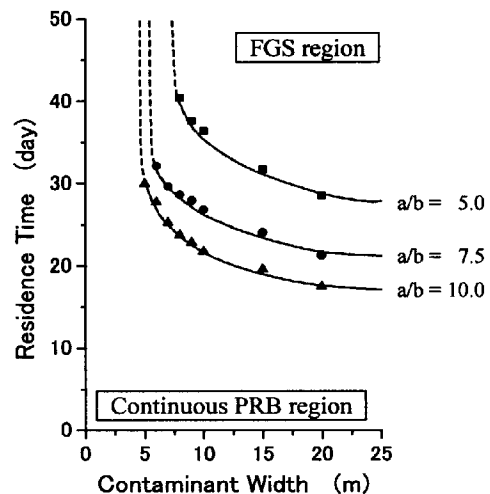


Fig.24 Dividing curves whether continuous PRB or FGS is appropriate

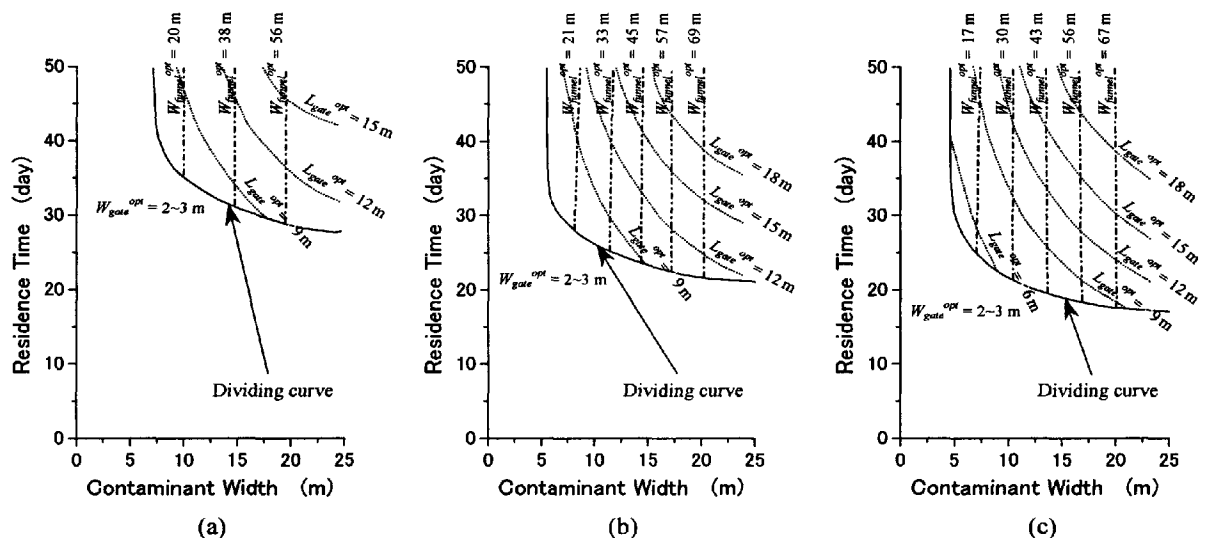


Fig.25 Chart obtaining Optimum FGS geometry: (a) at $a/b = 5.0$, (b) at $a/b = 7.5$, and (c) at $a/b = 10.0$

ば最適な Gate の厚さが増加する結果となった。なお、安価で高減衰性の反応剤 (Residence Time ≤ 10 days) を用いれば、どのような汚染サイトに対しても FGS よりも Continuous PRB の方が有効になると考えられる。

本章で紹介した FGS 最適設計手法は、パラメトリックスタディによる性能評価が前提となっている。したがって、FGS の最適な幾何条件が正確に求められるか否かは、パラメトリックスタディの精度に左右されるといっても過言ではないだろう。したがって、ある汚染サイトに対して FGS の最適な幾何条件を求めたいのならば、Fig.25 から大まかな FGS の最適な幾何条件を推定しておき、その幾何条件に近い値をパラメトリックに変化させて性能評価を行い、真の最適な幾何条件を見出すのがよいと考えられる。

5. 結び

浸透流解析による性能評価を行って、FGS の最適設計の考え方を提案した。なお本報では、問題を単純化させるために、反応剤の含有量、充填率による影響を無視して性能評価を行っている。反応剤の含有量、充填率は Residence Time および Retention Time に影響を与え、また、設計費用にも影響を与えると考えられる。今後は、反応剤の含有量、充填率による影響を考慮し、さらに汚染物質の分散現象にも着目して FGS の性能評価を行うとともに、性能評価結果をリスク評価に取り込むことを考えている。

最後に、本研究より得た結論を以下にまとめる。

- 1) Gate の透水係数は周辺地盤に比べて 10 倍以上、Funnel の角度は $90^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$ が適している。

- 2) Gate の幅、厚さ、Funnel の幅が FGS の性能に影響を及ぼし、この 3 つのパラメータから FGS の最適設計を行うことができる。
- 3) Retention Time の向上には Gate の厚さを増加させること、Capture Zone の向上には Gate の幅を増加させることと最も有効である。また、Funnel の幅は Retention Time および Capture Zone に対して相反する影響を示す。
- 4) 反応透過壁を用いた 2 種類の浄化システム、Continuous PRB と FGS は、Residence Time、Contaminant Width および Gate と Funnel の費用係数比によって使い分けることが可能である。Residence Time ≤ 20 days、Contaminant Width ≤ 10 m のときは、Continuous PRB の方が有効である。また、安価で高減衰性 (Residence Time ≤ 10 days) の反応剤を用いれば、どのような汚染サイトに対しても Continuous PRB が有効になる。
- 5) FGS の最適幾何学条件は、Residence Time、Contaminant Width および費用係数比に依存する。Residence Time が増加すると最適な Gate の厚さは増加し、Contaminant Width が増加すると最適な Gate の厚さおよび Funnel の幅は増加する。
- 6) パラメトリックスタディによる FGS の性能評価から FGS 最適幾何条件を見出す場合、その最適幾何条件の値はパラメトリックスタディの精度に依存する。そのためパラメトリックスタディの解析条件には十分に注意する必要がある。特に、解析領域は FGS に対して十分に広くとることが望ましい。

参考文献

- 丹慶勝市, 奥村晴彦, 佐藤俊郎, 小林 誠 (1993): *NUMERICAL RECIPES in C (日本語版)*. 技術評論社.
- 根岸昌範, 李 昌洙, 下村雅則, 松山明人, 今村 聡 (1999): 鉄粉を用いた有機塩素化合物の浄化対策. 第2回環境地盤工学会シンポジウム. 地盤工学会. pp.35-40.
- Cipollone, M. G., Wolfe, N. L. and Hassan, S. M. (1995): Kinetic studies on the use of metallic iron to reduce organic compounds in water under environmental condition. *Am Chem Soc. Div Environ Chem*. Vol.35. pp.812-814 (Abstract).
- Gavaskar, A. R., Gupta, N., Sass, B. M., Janosy, R. J. and O'Sullivan, D. (1998): *Permeable Barriers for Groundwater Remediation*. Battelle Press.
- Powell, R. M., Blowes, D. W., Gillham, R. W., Schultz, D., Sivavec, T. et al. (1998): Permeable Reactive Barrier Technologies for Contaminant Remediation. EPA/600/R-98/125 September.
- Powell, R. M., Puls, R. W., Hightower, S. K. and Sabatini, D. A. (1995): Coupled iron corrosion and chromate reduction: mechanisms for subsurface remediation. *Environ Sci Technol.* Vol.29. pp.1913-1922.
- Roberts, A. L., Totten, L. A., Arnold, W. A., Burris, D. R. and Campbell, T. J. (1996): Reductive elimination of chlorinated ethylenes by zero-valent metals. *Environ Sci Technol.* Vol.30. pp.2654-2659.
- Shikaze, S. (1996): 3D numerical modeling of groundwater flow in the vicinity of funnel-and-gate systems. ARA-TR-96-5286-1. Prepared by Applied Research Associates, Inc. for U.S. Air Force, Tyndall Air Force Base, FL. April.
- Starr, R. C. and Cherry, J. A. (1994): In situ remediation of contaminated ground water: the funnel-and-gate system. *Ground Water*. Vol.32(3). pp.465-476.
- Vidumsky, J. (2000): Permeable reactive barriers. Advances in Innovative Ground-Water Remediation Technologies Conference. Boston, MA. June (<http://www.gwrtac.org/>).

Evaluation of the Performance of Permeable Reactive Barriers for Contaminated Groundwater Remediation

Takeshi Katsumi*, Hiroyuki Ishimori**, Kazuto ENDO***, Masashi Kamon*, and Ryoichi Fukagawa**

* Graduate School of Global Environmental Studies, Kyoto University

**Department of Civil Engineering, Ritsumeikan University

***Department of Civil Engineering, Kyoto University

Synopsis

Performance of permeable reactive barriers for contaminated groundwater remediation was evaluated using FEM seepage analysis. The retention time and the capture zone were calculated on the funnel-and-gate systems (FGSs) having different geometries, in order to evaluate the effects of these geometries on the FGSs performance. Based on the calculated results, costs associated with the installation of funnel-and-gate systems satisfying a certain performance were obtained to estimate the cost-effective geometry. Finally, optimum design flow for FGS was proposed.

Keywords: groundwater; seepage analysis; remediation; FEM; funnel-and-gate system