

間隙水分布を考慮した不飽和多孔質体の熱伝導特性解析

岡山大学 学生会員 ○中島 唯一
 岡山大学 正会員 木本 和志

1. はじめに

地盤・岩盤は多孔質体であり、飽和と不飽和の水分量によって熱伝導率が変化する。それがどのように変化していくのかが分かれば、熱伝導性から水分量の評価もより定量的になっていく。ゆえに地盤や岩盤の熱伝導性の評価や予測を正確に計測していくことは、ヒートプローブ法や廃棄物処分において重要である。しかし、熱伝導の変化を明らかにすることは難しい。水分の配置、間隙の構造が複雑であること、それぞれの粒子分布のランダム性、これらの影響を考慮した数値シミュレーションの手法が必要である。

本研究では3相すなわち、固相・液相・気相からなるモデルによる熱伝導解析の手法の提案をするものであり、モデルに対し水分配置の決定、熱伝導解析、全体の平均的な熱伝導率の算出の3ステップによる方法で不飽和多孔質体の熱伝導の特性を解析するものである。

2. 不飽和多孔質体における熱伝導モデルと解析手順

不飽和多孔質体は固相・液相・気相の3相系であり、固体粒子が周期的に配置されている図1のような2次元モデルを数値解析のための基本的なモデルと設定した。数値解析で扱う周期的な多孔質体の単位セルを、幅・高さ W の正方形領域とし、単位セルの x 軸方向に対して平行な両端に温度差 ΔT を与え、セル内に温度勾配を生じさせる。 x 方向のセルとセル間の温度の流れをないものとし、温度の流れを y 方向のみとする。

水の配置を決定するにあたって、本研究では、界面自由エネルギーの最小となる状態を求める最適化問題とし、モンテカルロ法(MC; Monte Carlo method)を利用したシミュレーテッドアニーリング法(SA; Simulated Annealing)¹⁾を用いりモデル内の間隙水分布を決定し(ステップ1)、熱伝導解析には有限要素法によりセルを分割したメッシュの各節点の温度を算出し、要素ごとの定常フラックスを算出する。(ステップ2) そのフラックスからモデル全体での平均的な熱伝導率 $\bar{\lambda}$ を求める。以下では $\bar{\lambda}$ をマクロ熱伝導率とする。固相粒子や水分の配置がマクロ熱伝導率にどのように影響を与えるのかを調べていく。(ステップ3)

解析モデルの固相 D_s 、液相 D_f 、気相 D_g がそれぞれ石英、水、空気であることを想定し、界面自由エネルギーを

$$\gamma_{sg}=422.0, \quad \gamma_{sf}=350.0, \quad \gamma_{fg}=72.0, \quad [\text{mJ/m}^2]$$

と²⁾³⁾し、熱伝導率をそれぞれ、

$$\lambda_s=7.60, \quad \lambda_f=0.607, \quad \lambda_g=0.0241, \quad [\text{W/Km}]$$

とした場合⁴⁾で解析をおこなうこととする。

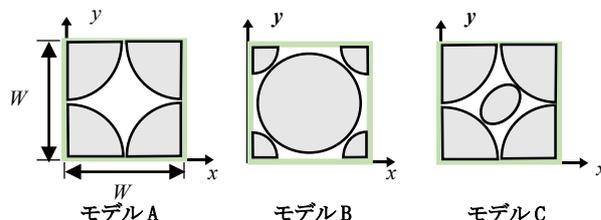


図1. 固相の配置

3.1 MC/SA 法

適当な初期状態から出発し、仮想温度変数 T を徐々に下げていくことによって最小自由エネルギーの構造を求めていく SA 法に、乱数を用いた数値シミュレーションである MC 法を組み合わせ、最小自由エネルギーの配置を決定する⁵⁾。選択された液体・気体要素が交換される前後の自由エネルギーの変化量 ΔG を算出し、 $\Delta G \leq 0$ であれば配列の変化を受け入れ、 $\Delta G > 0$ ならば確率 P と乱数 $R \in [0,1]$ で比較され、 $P > R$ の場合において受け入れるものとする。遷移確率 P は ΔG と温度 T との関数であり、式(3.1.1)で表される、

$$P(\delta G) = \exp(-\delta G/kT) \quad (3.1.1)$$

この手順を各温度で R_c [回]繰り返しおこない、 R_c 回後 T をある冷却方法で下げ、その温度でまた繰り返される。 $T < 1.0$ となれば終了とする。本研究では $R_c=100,000$ とし、終了までのステップ数を 1500step とし計算をおこなう。

3.2 有限要素法(FEM)

本研究で扱うものは節点温度 u を未知数とする FEM であり、簡単で繰り返し効率よく解析が行えるように一辺の長さが $W/100$ の正方形メッシュを用いた。4 点の節点で構成されている四角形要素であり、一次のアイソパラメトリック要素を用いて近似を行った。未知の温度 u を解く際の連立一次方程式は合成マトリックスを作成せず、反復法である CG 法を用い要素マトリックスで収束するまで繰り返し計算を行う。算出させた節点温度より、各要素の中央での定常熱フラックスベクトルを求め、領域全体の平均熱フラックスから $\bar{\lambda}$ を得る。

キーワード 間隙水分布, 多孔質体, 平均熱伝導率

連絡先 〒700-8530 岡山市北区津島中3丁目1-1 環境理工学部棟

TEL : 086-251-8801 FAX : 086-251-8808

4.1 単一粒径・単純格子モデル

まず、図 1 示されている粒径が均一な固相の単純格子モデル A について、水要素の初期配置をランダム、膜状、中心に配置の 3 種類、温度は急冷、一定、徐冷の 3 つの履歴を通る条件下で解析をおこなう。図 2 は MC 法による水分分布シミュレーション結果である。飽和度 S_w が小さい場合、より小さな間隙に水が吸着し、 S_w が大きくなるにつれ吸着した水相の体積が大きくなっていくことがわかる。また、水分要素の初期配置、冷却方法の違いによりマクロ熱伝導率の値の変化は見られなかった。

図 3 より、 $S_w=0.0\sim 0.1$ の区間では $S_w=0.2$ 以降に比べ、マクロ熱伝導率の勾配が大きい。これは固相間の y 方向熱伝導を気相が遮断しており、水の侵入により固相間が熱的に架橋され、マクロ熱伝導率が急増するものと考えられる。

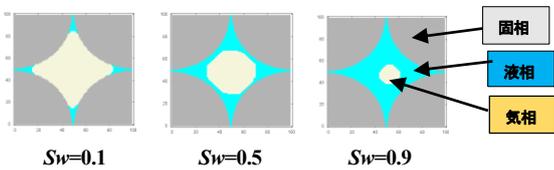


図 2. パターン①での MC による間隙

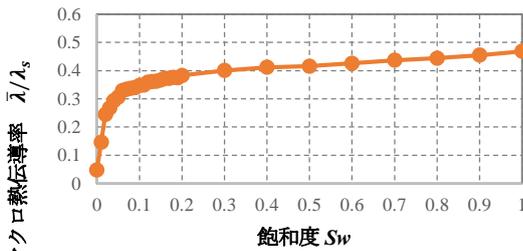


図 3. モデル A の熱伝導率

4.2 2 種類の径の異なる粒子が充填されたモデル

粒径の均一な固相粒子の単純格子では、固相粒子間の水の詰まり方が単調に偏りなく形成される。そこで粒径が異なる 2 種類の固体粒子で形成されるモデルを考える。モデル B は粒径の比が 1:2 の 2 種類の円形からなるセルであり、モデル C は単純格子の間隙の中心に楕円形の固体粒子がある。図 4 と 5 はモデル B と C の MC 法による水分分布シミュレーション結果である。

図 4 について、固体粒子の隙間に偏りがある場合、飽和度が低い状態ではより狭い粒子間の空間に水が吸着していき、その空間がある程度埋まると次により間隙の小さな空間に水が吸着することがわかる。また、固相粒子同士がある程度近い状態ではメニスカスが形成される。モデル B に注目すると、 $S_w=0.4$ と 0.5 での熱伝導率の勾配が大きくなっており、図 4 より $S_w=0.4$ ではメニスカスが x 方向にのみ形成されており、 $S_w=0.5$ では新たに y 軸方面に形成されている。これよりメニスカスは固体粒子間の熱伝導をつなぐ役目になっていることがわかる。

モデル C のように固相粒子の粒径や形を変え、間隙空間に異相性が現れると、図 5 が示すように水の間隙への埋まり方にランダム性があり、セル単位でみると熱伝導率に影響している。

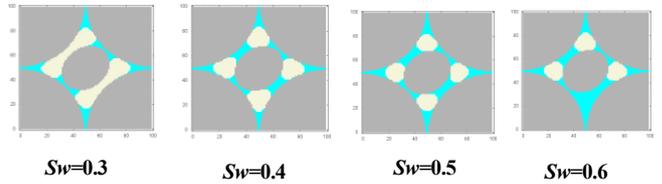


図 4. モデル C の MC による間隙水

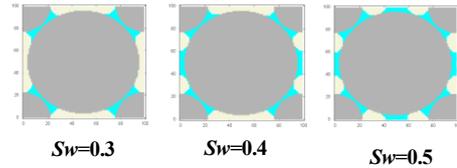


図 5. モデル B の MC による間隙水

5. まとめ

MC/SA 法を用いた不飽和多孔質体の間隙水分分布の最適配置を求めることで、結果よりメニスカスの形成など界面自由エネルギーに従った現実的な不飽和状態のモデルを作成することが可能であることが示された。

FEM による解析結果から飽和度と熱伝導率の関係を調べた結果、既往の文献で報告されている実験データの飽和度-熱伝導率の関係のグラフ⁹⁾と合うことがわかる。

また、モデルの違いによって飽和度を上昇させた間隙水の吸着の固相への仕方が変化し、熱伝導率の変化に影響を与えることがわかる。

これらのことより、固相粒径の配置やサイズ、飽和度の違いがマクロ熱伝導率に対してどのように影響するのかが数値シミュレーションを使用することにより調べることができ、実験や計測データの解釈、実現象の理解または予測に役立つと考えられる。

今後は、より実際の現象に近づけるために、2次元での解析を 3次元でおこない、非周期モデルへの適用や大規模計算での解析が課題である。

参考文献

- 1) Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., Vecchi, M. P.: Optimization by simulated annealing, Science, 220, pp.671-680, 1983.
- 2) Parks, G. A.: Surface and interfacial free energies of quartz, J. Geophys. Res. 89, pp.3997-4008, 1984.
- 3) Adamson, A. W.: Physical Chemistry of Surfaces, 4th edn, Wiley, New York, 1982.
- 4) Berkowitz, B., Hansen, P. D.: A Numerical Study of the Distribution of Water in Partially Saturated Porous Rock, Transport in Porous Media 45, pp.303-319, 2001.
- 5) 日本熱物性学会: 熱物性ハンドブック, 養賢堂, 1990.
- 6) 岩崎佳介, 木本和志: 充填構造を考慮した不飽和砂の熱伝導率発現機構に関する研究, 土木学会論文集 A2, Vol.71, No.2, pp.I_595-I_604, 2015.