

均質化法による粘土鉱物周辺の浸透流解析

名古屋大学大学院工学研究科
宇都宮大学工学部
名古屋大学大学院工学研究科

学生員 ○谷口 貴之
正会員 清木 隆文
正会員 市川 康明

1. はじめに

高レベル放射性廃棄物の処分法として考えられている地層処分では、地下水による核種の移動を防ぐ障壁としてベントナイト緩衝材の遮水性が期待されているが、地層処分に求められる数万年というオーダーで浸透問題を考えるとき、その遮水のメカニズムを正確に知ることは非常に重要である。このメカニズムを把握するため、本研究ではベントナイトの主構成鉱物のモンモリロナイトを対象とし、微視的周期構造を有する材料に対して適用できる数学理論である均質化法¹⁾を適用し、微視的構造を考慮に入れた浸透解析を行った。また、粘土鉱物周辺の水の粘性は分子動力学法により計算されたものを用いた。

2. 多孔質体の浸透問題への均質化法の適用

図1に示すような微視的周期構造を有する多孔質体中の流れを考える。ここで大域座標系 $\mathbf{x}$ と局所座標系 $\mathbf{y}$ は $\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon}$ と関連づけられ、非圧縮 Stokes 流を仮定すると、運動量保存則、質量保存則、境界条件は次式で与えられる。

$$-\frac{\partial P^\varepsilon}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 V_i^\varepsilon}{\partial x_k \partial x_k} + F_i = 0, \quad \frac{\partial V_k^\varepsilon}{\partial x_k} = 0 \quad \text{in } \Omega^\varepsilon, \quad V_i^\varepsilon = 0 \quad \text{on } \Gamma \quad (1)$$

ここで V_i^ε は流速、 P^ε は圧力、 μ は粘性係数、 F_i は物体力である。つぎに、流速 V_i^ε 、圧力 P^ε 、体積力 F_i^ε の ε に関する摂動展開

$$V_i^\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon^2 V_i^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^3 V_i^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots$$

$$P^\varepsilon(\mathbf{x}) = P^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon P^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots$$

$$F_i^\varepsilon(\mathbf{x}) = F_i^0(\mathbf{x}) + \varepsilon F_i^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots$$

を式(1)に代入し、 $\varepsilon \rightarrow 0$ を考慮して式展開していくと、最終的に次に示すようなミクロ方程式、マクロ方程式と呼ばれる二つの方程式群に帰着する。

ミクロ方程式

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial^2 v_i^k}{\partial y_j \partial y_j} - \frac{\partial p^k}{\partial y_i} + \delta_{ik} = 0, \quad \frac{\partial v_i^k}{\partial y_i} = 0 \quad \text{in } Y_F, \quad v_i^k = 0 \quad \text{on } \Gamma \\ v_i^k(\mathbf{y}) = v_i^k(\mathbf{y} + \mathbf{Y}), \quad p^k(\mathbf{y}) = p^k(\mathbf{y} + \mathbf{Y}) \quad \text{on } \Gamma \end{aligned} \quad (2)$$

マクロ方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{V}_i^0}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{|Y|} \int_{Y_F} V_i^0 dy \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\rho F_i^0 - \frac{\partial P^0}{\partial x_i} \right) \frac{1}{|Y|} \int_{Y_F} v_j^i dy \right\} = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

ただし、 v_i^k と p^k は特性関数と呼ばれ以下の関係を満たす。

$$V_i^0 = \left(\frac{\partial P^0}{\partial x_k} - \rho F_k^0 \right) v_i^k, \quad P^1 = \left(\frac{\partial P^0}{\partial x_k} - \rho F_k^0 \right) p^k \quad (4)$$

マクロ方程式に注目し下線部を K_{ij} と置くと、これが浸透方程式の形になっていることがわかり、 K_{ij} を均質化透水係数と呼ぶ。通常工学で用いられる透水係数 K'_{ij} を均質化透水係数 K_{ij} を用いてあらわすと次式になる。

$$K'_{ij} = \rho g K_{ij} \quad (5)$$

3. モンモリロナイトの構造と層間水の粘性分布

ベントナイトの主構成鉱物であるモンモリロナイトは層状体の粘土鉱物であり、通常は複数の層状体が水を挟みながら積み重なって図2のような重層体を形成している²⁾。

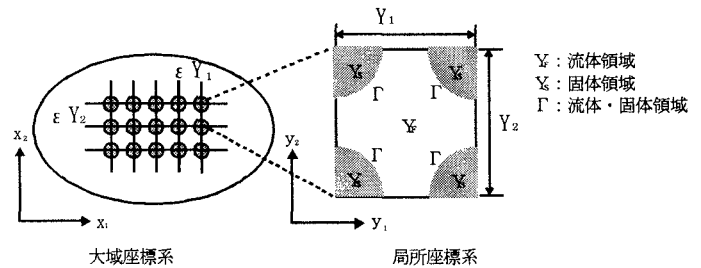


図1. 微視的周期構造を有する材料

また層間を流れる水の拡散係数、粘性係数は分子動力学法により計算され、図3のような分布を示す。

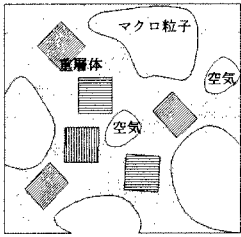


図2. モンモリロナイトの構造モデル

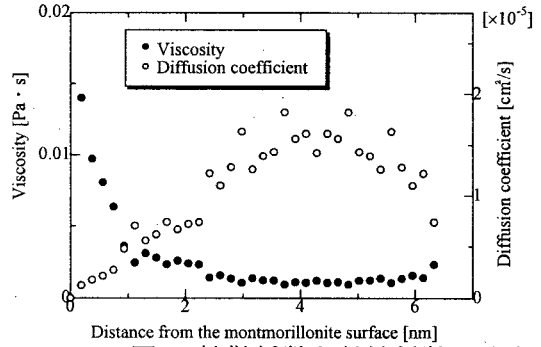
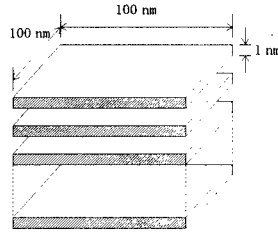


図3. 拡散係数と粘性係数の分布

4. 均質化法によるモンモリロナイト周辺の浸透流解析

モンモリロナイトは図4のように層状の周期構造を持つので、図1と同様の手順で均質化法が適用され、均質化透水係数を求めることができる。なお数値解析はモンモリロナイトが重層体の層間を広げながら膨張する特性があることをふまえ、層間の距離 d を $0.6 \sim 8.4 \text{ nm}$ の間で変化させて行い、層間を流れる水の粘性分布は図3にしたがって与えた場合と、水の粘性について何も考慮せず通常の水の粘性を一定して与えた場合について行った。

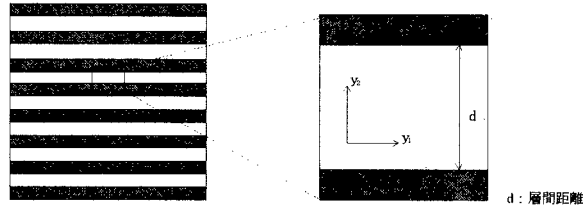


図4. モンモリロナイトの作る周期構造

解析結果を図5、図6に示す。この結果より層間距離が 3 nm を超える場合、層間にモンモリロナイトの束縛を受けない自由水が存在することになり、その流れが透水係数の増加に大きく寄与していると判断できる。地層処分で用いられるベントナイトは密度 1.80 g/cm^3 程度まで圧縮されたもので、これをモンモリロナイトの層間距離に換算すると、約 1 nm に対応する。本解析では層間距離 1 nm に対応する透水係数は約 2.5×10^{-12} であるが、これはPusch³⁾が行った実験結果をはじめ、多くの実験結果と非常によく一致するものである。

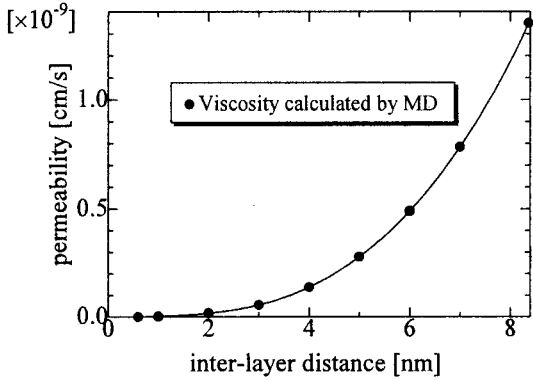


図5. 層間距離と透水係数の関係

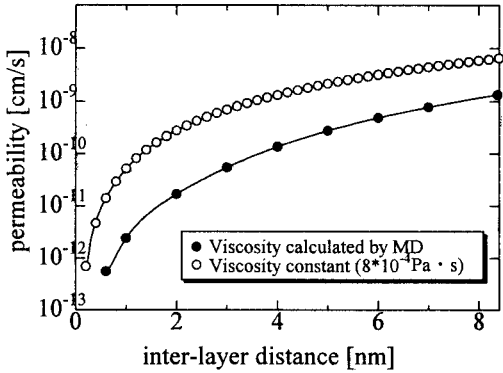


図6. 粘性の違いによる比較

5. おわりに

本解析では、均質化法による解析に分子動力学法の結果を組み込むことで、微視的構造を考慮に入れた浸透解析を行うことに成功した。今後の課題点は、より実際のベントナイトに近い解析モデルを作成することがあげられる。

参考文献

- 1) Bakhvalov, N., Panasenko, G.: Homogenization: Averaging Processes in Periodic Media; Nauka Pu, 1963
- 2) 中野政詩: 土の移動物質学; 東京大学出版, 1991
- 3) Pusch, R: Waste Disposal in Rock ; Elsevier, 1994