II－11

異球径ランダム充填の配位数と間隙率の関係について

北見工業大学　正会員　中尾隆志
北海道大学大学院　フェロー会員　藤田睦博

1．はじめに

浸透流れを微視的な立場から解析的に解く場合、体積含水率（θ）と不飽和透水係数（K)、またはθとサクション（ϕ）の関係を求めなければならない。構成する土壌粒子が球形と仮定できるならば、$\theta-\phi$関係は 2 球間の距離と粒径比により理論的に求めることができる。したがって、$\theta-\phi$関係を解析的に求める場合、構成する土壌の空間特性を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。著者らは構成する粒子の粒径分布がほぼ等球径とみなせる比較的分布幅が狭い場合、その土壌の間隙率に最も近い 2 つの等球径規則充填集合体の混合体であるとの仮定のもとに土壌の間隙率から土粒子間の接合状態を推定し、$\theta-\phi$関係を求めるモデルを提案した[1)]。このモデルは粒度を調整した比較的均一な硅砂の吸水試験結果と良く一致することが示されている。しかし、このモデルを粒径分布がより広い一般の土壌に適応するには、土壌空間特性を厳密に数学モデルとして表現する必要がある。著者らは粒径分布と間隙率が既知であるとして、粒子間距離の分布を確立論的手法を用いて表現する方法を提案している[2)]。このモデルを用いて$\theta-\phi$関係をもとめるには、ある粒子の接合状況、すなわち土粒子 1 個当たりの他の土粒子との接合数(以下、配位数と称する)と粒径分布の関係を明らかにしなければならない。

本報告では構成する土粒子を球形と仮定し、空間を 2 つの球が互いに接する接点における切平面で区切ることにより得られる球を含む多面体の集合体を考えることにより、配位数を推定する方法を提案している。

2．多面体法による配位数の推定

2.1 グラフ理論を用いた球の空間特性の表示

佐武[3)]は二次元粒子のランダムパッキングに対し、粒子の力学的解析を試みるためグラフ理論を用いた構成粒子の空間配置法を提案している。すなわち、粒子の中心を点に、接触点を枝に、間隙をループに対応させることにより空間配置をグラフに置き換た。彼はこのグラフを粒子グラフと称し、粒子グラフから経験的に余剰数(R)とパッキングの配位数(N)には次式の関係があることを示した。

$$R=\frac{6-N}{N-2} \qquad (1)$$

しかし、この式は予め個々の粒子の位置が既知でなければならず、また二次元の場合にのみ適合するため、一般の土壌分布の解析に適用するには無理がある。一方、斉藤[4)]は空間を二つの球が互いに接する接点で区切り、一つづつ球を含む多面体の集合を考え、この多面体を利用して配位数を推定する方法を提案している。本論文でも斉藤の考え方に一部修正を加えた以下の方法を用いることとする。

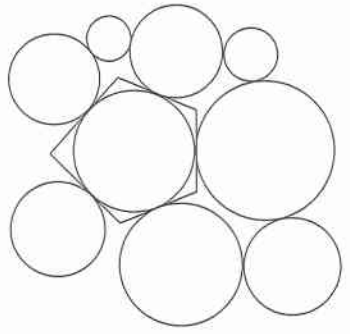

図１ 間隙グラフの概念図（二次元の場合）

・ The Relationship between the Co-ordination Number and the Porosity in a Random Assemblage of Various Spheres by Takashi NAKAO and Mutsuhiro FUJITA

2.2 等価半径を用いた配位数の推定

対象となる空間内にｎ個の球が充填されている場合を考える。この空間を二つの球が接する接点における切平面で区切るならば空間全体ではｎ個の多面体が考えられる。また、任意の球を含む多面体がＮ面体ならば、この球はＮ個の球と接触していることになる。図１に示すように、明らかにこの多面体は前節で述べた三次元化された粒子グラフの双対グラフである間隙グラフを示している。斉藤の方法は半径r_0を持つ球を含む多面体とその球に接触している全ての多面体からなる球殻の体積を多面体一個当たりの体積で割って平均配位数を推定しようとするものである。

最初に、半径ｒの球を含む多面体と同じ体積となる仮想の球を考える。以下、この仮想の球の半径を等価半径と称し、r'で表す。間隙率εは対象となる空間で常に一定であると仮定するならば、次式の関係が成り立つ。

$$\frac{4}{3}\pi r'^3(1-\varepsilon)=\frac{4}{3}\pi r^3 \tag{2}$$

次に半径r_0の球を含む多面体と、それに接する周りの多面体を合わせた合併多面体の体積Ｖを考える。これらの多面体に含まれる球の体積和に等しい体積を持つ球の半径をr_0+hrとする。この合併多面体にも式(2)を導いたときと同じ考え方を適用すると、合併多面体の体積Ｖは$\frac{4}{3}\pi(r_0+hr)^3/(1-\varepsilon)$を$r_0$に関して平均すれば得られる。さて、この平均化を行う場合、ｒの本来の存在割合、すなわち粒径分布密度による重み付けの他に近接位置に存在する重み付けが必要である[5)]。斉藤は後者の重み付けとして、半径ｒの球を半径r_0の球の中心から見込む立体角を採用し、その立体角は外接円の半径ｒの二乗に比例するという近似を用いている。本論文でも同様の近似による重み付けを採用する。したがって、合併多面体の体積Ｖは次式で表される。

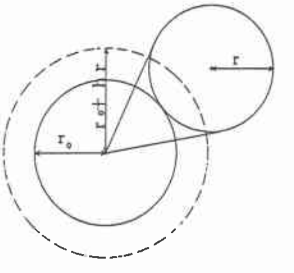

図２ 多面体の等価半径

$$V\approx\frac{4}{3}\pi\frac{\overline{(r_0+hr)^3r^2}}{(1-\varepsilon)\overline{r^2}} \tag{3}$$

ここに、記号”$\overline{}$”は変数の平均値を示す。一方、この合併多面体の中心にある半径r_0の球を含む多面体の体積V_0は

$$V_0=\frac{4\pi r_0^3}{3(1-\varepsilon)} \tag{4}$$

である。よって、一球当たりの多面体の平均体積$\overline{V}$は次式によって求められる。

$$\overline{V}=\overline{\frac{4}{3}\pi r^3}(1-\varepsilon) \tag{5}$$

体積（$V-V_0$）の中に何個$\overline{V}$が含まれているかが$N(r_0)$を近似的に与えることになり次式が得られる。

$$N(r_0)\approx\frac{V-V_0}{\overline{V}} \tag{6}$$

式（３），（４），（５）を式（６）に代入することにより、最終的に式（７），（８）が求められる。

$$N(r_0)=\frac{\overline{\frac{4}{3}\pi(r_0+hr)^3r^2/(1-\varepsilon)}/\overline{r^2}-\frac{4}{3}\pi r_0^3/(1-\varepsilon)}{\overline{\frac{4}{3}\pi r^3}/(1-\varepsilon)} \tag{7}$$

$$=\frac{\left\{h^3\overline{r^5}+3h^2\overline{r^4}\,r_0+3h\,\overline{r^3}\,r_0^{\,2}\right\}}{\overline{r^2}\,\overline{r^3}} \qquad (8)$$

３．間隙率を用いた配位数の推定

3.1 等球径規則充填体を用いた合併多面体の等価半径の推定

式(7), (8)において合併多面体の等価半径を決定するパラメータhは依然として未知数のままである。本論文ではhを決定するため以下の方法によった。

構成する球の半径が全て等しくかつ規則正しく充填しているならば、球の充填の物理特性である配位数は表1に示すように各充填方法により一義的に決定される。そこで、式(8)に$r_0=r$とした等球径の場合について規則充填体の最疎充填である Kezdi 充填（N=4）から最密充填充填である角柱体(面心四面体)(N=12)までの5通りについて h を求めた。図3はhの解の中で実根のみをプロットしたものである。明らかに配位数の増加とともにhも増加しており、N と h の関係は最小自乗法により

$$h=0.418+0.080N \qquad (9)$$

なる関係が得られる。このため、式(8)において h は依然未知数のままである。先にも述べたように構成する球が等球径規則充填であると仮定されるならば、間隙率は幾何学的関係から容易に求めることができる(表1参照)。図4は等球径規則充填体のときの間隙率と配位数の関係を示しており、その関係式は式(10)で表される。

$$N=2.872\,\varepsilon^{-1.055} \qquad (10)$$

したがって、h を推定するため最終的に以下の方法を用いることにする。間隙率εが与えられると構成する球を等球径とみなし、式(10)により配位数の推定を行う。この場合、εのとり得る範囲は式(10)では$0.2595\leqq\varepsilon\leqq0.7382$であるがこの範囲以外でも外挿できるものとする。得られた N を式(9)に代入することにより、合併多面体の等価半径を計算することができる。最後に、式(8)より配位数の算定がなされる。

表1　等球径規則充填体の物理特性

充填方法	配位数	基準容積	基準容積内の粒子数	間隙率
Kezdi充填	4	$288R^3$	18	0.7382
単純立方体	6	$8R^3$	1	0.4764
立方四面体	8	$4\sqrt{3}R^3$	1	0.3954
立方斜方体	10	$6R^3$	1	0.3019
角柱体	12	$8\sqrt{2}R^3$	2	0.2595
面心四面体	12	$8\sqrt{2}R^3$	2	0.2595

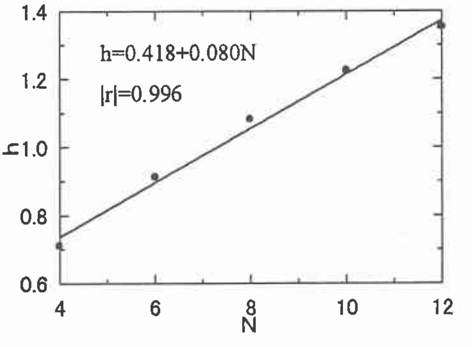

図3　配位数とhの関係（等球径）

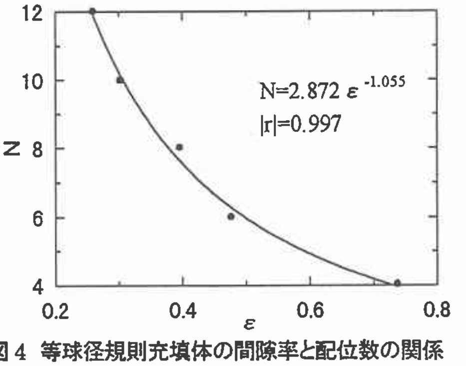

図4　等球径規則充填体の間隙率と配位数の関係

3.2 分布形および間隙率の違いによる配位数の変化

粒径分布の分布形および間隙率変化により配位数がどのように変化するかを見るため、粒径幅０～５の範囲にある一様分布および三角分布を持つ２つの粒径分布形に対し間隙率を変化させ配位数の推定を行った。図5,6にその結果を示す。図から明らかなように同一の間隙率に対して２つの分布形による配位数の違いは見られなかった(両者とも平均値は 2.5 となる)。これに対し、間隙率が小(密な充填状態)ほど配位数が増加

する傾向が良く表されている。特に、同一の間隙率に対し、粒径が大きくなると配位数が急激に増加することがわかる。

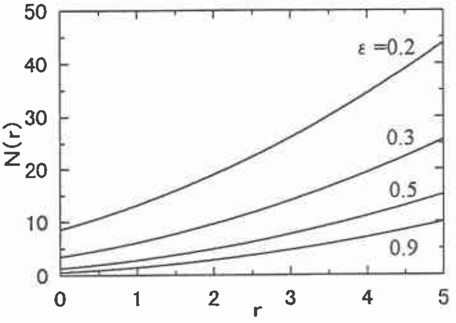

図５ 間隙率による配位数の変化（一様分布）

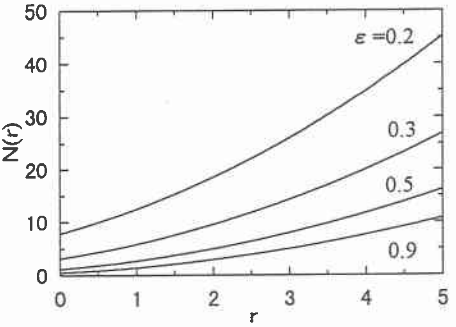

図６ 間隙率による配位数の変化（三角分布）

4. まとめ

本研究では球粒子が存在する空間において二つの球が接する接点における切平面で区切ることにより得られる多面体を用いて、配位数を推定する方法を提案した。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）任意の球を含む多面体とそれに接する周りの多面体をあわせた合併多面体の体積と同じ体積を持つ仮想の球を考えることにより配位数を推定する式を誘導した。

２）上記の合併多面体同体積を持つ球の等価半径もまた配位数の関数となる。このため、等球径規則充填の配位数と間隙率の関係から等価半径を推定する方法を示した。

３）平均粒径 2.5 となる二つの粒径分布(一様分布、三角分布)を持つに粒子に対し、本モデルの適用を行った。その結果、粒径分布の違いによる配位数の明確な差異は見られなかった。しかし、いずれの粒径分布においても同一の間隙率において粒径が大になると配位数が急激に増加することが示された。

今後の課題としては実測データと比較検討を行い、本モデルを改良することにより、配位数が間隙率および粒径分布に対してどのような影響を受けるかさらに詳細に検討しなければならないと考えている。

本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ある。記してここに感謝の意を表します。

参考文献

１） NAKAO T. : Estimation of the Co-ordination Number in the Random Assemblage of Equable Spheres, Proceedings of The Second Japan-South Korea Bilateral Seminar on Water Resource and Environmental Research, pp.84-89, 1997

２） NAKAO T. : A Statistical Approach to Analyzing the Fabric in a Random Assembly of Spherical Granules, Proceedings of The First Japan-South Korea Bilateral Seminar on Water Resource and Environmental Research, pp. 7-12, 1996

３） SATAKE M. : Graph-theoretical approach to the mechanics of granular materials, Continuum Models of Discrete Systems (edit. A. J. Spencer), A. A. Balkema, pp. 163-173, 1987.

４） 斉藤延夫 : (著者は今のところ詳しい論文を手に入れていない。次の論文にその概略が記されている) 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、1997.

５） 中尾隆志、藤田睦博 : 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－、土木学会北海道支部論文報告集、第５３号(B)、pp. 222-225, 1996.