

個別要素法による粘土の一次元圧縮のシミュレーション

佐賀大学理工学部 学生員○北島 玲子 学生員 山崎 英記
 正員 柴 錦春 正員 三浦 哲彦

1. はじめに 個別要素法(DEM)は要素間の相互作用(移動・接触・分離等)をシミュレートでき、粒状体の力学的特性を解析する有力な手法の一つである。既に、砂の挙動を解析する DEM 手法は確立されており、粘土に関しても検討が始められた¹⁾。本研究では理想的な粘土粒子モデルを用いて、一次元圧縮時の粒子の挙動をシミュレーションし、圧縮過程における粒子間の物理化学力・セメンテーションの影響を検討する。

2. 粘土粒子間の物理化学力の影響 主な粒子間の物理化学力は、2重層反力(R)と Van der Waals 引力(A)である。2つの平行な粒子間の単位面積あたりの2重層反力は以下の式で求める²⁾。

$$R' = 2nkT[\cosh(v\phi/kT) - 1] \quad [1]$$

k:ボルツマン定数(1.38・10⁻²³JK⁻¹), e:電荷量(1.602・10⁻¹⁹Coulomb), T:絶対温度(°K), n:イオン濃度(M), v:イオンの電価, φ:粒子表面の電気ポテンシャル。

Van der Waals 引力(A)は Hamaker 定数(A)、2粒子の質量、2粒子間の距離の関数である。

表1に与えた条件で粒子間の物理化学力を計算した。イオン濃度 n=0.001M の場合、n=1M の場合の粒子間の引力・反力及び合力の分布は図1(a)~(d)に示す。イオン濃度が非常に低い時(n=0.001M)、粒子間の中線からの距離(d)が約10Å以上では、粒子間の反力>引力となり合力は反力であるが(図1(a),(b))、イオン濃度が高く(n=1M)、dが約15Å以上の場合、合力は引力となる(図1(c),(d))。

粘土粒子の長さを0.5~2.5μm、厚さ0.03μmと仮定してランダムに653個の個別要素(287個の粒子)を生成し、一次元圧縮のDEMモデルを作成した。粒子間の物理化学力のつりあいを取った後の粒子の配列は図2に示す。イオン濃度 n=0.001M の場合は分散状態が見られ、n=1M の場合は、いくつかの粒子集合が観察でき、綿毛状構造が見られる。これは粒子間の物理化学力の影響によるものと考えられる。次に、一次元圧縮をシミュレートし、e-ln(σ'v) (e:間隙比, σ'v:鉛直応力) 曲線、および粒子配列に及ぼす粒子間力の影響を解析した。採用した粘土粒子のヤング率と粒子間のばね定数は表2に示す。

(1) e-ln(σ'v)関係: 図3に e-ln(σ'v)関係を示す。n=1M の場合、粒子間には引力が支配しているため、圧縮過程のσ'vの変動が大きかった。傾向としてn=1Mの場合は、n=0.001Mの場合より降伏応力・曲線の勾配(圧縮係数)ともに大きい。つまり、n=1Mの場合は構造が発達した自然粘土の挙動に近いといえる。

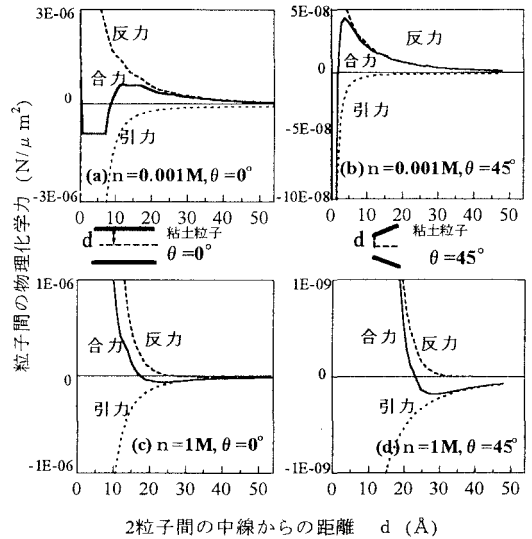


図1 粒子間の距離と物理化学力の関係

表1 粘土粒子の条件

Item		Value
間隙水の特性	陽イオンの原子価 v	1
	電気ポテンシャル φ (mv)	210
	絶対温度 K°	293
	誘電定数 ε	80
Hamaker定数 A		4.5E-20

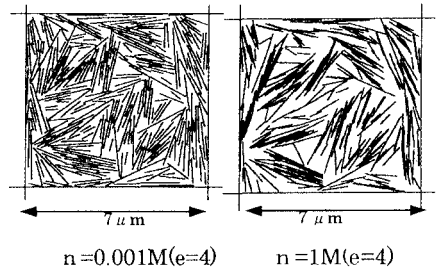


図2 粘土のDEMモデル

(2)粒子配列の異方性: F_{yy}/F_{xx} は粒子配列のテンソルである。 $F_{yy}/F_{xx} < 1$ では粒子がy方向よりx方向に多く方向付けられている。図4に示すように、間隙比が減少するのに伴って F_{yy}/F_{xx} は1以下の値を示す。これは圧縮過程で粒子配列がx方向に配向していることを意味する。 $n=1M$ (綿毛状構造)の場合は $n=0.001M$ の場合より、間隙比の減少に伴う粒子配列テンソルの変化は大きい。

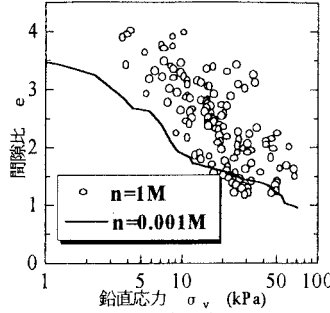


図3 $e - \ln(\sigma'_v)$ 関係

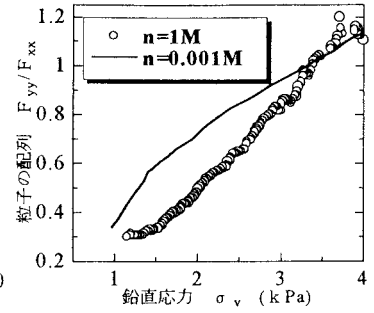


図4 粒子の配列テンソル

表2 ヤング率とばね定数

Item	Value
ヤング率	0.02
E ($N/\mu m^2$)	$(2 \times 10^4 \text{ MPa})$
鉛直ばね定数	
k_n ($N/\mu m^2$)	4.65×10^{-4}
せん断ばね定数	
k_s ($N/\mu m^2$)	2.33×10^{-4}
モーメントばね定数	
k_m ($N-\mu m/\text{rad}$)	1×10^{-6}

表3 セメンテーション強度

Item	Value	
	Case I	Case II
引張強度 (N)	1×10^{-5}	1×10^{-6}
せん断強度(N)	1×10^{-5}	1×10^{-6}
モーメント強度 ($N/\mu m$)	1×10^{-7}	1×10^{-8}

3. 粘土粒子間のセメンテーションの影響 $n=0.001M$, $e \approx 2.0$ の時点で、粒子間に 79 個の接点が発生され、これらの接点にセメンテーションを導入した。仮定したセメンテーション強度のパラメータは表3に示す。それ以降に形成された接点にはセメンテーションは働かないとした。

(1) $e - \ln(\sigma'_v)$ 関係: $e - \ln(\sigma'_v)$ の関係は図5に示す。高セメンテーションの場合(Case I)は、降伏応力は 40 kPa となり実際の粘土に近い値である。この結果により、粘土の挙動に対する粒子間のセメンテーションの影響が大きいことを明らかにした。

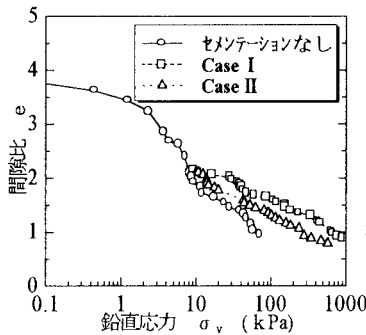


図5 $e - \ln(\sigma'_v)$ 関係

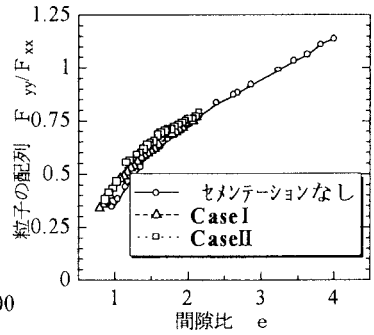


図6 粒子の配列テンソル

(2)粒子配列の異方性: 図6に示すように、間隙比の減少に伴って粒子配列の異方性が発生し、 $F_{yy}/F_{xx} < 1$

の値をとっているが、セメンテーションがある場合では、ないものに比べ、異方性は多少低い。これは、セメンテーションが粒子の移動を拘束するためである。

4. まとめ

(1)粒子間の物理化学力は、粘土粒子の配列構造に大きな影響を与える。粒子間に引力が支配する場合は綿毛状構造、反力が支配する場合には分散構造になる。

(2)粘土粒子間のセメンテーションの導入により、実際の粘土の挙動に近いシミュレーション結果が得られた。粘土の挙動において、粒子間のセメンテーションの影響が大きいことを明らかにすることができた。

謝辞 解析に用いた粘土用 DEM プログラムはアメリカ Johns Hopkins 大学の A.Anandarajah 教授が開発したものである。

参考文献 1)Chai, J. C., Miura, N., and Aramaki, G. (1998). Simulating 1-D compression of clay by discrete element method. International Symposium on Lowland Technology, Saga, Japan, pp.91-98 2)Verwey, E. J. W., and overbeek, J. G. (1948). Theory of the stability of lyophobic colloids. Elsevier Publishing company, Inc., New York.