

個別要素法を用いた粘土粒子挙動シミュレーション

佐賀大学 学生員 ○右近 淑
正 員 柴 錦春

正 員 荒牧 軍治
正 員 古賀 浩二

1. はじめに

個別要素法は、不連続体の力学的特性の解析に対して有用であり、土質力学の分野においても、土の力学的特性を左右する土粒子間の相互作用を研究するのに有用な解析法として知られている。既に、砂などの粒状体の動的挙動については、個別要素法を用いたシミュレート手法が確立されている。また、粘土に関してもコロイド化学の研究結果に基づき、ランダム配列された粘土粒子間の電気二重層反力と Van der Waals 吸引力をモデル化する半理論、半経験的なマイクロ構成式が Anandarajah (1994, 1996) により既に提案されており、いくつかの有用なシミュレーション結果が発表されている。

本研究は、これらの研究に基づき粘土構造体を電氣的反力、棒体の接触力を有する棒状粒子の集合と捉え、粘土を圧密した時に、粘土粒子がどのような挙動をするのか、個別要素法を用いてシミュレートする。

2. 粒子間物理化学的反力のシミュレーション

プログラムのフローは、図-1に示す通りである。以下に、主な事項について述べる。

(1) 幾何学について

図-2に示す様な"ZOI"と呼ばれる領域を粒子間に於いて定義する事が本解析に於いて最も重要な事項である。粒子間の相互作用は、"ZOI"内で唯一存在すると仮定されている。また、図-3に示す様に粒子が存在している場合、粒子1,2間と1,3間に於いては、"ZOI"が定義され、1,4間には、"ZOI"が定義されない。

(2) 反力(Repulsive Force)について

粘性粒子は、一般にその表面を負に帯電させており、粒子が電解液にある時、溶液中に陽イオンと陰イオンが再分布し、結果的に粒子は、静電気力を受ける。その為、隣り合う2粒子間では、反力が生じる。一般的にそれは、二層反力とされるものであり、それは、空間的に分布する表面力である。本解析は、その力を、合力や粒子の動きとして定量化することにある。数値解析に於いて、この反力は、非線形性が強い一方で、その大きさや空間的な分布というのは2粒子間の相対的な位置つまり θ や d にのみ依存していて弾性である。(図-4参照) 本研究に於いて、粒子間に発生する反力は、図-4の様に無限に広がった液体中の二つの粒子をモデルとして考える。静電気力の法則により、全ての粒子における反力の合計は、 y 方向にあり、その値は式(1)の様に計算できる。

$$F_y^R = 2nkKT \int_{\Gamma_m} \left[\cosh\left(\frac{ve\psi}{kT}\right) - 1 \right] dx \quad (1)$$

ここで、 Γ_m は2粒子間の中間にある平面、 k はボルツマン定数、 e は電荷、 T は絶対温度、 v 、 n は、イオンの原子価、濃度、 ψ は、それぞれの点における電氣的ポテンシャルである。 K は、標準的な二層厚さの逆数である。標準厚さというのは、単独の陽イオンと陰イオンで形成されている一価の系であり、式(2)として表される。

$$K = \sqrt{\frac{8\pi n_0 e^2 v^2}{ekT}} \quad (2)$$

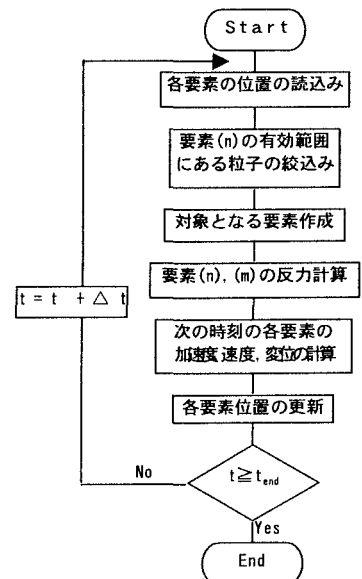
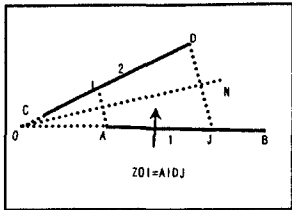
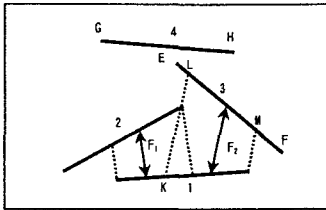


図-1 解析の概略フロー

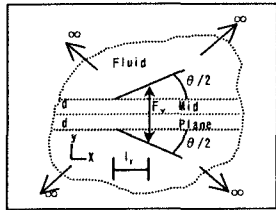
式（１）から、粒子に加わる反力は、中間平面(Mid Plane)に沿って $\cosh(\nu\psi/kT) - 1$ で"ZOI"を領域として分布している。



図－２ ZOIの定義



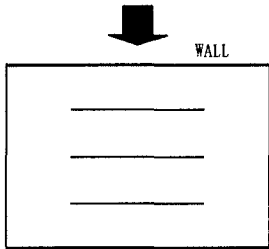
図－３ 内部粒子間の計り方



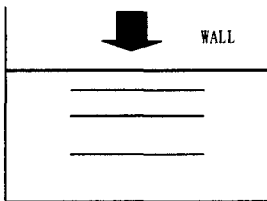
図－４ 溶液中にある２粒子と反力

（３）平行粒子間での物理化学的力のシミュレーション

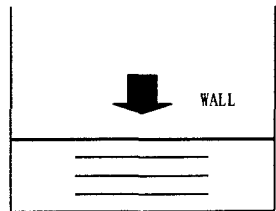
物理化学的な力を考慮した問題のより良い方法を見付ける為に簡単な系、平行な粒子が、それに平行な壁の間にあるというものについてシミュレートする。粒子は、図－５にあるように 0.0625μmの距離で配置させた。壁、粒子の長さは、それぞれ 1.0μm,0.5μmとした。粒子の質量は、 $2.7\times10^{-21}\text{Ns}^2/\mu\text{m}^2$ と仮定した。この物性値は、ケイ酸塩鉱物に相当する。初期状態は、平衡状態（粒子、壁間の反力が釣り合っている状態）とし、上部壁を平行に保ったまま $3.0\times10^2\mu\text{m}/\text{sec}$ の速さで動かす。この壁のトータルの移動量は、0.162μmである。刻み時間は、 $1.35\times10^{-9}\text{sec}$ とした。初期、中期、終期の三状態の結果を図－５(a)～(c)に示す。



図－５ (a) 圧密初期



図－５ (b) 圧密中期



図－５ (c) 圧密終期

3. 一次元圧密シミュレーション

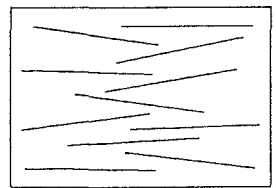
今回は、粘土粒子をシミュレートする為に、実際の粘土の物性値とは必ずしも一致しないが、図－６に示すモデルを考えた。一樣な長さ 0.5μmの粒子の集合を、大きさ 1μm×1μmの箱の中にランダム配置した。シミュレートの結果を図－６(a)(初期状態)、(b)(圧密後状態)に示す。荷重直後、移動壁付近に集中していた粒子は、5000 回後、平衡状態になり、かなり均一になっている様に見受けられる。

4. あとがき

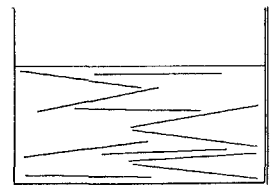
今回は、粒子の挙動をシミュレートするということに重点を置き、解析を行った。その結果、定性的ではあるが、圧密を行った時に、粒子が内部でどのように挙動しているのかうまく表すことができた。また、より実際の粘土に近い物性値を使い、1000 個程の粒子群についてシミュレートすれば、より実際の挙動に近いシミュレートをすることも可能である。本研究は、これから、粘土の特性について定量的に研究することの取掛りとして、十分に役割を果たせたものと思う。

参考文献

- (1) Anandarajah, A.(1994) "Discrete Element Method For Simulating Behavior of Cohesive Soil" 'Journal of Geotechnical Engineering Vol. 120, No9
- (2) Cundall, P. A & Strack, O. D. L.(1979) "A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies" 'Geotechnique 29 No1
- (3) Ning Lu & Anandarajah, A.(1992) "Empirical Estimation of Double Layer Repulsive Force Between Two Inclined Clay Particles of Finite Length" 'Journal of Geotechnical Engineering Vol. 118, No4



図－６ (a) 初期状態



図－６ (b) 圧密後状態