

II-44 異球径ランダム充填の配位数の 推定に関する研究 — 数値シミュレーション法による考察 —

北見工業大学 正員 中尾隆志
北海道大学 正員 藤田睦博

1. まえがき

構成される土壌が球状の異球径粒子群からなると仮定される場合、土壌内の体積含水率(θ)とサクション(ψ)の関係は2球間の距離と粒径比によって理論的に求めることができる¹⁾。従って、土壌内の保水効果として土粒子間の接合部で形成されるリング水が卓越しているとするならば粒子同士の接合状況が既知の場合、微視的な立場から解析を行うことができる。著者らは土壌の粒径分布 $N(r)$ と間隙率が既知であるとして確率論的手法を用いることにより土粒子間の空間分布特性のモデル化を行ってきた²⁾。

本モデルを用いて $\theta-\psi$ 関係を求めるには、ある粒子の接合状況、すなわち土粒子1個あたりの他の土粒子の接合数(以下、配位数と称する)と粒径分布との関係を明らかにしなければならないが今だ解明されていないのが現状である。

本報告では、数値シミュレーションモデルを作成し、配位数と粒径分布の関係について考察を行ったのでその結果について報告する。

2. ランダム充填モデルの構成

2-1. 計算機を用いたランダム充填モデルの構成

計算機でランダム充填をシミュレートするということは、乱数を逐次変換し、粒子の位置、大きさ等を示す組を作成していくことである。今、ある一定条件下で一定の手続きで作成されたものの全体が目的の充填であるとし、個々の組により表せられる充填を部分充填 Π であらわす。一般に部分充填を作る場合、1つつ粒子を付け加えていくことが多いので、 n 番目までの粒子でできた粒子の集まりをサンプル部分充填 Π_n とするとサンプル部分充填 Π_n は Π_{n-1} の数値は変えないで単に π_n を付け加えた場合

$$\Pi_n = \Pi_{n-1} + \pi_n \quad (1)$$

とそうでない場合、

$$\Pi_n = \Pi_{n-1}'(\Pi_{n-1}, \pi_n) + \pi_n \quad (2)$$

の表記法が考えられる。

樋口³⁾はランダム充填のシミュレーション法として上記の数学的分類法と発生方法とから次の5つに分類している。

- 1) 棄却法: π_n を指定するとき新たに取り上げられる粒子がこれまでにできている部分充填 Π_{n-1} に重なると棄却し、重ならなければ π_n とする。もっとも確率論的に取り扱いやすい。
- 2) 局所移動法: 粒子の中心を格子点におき、それから一定の小さな範囲でランダムに動かす方法
- 3) 割り込み方法: 一様乱数で順次 π_n の中心を指定していく。 π_n が Π_{n-1} の粒子のどれかに重なった場合、 π_n はそのままにしておき、もとの Π_{n-1} の粒子を重なった2粒子の中心上を重ならないでちょうど接するようなどころまでずらせる。これがまたほかの粒子と重なると重なれた方の粒子をずらせていく。
- 4) 落下法: 粒子があるポテンシャル場をポテンシャルの低いところに落ちる現象に対応できるように

作られたもので初期条件の位置をランダムに取る。

5) 成長法：鋳物の焼結におけるグレインの成長用に開発されたモデルで、ランダム点を中心に円を成長させる。境界壁付近では比較的粒径の小さなものが集まる傾向がある。

上記に述べたように確率論的には棄却法がもっとも有利であるが、一方、計算機を用いたシミュレーション法とからみると次に上げるような理由で欠点もある。今、新たに発生した粒子が π_n として採用される確率は必ずしも1ではない。また、 $\Pi_{n-1} \rightarrow \Pi_n$ の間においてこの粒子が採択される確率は Π_{n-1} のみにより依存し、それより以前の Π_{k-1} には何ら影響を及ぼさない。この新たな粒子を $\tau(\Pi_{n-1})$ 、その採択率を $P(\tau(\Pi_{n-1}))$ とあらわすならば、よく定義された充填構成においては、サンプル生成過程(Π_1, Π_2, \dots)の全体から確率空間が構成される。従って、棄却法では、この新たな粒子を受け入れない状態かどうかを判断することは難しい。また n の増加と共に $P(\tau(\Pi_{n-1}))$ が減少するので完全な充填に近づけるには非常に時間がかかる。以上の理由から本報告では、より実現に近い落下法を採用している。

2-2. 落下法によるアルゴリズムの構築

著者が考えた落下法のモデル化は以下のようなものである。初期値を除き厳密に1つずつの粒子をランダムな位置(一様分布)から落とす。この時、落ちてくる粒子はすでにある部分充填 Π_{n-1} に何ら影響を与えることなく、摩擦なく落ちうる限り滑り落ちて静止するものとする。すなわち、 π_n の候補を $\tilde{\pi}_n$ とすると、 $\tilde{\pi}_n$ はランダム変数で、これと Π_{n-1} とにより π_n が決まるので、

$$\pi_n = \pi_n(\Pi_{n-1}, \tilde{\pi}_n) \quad (3)$$

よって、

$$\Pi_n = \Pi_{n-1} + \pi_n(\Pi_{n-1}, \tilde{\pi}_n) \quad (4)$$

の形で充填が形成されていく。

本方法の特徴は π_n は Π_{n-1} の全ての粒子に依存するのではなく、唯一最上層に依存する点である。従って、新たな粒子発生のために準備しておく情報は Π_{n-1} 全体ではない。このため計算機の記憶容量も棄却法に比べ非常に少なくてすむ。

本方法は3次元でもシミュレートできるが簡単のため以後、2次元で解析を行うこととした。具体的には以下の手順によった。

ステップ1：予め、ある確率分布の半径を持つ円を必要な個数準備しておく。準備しておいた円を底面の左側の壁から隙間なく右側の壁に達するまで詰める。個の状態を初期値と定める。(図-1参照)

ステップ2：乱数を発生させ落下させる粒子の位置 X をセットする。この円がすでに詰まっている1つの円に接し(図-2のA点)、その表面に沿ってポテンシャルの低い方に移動した1つの円または壁に接するところまで落ちてくる。この状態で静止する場合もあるが新円の重心にかかる重力の力線がこれを支える2個の円からの反力の力線の間でない場合、さらに運動を続けるので完全に静止する位置まで表層の円上を移動させる(図-2のB点)。支える2個の円の座標値より新円の座標値を求める。

ステップ3：ステップ2で得られた新円の位置が近くの他の円と重なり合ってしまう場合がある。この時は、表層の定

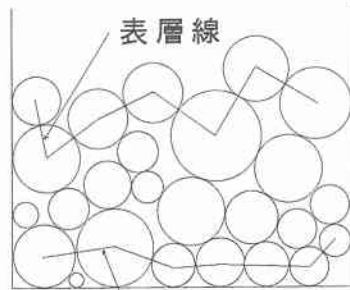


図-1 落下法によるランダムパッキングの構成

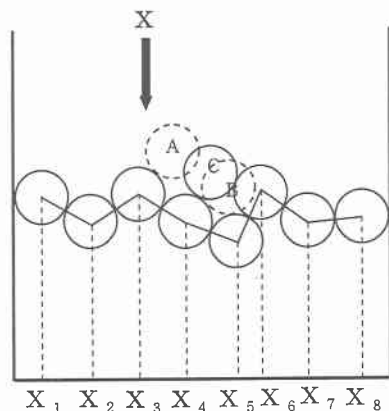


図-2 落下粒子の滑り落ちとせり上げによる位置の修正

義を変え、ステップ2に戻り新円の位置を再計算する。こうして新円をせり上げて正しい静止の位置を計算する(図-2のC点)。新円の正しい位置がわかるとそれを表層に加え、これより下の円を表層から取り除き、次の円の落下に備える。

3. シミュレーション解析

3-1. シミュレーション方法

円の半径の分布と配位数および間隙率の関係を調べるため、上記2のプログラムを用いシミュレーションを行った。発生円の半径の分布は一様分布であり、その平均値がほぼ0.1(RUN 1)から1.0(RUN10)になるよう10ケースについて試みた。半径分布は0~1の分布幅を上記平均になるよう単純に係数を掛けて求めている。従って、半径分布幅はRUN 1が最も狭く、RUN10が最も広くなっている。各ケースとも解析対象領域は底面の長さ10の両側に無限の深さを有する壁を想定し、円の発生個数は全て1,000個とした。

3-2. シミュレーション結果と検討

表-1はシミュレーション結果の円の空間特性を示している。ここで、間隙率は発生させた1,000個の円の最上端を充填容器の最上端と定義して求めたものである。また、配位数は底面および側壁との接触点の個数は入れず円のみ接触している個数とした。いずれのケースにおいても最大配位数は9~12個の範囲にある。円の半径が全て等しい場合の最大配位数6個³⁾と比べ、大きくになっている。

表-1 発生円の空間特性

	発生円の半径の平均	間隙率 λ (%)	最大配位数 n _{max}	平均配位数 \bar{n}
RUN 1	0.1034	46.11	9	3.40
RUN 2	0.2062	35.96	9	3.65
RUN 3	0.3090	23.72	11	3.69
RUN 4	0.4117	19.21	9	3.71
RUN 5	0.5145	19.04	9	3.72
RUN 6	0.6173	10.16	11	3.67
RUN 7	0.7201	12.21	11	3.73
RUN 8	0.8229	16.13	12	3.70
RUN 9	0.9256	8.49	9	3.69
RUN10	1.0284	8.22	9	3.67

図-3は発生円の半径の平均値と間隙率

の関係を示している。半径の平均値が増加するに従い、間隙率が減少する傾向がみられる。今回用いたデータでは半径の平均値が大きくなるにつれ、構成する円の分布幅も増加するものを採用している。従って、間隙率は半径の平均値の影響よりも構成する粒子の分布幅の影響を受けると思われるがこの点に関して、今後さらに検討しなければならない。図-4、図-5は発生円の半径の平均値および間隙率と平均配位数の関係を示している。半径の平均値が小さく疎に充填されているRUN1以外平均配位数はほぼ一定の値(3.65~3.73)となっている。図-6は各ケースについて最大配位数が生じた円の半径(複数個ある場合はその個数全部の平均)を全半径の平均値で除した値と最大配位数の関係を示している。図から明らかなように最大配位数が生じる円の半径の値は分布幅の7~9割の値となっている。一般に円の半径が大なほど多くの円と接することが可能となる。この点からみれば最大配位数を持つ円の半径は半径範囲幅の最大値となる。一方、これは

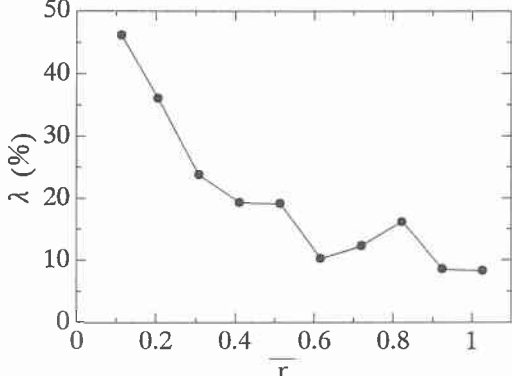


図-3 円の半径の平均値と間隙率の関係

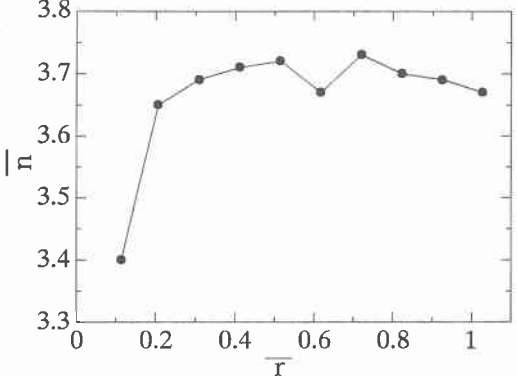


図-4 円の半径の平均値と平均配位数の関係

同時に大きな円とも接しやすくなることを意味している。円同士が互いに重なり合えないということから考えると接触の効果を抑制することになる。図の結果はこの抑制効果が反映されたものと思われる。従って、配位数を円の半径でモデル化する場合、このことを考慮しなければならない。

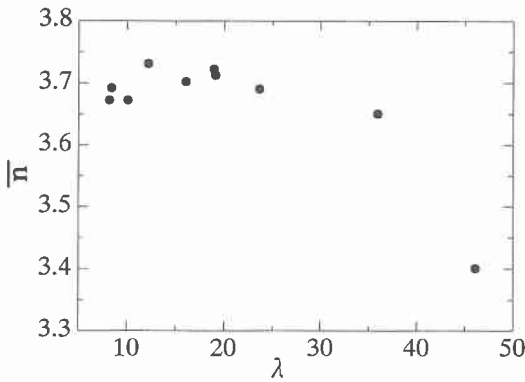


図-5 間隙率と平均配位数の関係

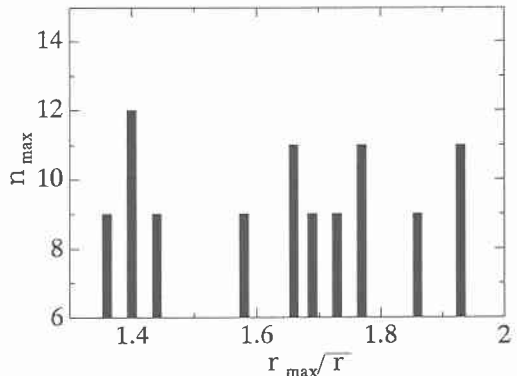


図-6 r_{max}/\bar{r} と最大配位数の関係

4. 結論

本研究ではシミュレーション法を用い一様分布の半径群からなる円の二次元ランダム充填解析を行い配位数および間隙率と円の平均半径の関係について考察を行った。本研究で得られた主要な結論を示すと、以下のようになる。

- 1) 円の半径の平均値に関わらず、最大配位数の値は9～12の間であった。
- 2) 円の半径の平均値と平均配位数の関係では円の半径幅が小さいRUN 1の場合を除きほぼ一定の値(3.65～3.73)となった。
- 3) 間隙率がおよそ35%以下では平均配位数はほぼ一定の値となるが、その後、間隙率の増加に伴い平均配位数が減少する傾向がみられる。このことと上記2)の結果から推定すると平均配位数は構成される円の半径の分布幅と半径の平均値に影響されるものと思われる。
- 4) 最大配位数を取り得る円の半径の値は半径分布幅の7割～9割の値に集中している。

本報告ではシミュレーション用のプログラムの開発に手間取り、プログラムのチェックを兼ねた一様分布の解析の場合しか行えなかった。一般に、土壌の粒径分布は対数正規分布を持つといわれており、今後はより実際に近い粒径分布でシミュレーションを行うことにより、著者らがもっとも関心のある平均配位数あるいは間隙率と粒径分布との関係を明らかにしていきたい。なお、今回作成したシミュレーションプログラムは著者らが別に進めている、土壌内の空間構造の確率論的解析のチェック用プログラムとして活用していく予定である。この研究は文部省科学研究費基盤研究(C)一般(研究代表者:中尾隆志)の補助を受けて行われたものです。記してここに感謝の意を表します。

—参考文献—

- 1) 中尾隆志・藤田睦博：異粒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.
- 2) Nakao T.: A Statistical Approach to Analyzing the Fabric in a Random Assembly of Spherical Granules, Proceedings of The First Korea-Japan Bilateral Seminar on Water Resources and Environment Research, pp.7-12, 1996.
- 3) 樋口伊佐夫：粒子充填に関する統計的研究，東京工業大学博士論文，1971.
- 4) 中尾隆志・藤田睦博：等球粒子ランダム充填の配位数と間隙率の関係について，水工学論文集，第39巻，pp.273-278，1995.