

等球径ランダム充填の配位数と間隙率の関係について

Estimation of the Distribution of Coordination Number of Homogeneous Spheres

中尾隆志*・藤田睦博**

By Takashi NAKAO and Mutsuhiro FUJITA

When we deal with the unsaturated flow problems from a microscopic standpoint, the evaluation of the soil fabric becomes important as well as the determination of particle size distribution. In this paper, we derive the distribution of the porosity of soil. Moreover, the distribution of coordination number was determined by using this distribution. This method is based on the ideal soil of homogeneous sphere.

Keywords: coordination number, porosity, soil fabric, random packing

1. まえがき

地下水の流れや雨水の浸透流はその特性を巨視的に取り扱った飽和・不飽和浸透理論により解析されてきた。この場合、 θ (体積含水率) - ϕ (サクション) の関係式あるいは K (不飽和透水係数) - θ の関係式を与えなければならないが、現段階では実験的に求められているのが現状である。著者らは θ - ϕ 関係を理論的に求めることを最終目的に土粒子を球形と仮定し、2個の粒子間における水と空気の表面張力によるリング水の保水効果について微視的な立場から解析を行ってきた。これまでの研究成果により、リング水の保水効果は土粒子の粒径比および土粒子構造(fabric)に強く影響を受ける事が判明した^{1), 2)}。従って、本モデルを実際の土壌に対して適用するには2球間モデルから3次元モデルに拡張すると同時に対象となる土壌の粒径分布やその空間分布をも明らかにしなければならない。一般に、土壌の物理特性は粒径分布と空間的構造特性を示す指標として間隙率あるいは間隙比の形で表現される。このため、本モデルを実際の土壌に適用するには粒径分布はもとより土壌内部の空間構造を明らかにしなければならない。具体的には1つの土粒子が他の土粒子とどのように接合されているか、すなわち土粒子1個あたりの他の土粒子の接合数(以下、配位数と称

* 正会員 北見工業大学助手 工学部土木開発工学科
(〒090 北見市公園町165番地)

** 正会員 工博 北海道大学教授 工学部土木工学科
(〒060 札幌市北区北13条西8丁目)

する)と間隙率あるいは間隙比の関係を求めなければならない。

本報告では、土壌内の空間的構造を明らかにするため土粒子を等球径粒子と仮定し、土粒子の配位数と間隙率の関係を求めている。また、等球径充填といえども実際の球形粒子の充填はランダム的であるため間隙率は分布関数となる。このため、土粒子の平均間隙率から間隙率分布を推定する式を導き出したので報告する。

2. 等球径粒子の充填構造

一般に、実際の土粒子の形は球ではなく、その大きさもさまざまである。従って、厳密に土壌特性を数学モデルとして表現するには個々の土粒子形状や粒径分布を説明変数として確率論的に取り扱わなければならない³⁾がその取扱いは複雑となる。しかし、構成される土粒子が等球径からなると仮定するならば、その取り扱いは容易となる。さらに粒子が規則的に配列された集合体と考えるならば、その集合体の充填特性はより簡単に表せることになる。

2.1 等球径規則充填構造の物理特性

最上ら⁴⁾は粒状体が等球径のみの集合体から成り、粒子が規則的に配列する充填方法を粒子の半径 R をパラメータとして表-1のように5つに分類整理している。図-1にこれら等球径規則充填集合体の代表的な規則充填の断面模型を示す。Kezdi⁵⁾はこの5つの分類の他にさらに間隙率の大きな充填方法を示している。彼の論文によると基準容積、密度、間隙比、間隙率は球と球のすき間の関数として表されているが、ここでは比較のため、球と球とのすき間は0であるとして計算を行い、その結果を表最下段に掲載した。

表-1 等球径規則集合体の物理特性

充填方法	配位数	粒子数	基準容積	密 度	間隙比	間隙率
単純立方体	6	1	$8R^3$	$\pi/6$	0.9098	0.4764
立方四面体	8	1	$4\sqrt{3}R^3$	$\pi/3\sqrt{3}$	0.6539	0.3954
立方斜方体	10	1	$6R^3$	$2\pi/9$	0.4324	0.3019
角柱体	12	2	$8\sqrt{2}R^3$	$\pi/3\sqrt{2}$	0.3504	0.2595
面心四面体	12	2	$8\sqrt{2}R^3$	$\pi/3\sqrt{2}$	0.3504	0.2595
Kezdi 充填	4	18	$288R^3$	$\pi/12$	2.8197	0.7382

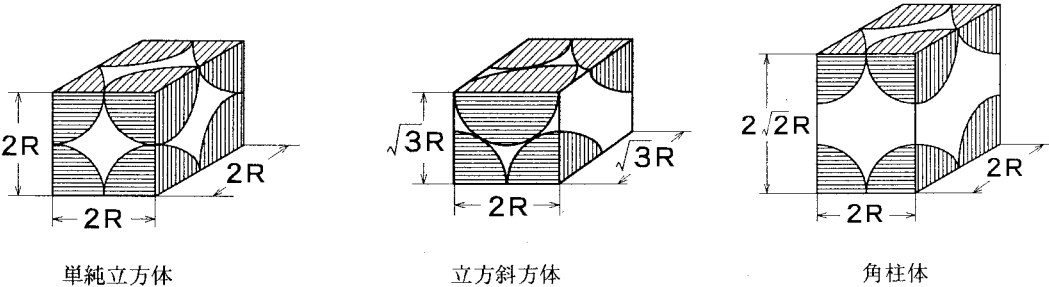


図-1 等球径規則充填の代表例

最も疎の充填構造をなすのは間隙率 n が 0.7382 となる Kezdi の示した充填集合体であり、また最密充填構造を形成するのは角柱体集合と面心四面体集合の 2 通りとなる。この表から明らかなように配位数は間隙率の小さい密なものほど増加している。この場合、配位数が取りうる値の範囲は 4 から 12 であり、間隙率の変化に伴って配位数が大きく変化しており、配位数と間隙率が密接な関係にあることがわかる。

2.2 等球径ランダム充填の配位数と間隙率

一方、Smith⁶⁾ らはランダムに充填された等球径からなる粒子の間隙率と配位数の関係を調べるため鉛の散弾を用いた実験を行った。実験方法の概要は以下のようである。充填方法をいろいろ変え、試料全体の間隙率が 0.36 から 0.45 の範囲になるようビーカー内に鉛の散弾をランダムに充填する。これを一度酢酸の水溶液に満たした後、排水すると、鉛の粒子と粒子の接触点にはリング水の保水効果により酢酸の水溶液の一部が残り、白い酢酸塩の斑点ができる。この斑点の数を数えることにより、個々の粒子の配位数が求められ、間隙率ごとの配位数のヒストグラムを作成することができる。その結果を図-2 に示す。図から明らかなように間隙率が増加すると、すなわち充填のしかたが緩くなると、規則充填の場合と同様に配位の平均値が小さくなっている。また、間隙率が 0.43 から 0.45 の範囲にある比較的充填が緩い場合、そのヒストグラムは著しく正規分布に似たものとなる。さらに、彼らは等球径からなるランダムに充填された粒子が規則集合体の最も間隙が粗な単純立方体と最密充填である面心四面体の 2 つの集合体のみの混合体であるとの仮定から、ランダム充填の平均間隙率 $\bar{n}$ はこれらの 2 つの集合体の混合割合で決定されるとして、平均間隙率 $\bar{n}$ を用いて平均配位数 $\bar{N}$ を求める式(1)を提案している。

$$\bar{N}=26.4858-\frac{10.7262}{1-\bar{n}}$$
(1)

図-3 は粒子がすべて規則充填であるとしたとき、式(1)により計算される配位数と理論解の比較を示している。式(1)は $N=6, 12$ の単純立方体と最密充填である面心四面体の 2 つのクラスターで構成されているとしているため、他の集合体の場合、誤差が大きくなっている。特に $N=10$ の立方斜方体充填の場合、配位数の誤差は 1 以上となる。これはランダムに充填された集合体が配位数が極端に違う単純立方体と面心四面体の 2 つのクラスターのみにより表現されているためである。また図-2 から明らかなように間隙率により配位数の取り得る範囲に差はみられるが、全体として、その配位数の変化は 4 ~ 12 であり、このことは土壤全体を考えるならば、他の等球径規

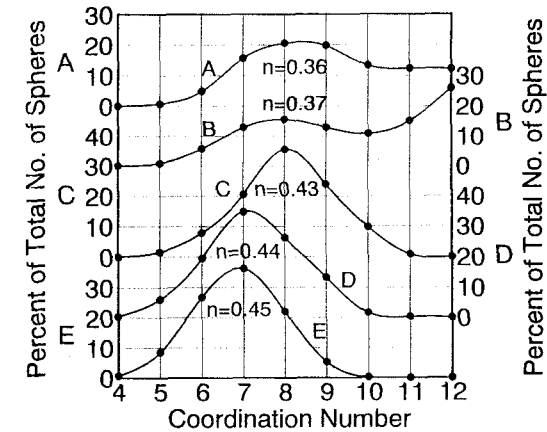


図-2 等球径ランダム充填のヒストグラム

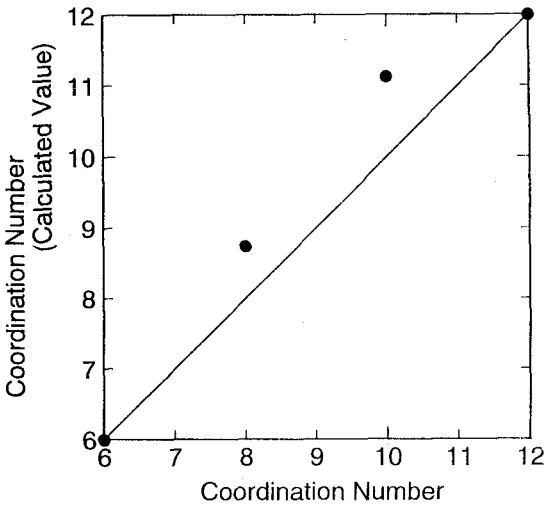


図-3 配位数の理論解と計算値の比較

則充填集合体も存在していることを示している。以上の結果から、等球径ランダム充填に於いても配位数と間隙率は密接な関係があることがわかる。個々の粒子の配位数に対し、さらに詳細な検討を行うと配位数は確率的に変化し、その範囲は4から12まで変化する。従って、土壌内の充填構造を局所的にみるならば、その充填構造は表-1に示した等球径規則充填構造体の間隙率に最も近い2つの規則充填構造体から成り立っており、結果的に土壌全体では、複数の規則充填構造体の混合体で土壌が形成されていると考えられる。そこで本報告では Smithらの方法を以下のように修正することを提案する。もし土壌内の間隙率の分布がわかれば、局所的にみるとその間隙率周辺の間隙率の充填構造は表-1に示される5つの充填方法の内（角柱体充填と面心四面体充填は充填の方法が異なるだけで物性特性は同じなので1つと考える）その間隙率を挟む2つの規則充填の混合体として表すことが可能であろう。そこで、その間隙率付近の充填構造はもっともこの間隙率に近い2つの規則集合体のみから成り立っているものとする。この間隙率から2つの等球径規則充填の混合割合が得られ、この混合割合より1球あたりの接触数、すなわち配位数が計算できる。具体的には以下の方法による。今、間隙率 n が単純立方体と立方四面体の間隙率の範囲内にあるものとする、この間隙率を示す容積内の球のうち x を立方四面体充填として並んでいるものとし、残り $1-x$ が単純立方体として並んでいる部分とすると、表-1より、立方四面体及び単純立方体の間隙率はそれぞれ0.3954, 0.4764であるから

$$n = 0.3954x + 0.4764(1-x) \quad (2)$$

となる。よって、 x は

$$x = \frac{0.4764 - n}{0.0810} \quad (3)$$

となる。また、立方四面体、単純立方体の単位容積中の球の数はそれぞれ $\sqrt{3}/(12R^3)$, $1/(8R^3)$ であるから、混合体中の1球あたりの平均の接触点数、すなわち配位数は

$$N = \frac{8x\sqrt{3}/(12R^3) + 6(1-x)/(8R^3)}{x\sqrt{3}/(12R^3) + (1-x)/(8R^3)} \quad (4)$$

となる。従って、土壌内の間隙率分布が既知ならば、各間隙率に対し、上記の計算を行うことにより、配位数の分布を計算することができる。

3. 土壌の間隙率分布の算定

先にも述べたように、土粒子の充填のしかたはランダム的であり、局所的にみるならば内部にアーチを形成し間隙率の大きな部分ができていいる部分もあれば、これとは反対に密の部分も存在しており、間隙率はある分布を持っている。

さて、これらの間隙率の分布を求めるため、母集団として平均の間隙率 $\bar{n}$ からなる土壌を考える。この土壌が非常に小さな微少要素に分割されたとすると、上で述べたように土壌全体の構造が不規則のため、これらの微少要素の間隙率はある分布関数となる。この確率密度関数を $F(n)$ とするならば、土壌の平均の間隙率とその標準偏差 σ はそれぞれ式(5), (6)で表される。

$$\bar{n} = \int_0^1 n F(n) dn \quad (5), \quad \sigma^2 = \int_0^1 (n - \bar{n})^2 F(n) dn \quad (6)$$

次に、この土壌から体積 V_0 を持ついくつかの標本を抽出し、その間隙率の確率分布を求めることにする。

V_s はそれぞれ m 個の微少要素から成り立っているものとする、1つの標本の間隙率 n_s は微少要素 i の間隙率を n_i として、次式で表される。

$$n_s = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m n_i \quad (7)$$

ここで、 m の数が大きいときを考えると、中心極限定理により、 n_s の分布は正規分布に漸近する。よって、 n_s の確率密度関数を $G(n_s)$ とすると、

$$G(n_s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_s} \exp \left\{ -\frac{(n_s - \bar{n})^2}{2\sigma_s^2} \right\} \quad (8)$$

となる。ここに、 σ_s は標本分布の標準偏差であり、 $\sigma_s = \frac{\sigma}{\sqrt{m}}$ である。

Collins⁷⁾は同様の手法により有孔物質の間隙率の分布の理論的考察を行い、微少要素を非常に小さくした場合、その要素は全て空隙を示すか、物質部分を示すかのどちらかであり、このためこの要素の大きさには限界値が存在するとして解析を行っている。この微少要素の体積を ε とすると、明らかに次の関係が成り立つ。

$$\varepsilon = m V_s \quad (9)$$

従って、 σ_s は次式のように書き改められる。

$$\sigma_s = \frac{\sigma}{\sqrt{m}} = \sqrt{\frac{\varepsilon}{V_s}} \sigma \quad (10)$$

今、 ε が非常に小さな値であるとする、この微少要素は全て空隙部分であるか、あるいは全て土粒子部分を占めるかのいずれかとなり、 $\bar{n}$ は0かまたは1のどちらかとなる。他方、多くの微少要素の中で、全て空隙であるならば、すなわち間隙率が1である割合は $\bar{n}$ であり、土粒子部分のみを含む割合は $1 - \bar{n}$ であるから、 ε は式(11)、(12)で定義される値 ε_0 が存在しなければならない。

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \int_0^{\Delta n} F(n) dn = 1 - \bar{n} \quad (11)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \int_{1-\Delta n}^1 F(n) dn = \bar{n} \quad (12)$$

ここに、 Δn は式(11)、(12)を満足するとき、 ε_0 が全て空隙を示す限界の間隙率である。故に、式(6)は

$$\sigma^2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0} \int_0^1 (n - \bar{n})^2 F(n) dn = \bar{n}(1 - \bar{n}) \quad (13)$$

となる。よって、 $V_s \varepsilon_0$ として、 n_s の確率密度関数 $G(n_s)$ は次式で与えられる。

$$G(n_s) = \sqrt{\frac{V_s}{2\pi\varepsilon_0 \bar{n}(1 - \bar{n})}} \exp \left\{ -\frac{V_s (n_s - \bar{n})^2}{2\varepsilon_0 \bar{n}(1 - \bar{n})} \right\} \quad (14)$$

4. あとがき

本研究では土壌内部の空間構造を明らかにするため構成する土粒子が等球径粒子のみからなるとの仮定の下に土粒子の配位数と間隙率の関係の考察を行った。本研究の主要な結論を以下に示す。

- (1) 土粒子が全て等球径粒子から構成される場合、その充填が規則的充填であっても、ランダム充填であっても土粒子1個の接触点数、すなわち配位数と間隙率には密接な関係があることが見いだされた。
- (2) 土壌内の間隙率分布が既知ならば、従来から提案されている平均間隙率と平均配位数の関係式を改良することにより土壌内の配位数の分布を与える方法を示した。
- (3) 上記(2)を行うために必要な土壌内の間隙率分布を推定する式を導いた。

今回の報告では土壌を構成する土粒子は全て等球径であるとの仮定の下に議論を進めてきたが、実際の土壌は粒径分布を持っている。この点に関して著者らは、粒径分布を有するような土壌に対する土粒子の配位数の分布の推定は粒径分布を説明変数として、確率論的に取り扱わなければならないと考えているが、この問題に関しては今後の課題としたい。

参考文献

- 1) 中尾隆志・藤田睦博：等球粒子モデルを用いた不飽和浸透流の微視的解析，土木学会北海道支部論文報告集，第48号，pp.569-574，1992.
- 2) 中尾隆志・藤田睦博：異球径粒子モデルを用いた土壌内水分の保水効果に関する研究，水文・水資源学会研究発表会要旨集，pp.130-133，1992.
- 3) Nakao T., Fujita M., Kudo M. and Nishimura T.: Retained Water in Soil Based on Probabilistic Pore Structure, Proc. of International Congress on Modelling and Simulation, Vol 3., pp.937-942, 1993.
- 4) 最上武雄 編：土質力学，技報堂，pp.904-909，1969.
- 5) Kezdi, Arpad: Discussion to Winterkorn's Paper, Highway Res. Record, No.52, Mechanical and Physico-Chemical Properties of Soils, 1964.
- 6) Smith, W.G., Foote, P. D. and Busang, P. E.: Packing of Homogeneous spheres, Phy. Rev., Vol.34, pp.1271-1274, 1929.
- 7) Collins, R. E.: Flow of Fluid through Porous Materials, Reinhold Publ. Cop. New York, 1961.