

汚染拡散シミュレーションとジクロロメタンの遅延係数、減衰定数

## 目 次

1. 基礎式	1
2. 地下水解析と汚染拡散解析の整合性	3
3. ジクロロメタンの遅延係数 $R_d$	6
4. ジクロロメタンの減衰定数 $\lambda$	8

## 図 表

参考図 3.1 地下水解析による水位と観測井戸水位	3
参考図 3.2 流速ベクトル図	4
参考図 3.3 実測と解析における 1,4-ジオキサン濃度分布比較	5
参考表 3.1 汚染物質の遅延係数	6
参考表 3.2 遮水壁外における観測井のジクロロメタン濃度の経時変化	8
参考図 3.4 ジクロロメタン濃度の経年変化	9
参考表 3.3 ジクロロメタンの半減期	9

# 汚染拡散シミュレーションとジクロロメタンの遅延係数、減衰定数

## 1. 基礎式

(1)飽和・不飽和浸透流の式

$$\text{div}(k \times \text{grad} \cdot h) = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad \text{ここに、} k : \text{透水係数、} h : \text{水頭、} S : \text{比貯留係数}$$

$$v = k \times \text{grad} \cdot h \quad v : \text{平均流速}$$

(2)物質移流拡散方程式

$$R_d \times \frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D \times \text{grad} \cdot C) - \text{div}(V \times C) - \lambda C$$

ここに、 $C$  : 濃度、 $t$  : 時間、 $D$  : 拡散係数、 $V$  : 間隙流速 ( $= v/n$ )、 $R_d$  : 遅延係数、 $\lambda$  : 減衰定数

$$R_d = 1 + \rho_s K_d / n \quad n : \text{有効間隙率、} \rho_s : \text{土粒子の密度、} K_d : \text{分配係数}$$

$$D = \alpha \times V + \tau D_m \quad \alpha : \text{分散長、} \tau : \text{屈曲度、} D_m : \text{分子拡散係数}$$

### 1)分散長 $\alpha$

分散とは、流れの方向に広がる現象であり、分散長は、縦分散長と横分散長に分けられ、縦分散長は、流れ方向に地下水の流速に先行して濃度がぶれる度合いを表し、横分散長は流れに直交する方向への濃度のぶれの度合いを表す。

一般に分散長は、巨視的な地盤の不均質性による流速のばらつきにより、移行距離に依存することが言われている。また、横分散長は縦分散長の 1/10 程度と一般に言われている。

$$\text{縦分散長：} \alpha_L, \text{横分散長：} \alpha_T$$

### 2) 分子拡散係数 $D_m$

分子は、絶対零度にならない限り絶えず運動しておりこの運動により濃度の拡散が起こる。液体の分子拡散係数は、気体のそれに比較して 1 万分の 1 程度である。また、液体の分子拡散係数の値は小さく、

例えば、水の分子拡散係数は、 $1 \times 10^{-9} \text{m}^2/\text{s}$  程度であり、移流速度が代表的な地下水流速の 0.1m/day から 10m/day の範囲であれば分子拡散による影響はほとんど無視出来ると考えられる。

### 3) 屈曲率 $\tau$

屈曲率、物理-化学的な流路の曲折の比を表し、実際の流路長さ  $Le$  に対する直線流路長さ  $L$  の比で定義される。

$$\tau = [L/Le]^2$$

実際の地盤においては地下水流速が速く相対的に分子拡散係数の与える影響が少ない。

### 4) 遅延係数 $R_d$

汚染物質が地盤中の間隙を移動する際、地盤に吸着あるいは脱着現象が起こる。これにより汚染物質の移動が地下水の移動速度に比較して遅れる。これを遅延係数として扱い、次式で表す。

$$R_d = 1 + \rho_s K_d / n \quad n : \text{有効間隙率、} \rho_s : \text{土粒子の密度、} K_d : \text{分配係数}$$

#### 5) 減衰定数 $\lambda$

汚染物質は土着菌等による自然分解や化学的分解等により濃度が減少する現象が生じる。減衰定数は、このような自然分解により物質濃度が 1/2 になる期間（半減期）より算出される。

## 2. 地下水解析と汚染拡散解析の整合性

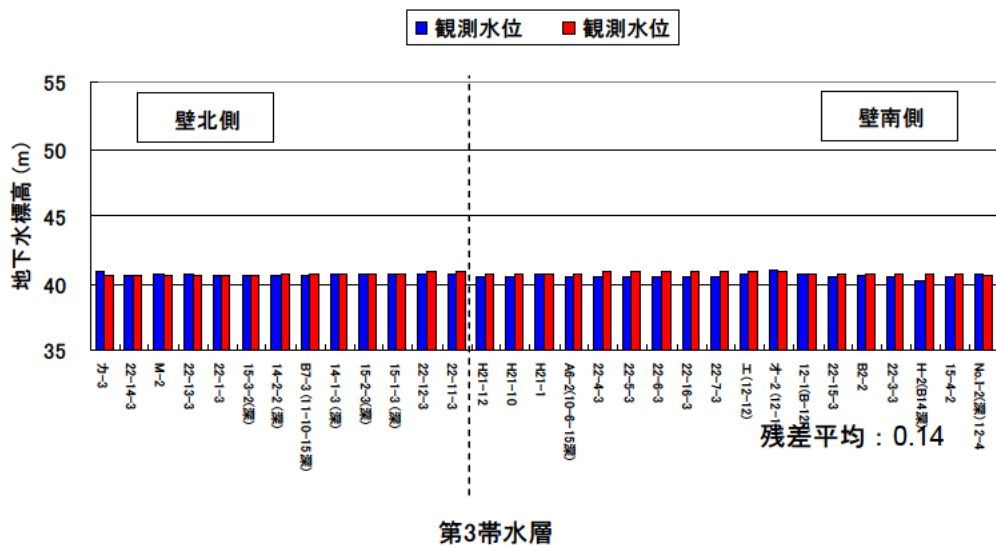
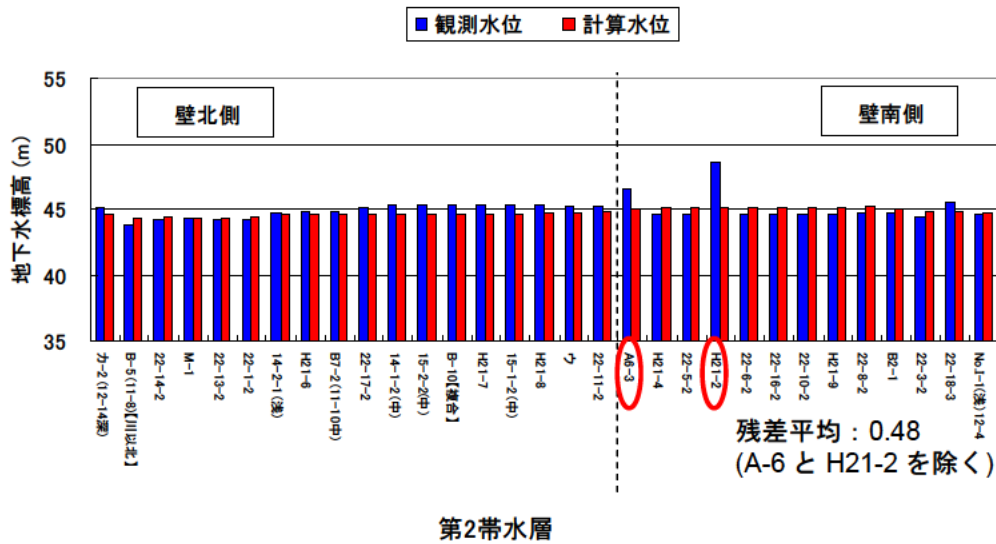
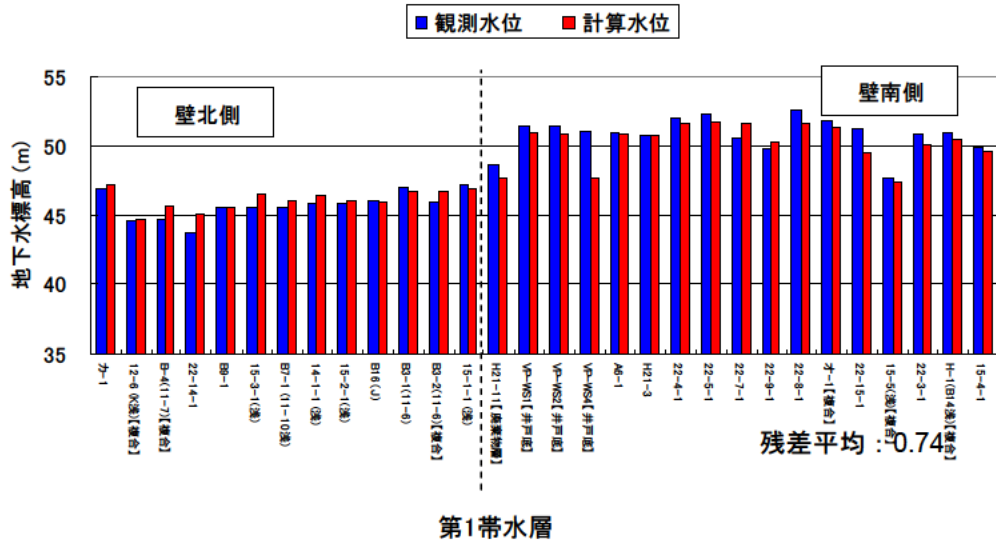
### (1) 地下水流解析結果

地下水流解析は定常解析とする。地下水解析の水位は、観測井戸の水位とほとんど変わらず、現況を反映させた結果となっており、地下水解析結果の妥当性が確認される（参考図 3.1 と参考図 3.2）。

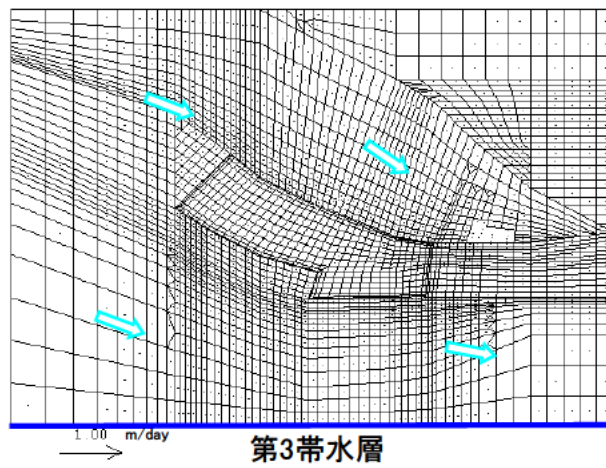
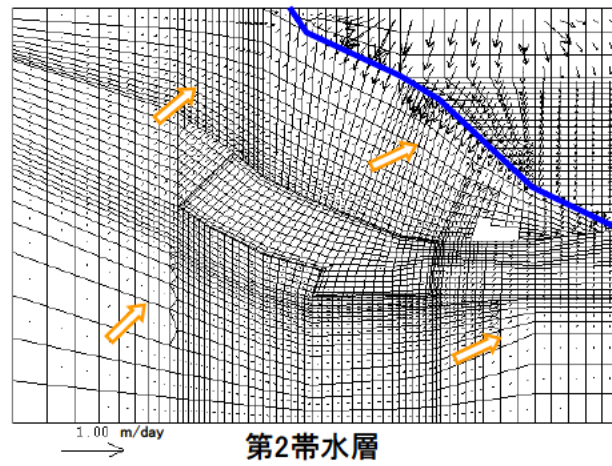
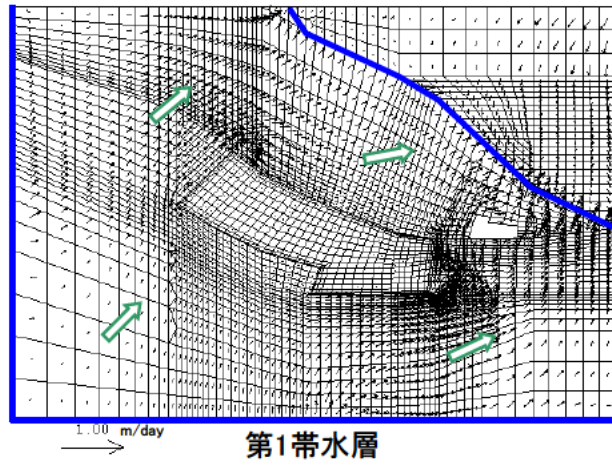
### (2) 汚染拡散シミュレーション結果

平成 22 年における 1,4-ジオキサン濃度分布と解析による濃度分布を比較すると、第 2 帯水層と第 3 帯水層の汚染拡散範囲は、実測の濃度コンターと概ね一致する結果となっており、第 2 帯水層と第 3 帯水層では、実測を反映されたものとなって解析の妥当性が確認される（参考図 3.3）。

一方、第 1 帯水層の汚染拡散範囲は実測の濃度コンターより広がった分布となっており、この原因としては降雨や拡散源の濃度経時変化を考慮していないことなどが考えられる。



参考図 3.1 地下水解析による水位と観測井戸水位

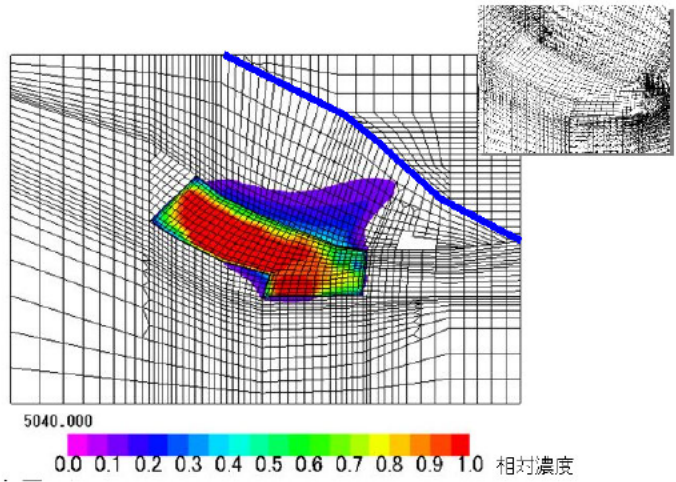


参考図 3.2 流速ベクトル図

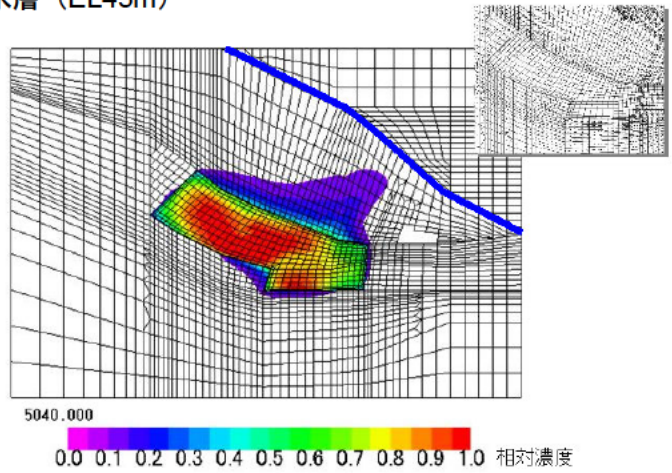
実測値による濃度コンター



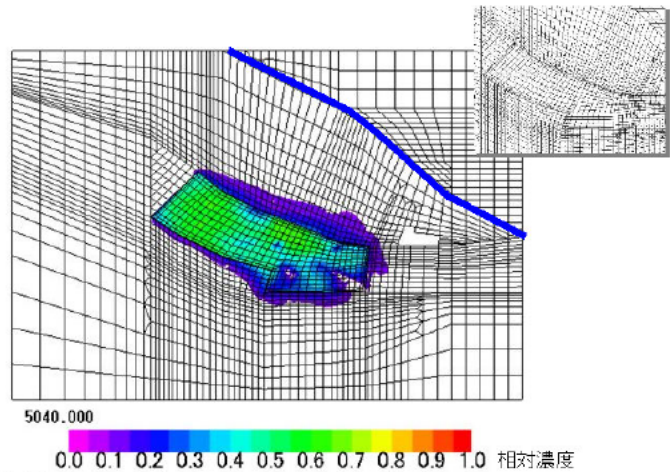
解析による濃度コンター



第1帯水層 (EL45m)



第2帯水層 (EL42m)



第3帯水層 (EL36m)

参考図 3.3 実測と解析における 1,4-ジオキサン濃度分布の比較 (平成 22 年)



### 3. ジクロロメタンの遅延係数 $R_d$

遅延係数  $R_d$  は、汚染物質の移動が吸着によってどの程度遅れるかを示す係数で、1以上の値を示し、大きいほど広がりが遅いことになる。 $R_d = 1$  とは汚染物質は地下水と同様に広がることを意味する。遅延係数  $R_d$  は、分配係数  $K_d$  を測定して次の式から求められる。

ここで、分配係数  $K_d$  は、液相濃度に対する固相中の物質質量濃度である。

$$R_d = 1 + \rho_s K_d / n \quad n : \text{有効間隙率}, \rho_s : \text{土粒子の密度、}$$

参考表 3.1 に汚染物質の遅延係数等を示す。

参考表 3.1 汚染物質の遅延係数等

KANSO: 土壌・地下水汚染リスク評価のための情報統合化に関する検討委託(第3次)報告書, 2006								
汚染物質	logKow	logKoc	有機物/水分配係数	有機物含有量	分配係数(2)式	土壌密度	有効間隙率	遅延係数(1)式
			Koc(cm3/g)	foc(g/g)	Kd(cm3/g)	$\rho$ (cm3/g)	$\eta$ (-)	Rd(-)
1,4-ジオキサン								
ジクロロメタン		1.23	17.0	0.00125	0.021	2.0	0.3	1.142
トリクロロエチレン		1.26	18.2	0.00125	0.023	2.0	0.3	1.152
キシレン		2.11	128.8	0.00125	0.161	2.0	0.3	2.074
トルエン		2.13	134.9	0.00125	0.169	2.0	0.3	2.124
テトラクロロエチレン		2.43	269.2	0.00125	0.336	2.0	0.3	3.243
国立医薬品食品衛生研究所(NIHS): 国際化学物質安全性カード(ICSC)								
汚染物質	logKow	logKoc	有機物/水分配係数	有機物含有量	分配係数(2)式	土壌密度	有効間隙率	遅延係数(1)式
			Koc(cm3/g)	foc(g/g)	Kd(cm3/g)	$\rho$ (cm3/g)	$\eta$ (-)	Rd(-)
1,4-ジオキサン	-0.27	0.21	1.6	0.00125	0.002	2.0	0.3	1.014
ジクロロメタン	1.25	1.11	12.8	0.00125	0.016	2.0	0.3	1.107
トリクロロエチレン	2.42	1.80	63.0	0.00125	0.079	2.0	0.3	1.525
キシレン	3.12	2.21	162.9	0.00125	0.204	2.0	0.3	2.358
トルエン	2.69	1.96	90.8	0.00125	0.114	2.0	0.3	1.757
テトラクロロエチレン	2.90	2.08	120.8	0.00125	0.151	2.0	0.3	2.007
国立環境研究所 環境リスク研究センター データベース(KISS-NET)								
汚染物質	logKow	logKoc	有機物/水分配係数	有機物含有量	分配係数(2)式	土壌密度	有効間隙率	遅延係数(1)式
			Koc(cm3/g)	foc(g/g)	Kd(cm3/g)	$\rho$ (cm3/g)	$\eta$ (-)	Rd(-)
1,4-ジオキサン	-0.42	-3.88	0.0	0.00125	0.000	2.0	0.3	1.000
ジクロロメタン								
トリクロロエチレン	2.29	1.28	18.9	0.00125	0.024	2.0	0.3	1.157
キシレン	2.77	2.19	154.2	0.00125	0.193	2.0	0.3	2.285
トルエン	2.69	2.04	108.7	0.00125	0.136	2.0	0.3	1.906
テトラクロロエチレン								
安全衛生情報センター								
汚染物質	logKow	logKoc	有機物/水分配係数	有機物含有量	分配係数(2)式	土壌密度	有効間隙率	遅延係数(1)式
			Koc(cm3/g)	foc(g/g)	Kd(cm3/g)	$\rho$ (cm3/g)	$\eta$ (-)	Rd(-)
1,4-ジオキサン	-0.27	0.42	2.6	0.00125	0.003	2.0	0.3	1.022
ジクロロメタン	1.25	1.22	16.5	0.00125	0.021	2.0	0.3	1.138
トリクロロエチレン								
キシレン	3.12	2.20	159.4	0.00125	0.199	2.0	0.3	2.328
トルエン								
テトラクロロエチレン	3.40	2.35	223.7	0.00125	0.280	2.0	0.3	2.865

$$R_d = 1 + \frac{K_d \rho}{\eta} \quad \dots(1)$$

$$K_d = f_{oc} K_{oc} \quad \dots(2)$$

$$\log K_{oc} = a \log K_{ow} + b \quad \dots(3)$$

参考：1,4-ジオキサンの遅延係数  
 $R_d = 1.000 \sim 1.022$   
 $= 1.0$  (地下水と同様に広がる)

1)KANSO：土壌・地下水汚染リスク評価のための情報統合化に関する検討委託(第3次)報告書、2006

NIHS、国立環境研究所、安全衛生センターからlogKowを検索し、KANSOのlogKocを参考に近似的に(図1参照)logKocを算出した。空欄は非掲載である。K市実汚染現場に存在する地層では最大で0.02程度であると考えられる。今回はこれまでの研究において与えた値0.00125~0.0125を参考に小さい方とした。土壌密度  $\rho$  はKANSO2006を参考に2.0(cm<sup>3</sup>/g)とした。有効間隙率  $\eta$  はKANSO2006の0.2~0.3を参考に最大のものとした。【式(1)~(3)を参考に危険側(広がりやすい方)の値を取った。】

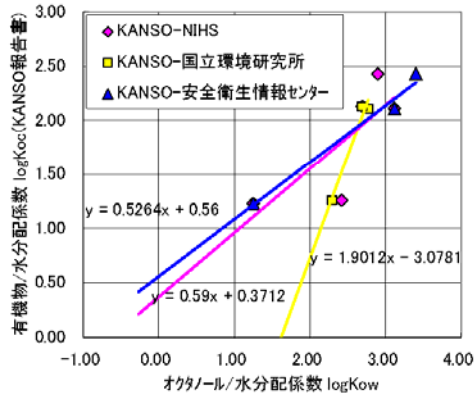


図1: logKocの算出

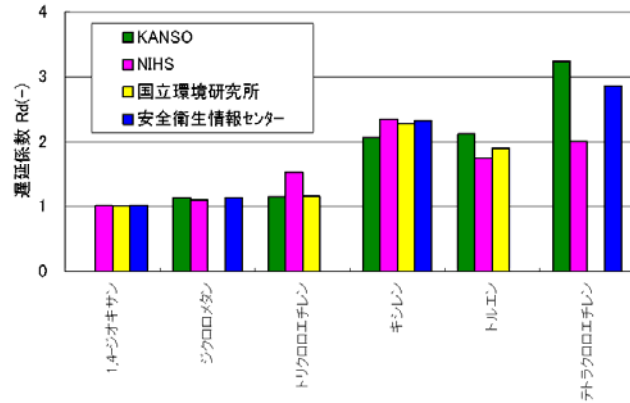


図2: 遅延係数の比較(参考)

Back Data

汚染物質	logKow		
	NIHS	国立環境研究所	安全衛生情報センター
1,4-ジオキサン	-0.27	-0.42~-0.27	-0.27
ジクロロメタン	1.25	非掲載	1.25
トリクロロエチレン	2.42	2.29	非掲載
キシレン	3.12~3.20	2.77~3.12	3.12~3.20
トルエン	2.69	2.69~2.8	非掲載
テトラクロロエチレン	2.90	非掲載	3.40

国立環境研究所 環境リスク研究センター: KISS-NETより



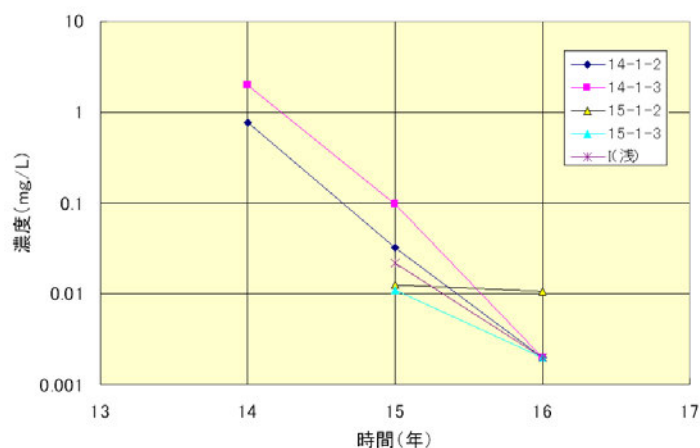
#### 4. ジクロロメタンの減衰定数λ

汚染物質は土着菌等による自然分解や化学的分解等により濃度が減少する現象が生じる。減衰定数λは、このような自然分解を表す数値で、濃度が1/2になる期間（半減期）から算出される。ここでは、当該地において経時的に測定されたジクロロメタンの濃度から算出する。

参考表3.2及び参考図3.4に当該地の遮水壁外における観測井のジクロロメタン濃度の経年変化を示す。

参考表 3.2 遮水壁外における観測井戸のジクロロメタン濃度の経年変化

項目	ジクロロメタン							
	0.02							
環境基準	0.02							
年度	H14年度	H15年度	H16年度	H17年度	H18年度	H19年度	H20年度	H21年度
A-6-1	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
A-6-2		0.002	0.002	0.003	0.002	0.002	0.002	0.002
B-2-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
B-2-2		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
B-7-1	0.004	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
B-7-2	0.003	0.003	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
B-7-3		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
B-9-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
F	0.003	0.003	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
H-1	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
H-2	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
I(浅)	0.009	0.022	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
I(深)	0.002	0.003	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
ウ	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
オ-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
オ-2	0.003	0.002	0.002	0.002	0.003	0.002	0.002	0.002
カ-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
カ-2		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
カ-3	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
14-1-1	0.005	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
14-1-2	0.78	0.033	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
14-1-3	2.0	0.096	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
14-2-1	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
14-2-2	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-1-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-1-2		0.013	0.011	0.003	0.002	0.002	0.002	0.002
15-1-3		0.011	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-2-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-2-2		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-2-3		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-3-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-3-2		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-4-1		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
15-4-2		0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
全平均	0.18	0.007	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002	0.002
測定箇所数	16	34	34	34	34	34	34	34
不適合箇所数	2	3	-	-	-	-	-	-



参考図 3.4 ジクロロメタン濃度の経年変化

参考表 3.3 ジクロロメタンの半減期

残存率(%)					
項目	14-1-2	14-1-3	15-1-2	15-1-3	I(浅)
14年度	100.0%	100.0%			
15年度	4.2%	4.8%			
15年度	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%	100.0%
16年度	6.1%	2.1%	86.0%	18.2%	9.1%

半減期(日)					
項目	14-1-2	14-1-3	15-1-2	15-1-3	I(浅)
14年度～15年度	78.6	82.1			
15年年～16年度	89.4	64.5	1654.5	146.4	104.1
各井戸の平均	84.0	73.3	—	146.4	104.1
	101.9				

各井戸、各年度間の半減期を算出、複数年度がある存在する井戸は平均化し、各井戸の半減期を算出する。その後、各井戸の半減期を平均化し、地域全体でのジクロロメタンの半減期とする。以上から、半減期は101.9日となる。

参考表 3.3 に当該地の観測井におけるジクロロメタンの半減期を示す。

$$\lambda = \frac{\ln(2.0)}{T} = \frac{0.69314}{101.9} = 6.80 \times 10^{-3}$$