

格子ボルツマン法を用いたコンクリートの溶脱解析に関する研究

人見 尚 竹田 宣典
入矢 桂史郎

Study of Leaching Analysis of Concrete using Lattice Boltzmann Method

Takashi Hitomi Nobufumi Takeda
Keishiro Iriya

Abstract

The lattice Boltzmann method (LBM) is a new numerical analysis method for mass transport and flow. This report describes the results of LBM examination of calcium leaching in concrete. Using LBM to determine calcium diffusion based on a chemical model of concrete leaching, we compared the analysis results with those of past reports, and confirmed the effectiveness of this method. In addition, for the actual concrete, we also analyzed the calcium diffusion in the concrete-like medium in which the aggregate was placed. This shows that simulations of concrete leaching become possible in the inhomogeneous medium which contain cracks and aggregate in the concrete.

概要

拡散や移流等の物質移行の解析法である格子ボルツマン法(LBM)をコンクリート中のカルシウム溶脱の予測解析に適用することを検討した。これまでに示されている溶脱のメカニズムを用い、格子ボルツマン法を用いた溶脱解析と、差分法による既出解析との比較を行った。その結果、ほぼ同等の結果を与えるのみならず、LBMを用いた3次元解析が、差分法による1次元の解析と同等の時間で計算実行できることを確認した。また、溶脱解析では、これまでコンクリートを均質媒体としてしか扱えなかったが、粗骨材を模擬した球体を導入した溶脱解析が可能であることを示した。これによりLBMを用いることにより、ひび割れや粗骨材といった不均質性を取り込んだ複雑境界を含むコンクリート溶脱解析が実行可能となることを示した。

1. はじめに

構造物の健全性の長期的把握の需要が高まっている。健全性把握を必要とする事例として、放射性廃棄物処分場等、数万年オーダーの品質を予測し設計を行う必要のある施設や、ダムなど数十年を経た長期供用の構造物があり、これらに対して構造物の現状診断と余寿命予測が求められている。

放射性廃棄物処分場やダム等の供用期間は数十年から数万年に及ぶ。このような期間の劣化現象の研究手段としての促進的実験手法は、手間がかかること、実験の促進倍率や実現象との評価が難しい等の問題が指摘されている。このような数万年のスパンのコンクリート品質の予測解析手段の開発がのぞまれている。

本研究の目的は、劣化現象のうち特に長期的な現象であるコンクリートの溶脱の解析予測法の確立である。これまでの解析法¹⁾はコンクリートを均質媒体と捉え、本来局所的な溶解現象をマクロな領域で扱うために、実現象を忠実に表しているものではなかった。

このことの原因の一つとして、コンクリートの骨材やひび割れという不均一性がある。従来解析法においてこれらを考慮した複雑な境界条件の下での実行は事実上不可能であった。近年、新しい解析手法として複雑形状を少ない

計算負荷で扱うことのできる格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method : LBM)¹⁾が提案されている。本報告では、既出の化学モデル²⁾に基づき開発したLBM解析ソフトを用い、モルタル試料の溶脱解析を行った。既出解析結果との比較とコンクリート溶脱解析の適用性について検討を行った。

2. LBMの概要

LBMとは、空間を分割し代表点での値のみを求める離散的数値解析法で、流体や拡散体の濃度や密度を分布関数と呼ばれる各方向のスペクトル量に分解し、その量を隣接する各格子点の間でやり取りし、物理現象を再現する解析法である。LBMは、セルオートマトンに起源をもち、格子ガス法から発展した解析法である。LBMの支配方程式は一定のレイノルズ数以下などの条件の下で流体や拡散の方程式と等価であることが数学的に示されている。

2.1 支配方程式と分布関数

格子点上に分布関数と呼ばれる値を配置し、単位時間ごとに隣接する格子点との間で分布関数のやり取りを行う。式(1)にLBMの支配方程式を示す。

$$f_i(x+c,t+1) - f_i(x,t) = \Omega(f_i(x,t)) \quad (1)$$

左辺に現れる $f_i(x,t)$ はある時刻における分布関数と呼ばれ、密度を方向成分に分解した成分を表している。繰り返し計算の時間刻みあたりの量であるため、これを速度分布にあたる。

方向成分は通常隣接する格子点に向かうものを取り、その点の取り方で様々なモデルが存在する。通常はFig. 1に示す、第一近接格子と対角方向の第三近接格子方向および静止を表す自分自身への長さ0の速度を取り、これを3次元15速度モデル(3D15Vモデル)と表現している。格子の形状も2次元では三角格子や正方格子など様々な採り方があり、それに伴い様々なモデルが存在する。速度方向を多く採ることは計算精度を向上させることに繋がるが、計算負荷を増やすことにも繋がる。

LBMでは無次元化された長さ x と時間 t を用いており、 $x+c$ はある座標 x から速度 c ×単位時間の距離だけ離れた格子点の座標を、 $t+1$ ある時刻 t から単位時間だけ経過した時刻を示す。右辺は衝突項と呼ばれる関数である。

LBMでは、無限遠では密度は平衡状態にあると考え、隣接点からの伝播は、粘性係数や拡散係数に応じ、平衡状態と重み付け平均で伝わる機構となっている。衝突項はそのような平衡状態を加味する項となっている。LBMにおける平衡状態は、流体であればボルツマン分布を、拡散であれば一様分布をあてている。衝突項を式(2)に示す。

$$\Omega(f_i(x,t)) = -\frac{1}{\tau} [f_i(x,t) - f_i^{eq}(x,t)] \quad (2)$$

LBMの大きな利点を以下にまとめる。

- 1) 比較的粗いメッシュでも良い精度の解が得られること。これは、各格子点に分布関数という多成分の情報をもたせていることに起因する。
- 2) 複雑形状の伝播問題を容易に扱えること。これは隣接する格子点との分布関数のやり取りであるために、全体のFEMにおける剛性マトリックスを求める必要がないことに起因する。
- 3) そして移流と拡散を連成し同時に解けることが挙げられる。格子ボルツマン法における移流と拡散方程式がほぼ同等に表現でき、同様の演算で求められることに起因する。

これまで、コンクリートを対象とした劣化解析には困難であった粗骨材やひび割れの材料モデルが、LBMでは容易に実現できる。

3. コンクリート溶脱モデル

3.1 溶脱モデル

本報告で用いたコンクリート溶脱モデル¹⁾をまとめる。このモデルのコンクリートの溶脱は、セメントペースト部分で起こるとし、セメントペーストはCa(OH)₂(以下CH)とCaO、SiO₂およびH₂Oからなる水和物(以下CSH)で構成されて

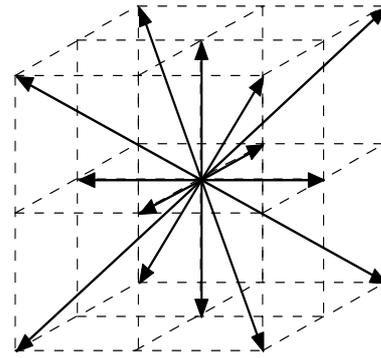


Fig. 1 3D15V Model
3D15V Model

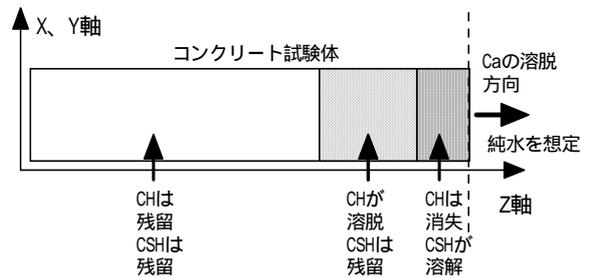


Fig. 2 コンクリート溶脱模式図
Conceptual Diagram of Concrete Leaching

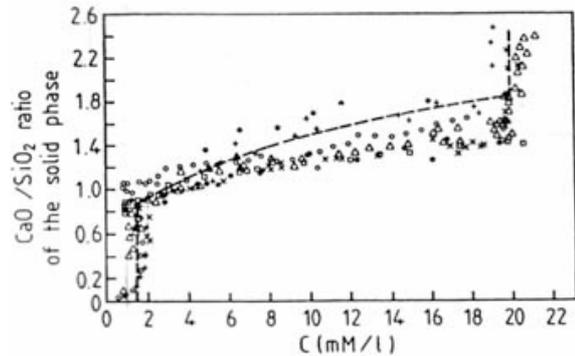


Fig. 3 飽和濃度とCaとSiの比の関係¹⁾
Relation of Saturated Concentration and Ca/Si ratio

いる。溶脱は、Fig. 2に示すように可溶性のCHが選択的に先行して溶解し、CHが消失した後でCSHの溶解が発生する。このモデルのコンクリートの溶解は、カルシウム(以下Ca)の拡散による濃度変化のみに注目している。式(3)に示す支配方程式はCaの濃度Cに関する非線形拡散方程式で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} + R \quad (3)$$

右辺第一項はカルシウムの拡散を表し、Dは拡散係数である。第二項はコンクリート中の媒質の移流を表し、Uが流速である。Uは別途流体の方程式よりコンクリート中の移流を求める必要がある。Rはコンクリートからの溶解や

沈殿に関する項である。

3.2 Caの溶脱メカニズム

溶脱は各格子点での現象とし、各格子点での質量の収支を求めた。拡散の媒質は、細孔に含まれる水分とした。

媒質を考慮した正味のCa濃度 C_r は、簡易法であるがセメント密度と含水率を用い式(4)に示す関係より求めている。

$$C_r = C \cdot \rho_t \cdot \omega / (100 + \omega) \quad [\text{mol}/\text{m}^3] \quad (4)$$

ここで、 ρ_t はセメント密度[10³kg/m³]、 ω はコンクリートの含水率[%]である。

拡散によって低下した局所的な細孔溶液中のCa濃度 C_r とCaの飽和濃度の差を、ペースト部分の溶解で補充する機構とし、CH、CSHの順に溶解するものとした。CHやCSHの溶解速度に関しては詳しい知見が得られていないため、CHは細孔溶液の飽和濃度を常時満たすように飽和濃度とCa濃度の差の全量が、CSHに関しては細孔溶液の飽和濃度との差の1割の分量を補充するだけの量が計算ステップごとにCHとCSHから溶解するとこの比率を変えた感度解析より仮定した。

CHが残存している場合の細孔溶液の飽和濃度は、水中のCa飽和濃度にほぼ等しい20mol/m³であるが、CHが消失し、CSHの溶出フェーズの場合の細孔溶液のCaの飽和濃度は、Bernierによって検討³⁾がなされており、Fig.3に示すような関数関係を満たすことが示されている。既出研究¹⁾では、この飽和濃度 C_0 は、ペースト部分に残存するCaとシリコン(以下Si)の比すなわちCa/Si比の関数として式(5)で与えた。CSHの分子式よりCSHが完全に残存している場合のCa/Si比を2としている。

$$C_0 = \begin{cases} 20 & 1.8 \leq C/S \\ 30.3C/S - 28.2 & 2 \leq C/S < 1.8 \\ 2 & C/S < 2 \end{cases} \quad [\text{mol}/\text{m}^3] \quad (5)$$

CHの溶出フェーズの細孔溶液の飽和濃度は、Ca/Si比が2以上の状態にあたるとして20[mol/m³]とした。飽和濃度を超えたCaはその場所で再析出するとした。

3.3 溶脱に伴う拡散係数の変化

拡散方程式に用いる拡散係数D[m²/s]は、式(6)で与えられる。D₀およびD₁は溶脱を起こしていない未変質部のと溶脱を起こした部位の拡散係数、CH_xおよびCH₁は各位置と未変質部のCH量[mol/m³]を表す。

$$D = D_0 + (D_1 - D_0) \cdot (1 - CH_x / CH_1)^2 \quad (6)$$

コンクリートの拡散係数を正確に測定した例はほとんど存在しない。特に溶脱部はダムコンクリート等の自然現象でも約70年経過時でも高々20mm程度となっており⁵⁾、その狭い幅で急激に変質状態が変化している。このような急激な溶脱状態の変化、すなわち、拡散係数の変化を精密に把握する方法の確立が必要である。

CSHの溶解は、メカニズムを含め拡散係数への影響は明

らかでない。本モデルでは溶解後もCSH中のSiO₂組織のほとんどが残存すると仮定し、拡散係数もCSHの溶解フェーズではCaの残存量には依存しないと仮定した。

3.4 端部での外部水へのCaの流出

コンクリートが外部水に接する部分では、常に濃度0の外部水にCaが溶出すると仮定している。コンクリート端部から外部水への流出については、元のモデルでは水接する端部に純水の拡散係数を局所的に与えているのに対し、本解析ではCaの透過速度を与えている。透過速度の考え方は、熱伝達の問題でも熱源からの周囲へ散逸で異なる物質間の熱の交換で同様の扱いをしており、そのアナロジーである。純水中への透過速度は1.0×10⁻⁷[m/s]となる。この値はCaの水中の拡散係数を参考に感度解析より決めた値である。

4. LBMによる溶脱解析の概要

前章で紹介したコンクリート溶脱モデルをLBMに移植した。ここでは拡散LBMの概要をまとめる。支配方程式導出の詳細はInamuro⁴⁾の文献による。

4.1 LBMでの支配方程式

LBMによるコンクリート内の水分移流の方程式は式(7)に示される。F_iは移流に関する分布関数である。 τ_f は緩和係数と称し、水の粘性係数で定まる値である。

$$f_i(x + c_i \Delta x, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)] \quad (7)$$

コンクリート内のCaの拡散のLBM方程式は、gを分布関数として式(8)に示される。gは同様に緩和係数で、Caの拡散係数で定められる。

$$g_i(x + c_i \cdot \Delta x, t + \Delta t) - g_i(x, t) = -\frac{1}{\tau_g} [g_i(x, t) - g_i^{eq}(x, t)] + 3E_i g_{det} \Delta x \quad (8)$$

右辺第二項が溶解および析出に関する非線形項である。E_iは分布関数のモデルで定まる重み定数である。本解析ではFig. 1に示す3次元15速度(3D15V)モデルを採用した。xは代表長さを基準にとった格子間隔である。g_{det}はCHやCSHの溶解および析出量で、これらの掛け合わせで非線形項を構成する。溶出メカニズムは3.2節に示したものをを用いた。分布関数と密度、速度uおよびエネルギーeとの関係は式(9)に示される。gも同様である。

$$\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}, \quad \rho u = \sum_i f_i c_i = \sum_i f_i^{eq} c_i, \\ \rho e = \frac{1}{2} \sum_i f_i (c_i - u)^2 = \frac{1}{2} \sum_i f_i^{eq} (c_i - u)^2 \quad (9)$$

移流と拡散に関する平衡分布関数f^{eq}とg^{eq}の具体的な表式は式(10)および式(11)に示される。

Table 1 解析に用いた試験体の諸量
Quantities of Test Piece for Analysis

諸量	
単位容積質量	2.16 [g/cm ³]
含水率	12.7 [%]
Ca ²⁺ 濃度	20 [mmol/l]
Ca(OH) ₂ 濃度	1.88 [mol/l]
CSH濃度	2.95[mol/l]
CSHの分子量	212
拡散係数(健全部)	1.0 × 10 ⁻¹² [m ² /s]
拡散係数(溶脱部)	1.7 × 10 ⁻¹⁰ [m ² /s]
透過速度	1.0 × 10 ⁻⁷ [m/s]

Table 2 計算条件
Condition of Analysis

諸量	
試験体幅(X方向)	0.18 [cm]
試験体幅(Y方向)	0.18 [cm]
試験体厚さ	1.2 [cm]
格子間隔	0.03 [cm]
時間刻み	1000 [s]
計算時間	2000 日分

$$f_i^{eq}(x,t) = E_i \rho \left[1 + 3c_i \cdot u + \frac{9}{2} (c_i \cdot u)^2 - \frac{3}{2} u \cdot u \right] \quad (10)$$

$$g_i^{eq}(x,t) = E_i \rho (1 + 3c_i \cdot u) \quad (11)$$

ここで、E_iは重み定数、ρは媒質およびCa密度、c_iは隣接格子へ方向ベクトル、uは媒質である水分の流れの速度を表している。式(10)はボルツマン分布を速度uに關しテイラー展開し2次以上の項で近似したものである。

式(11)に見られる拡散に関する平衡分布関数には移流から求まる局所的な媒質の速度が入っている。これによって、コンクリート中水分の見かけの粘性係数の把握が必要となるが、骨材やひび割れなどの複雑形状ではほぼ不可能であったコンクリート内の水分の移動に伴う局所的な速度場の把握が可能になった。

水分の粘性係数 およびCaの拡散係数Dと緩和係数の関係は式(12)に示される。

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau_f - \frac{1}{2} \right) \Delta x, \quad D = \frac{1}{3} \left(\tau_g - \frac{1}{2} \right) \Delta x \quad (12)$$

4.2 境界条件

解析に用いたコンクリートのモデルは、無限長の平板を仮定している。水平方向には、一方の端部が反対の端部に連続する周期的境界条件を課している。Fig. 2の右端に相当する外部水に接する端部では、透過速度を与え⁶⁾、端

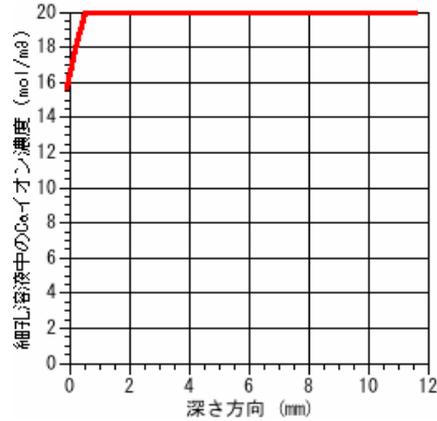


Fig. 4 深さ方向のCa濃度分布
Distribution of Ca Concentration in Depth Direction

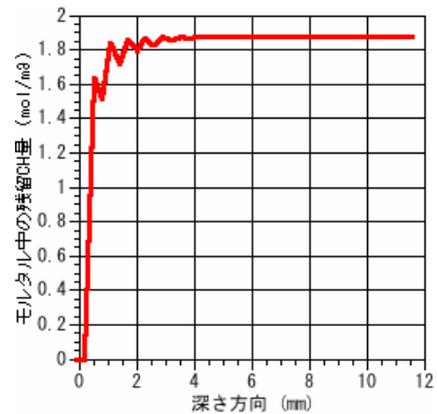


Fig. 5 深さ方向の残存CH量分布
Distribution of Remaining CH in Depth Direction

部の細孔溶液中のCaが濃度に応じて外部に流出するような状況を模擬している。反対側の端部はコンクリート内部を模擬し、Ca濃度やCHおよびCSH量をすべての値を固定する境界条件を課している。

5. 解析結果

対象としたのは、純水に接するモルタルの溶脱状況である。溶脱解析を行い、Caの濃度分布やCa/Si比を結果として求め、既出結果¹⁾との比較によって評価を行った。計算に用いた諸量をTable 1に示す。また計算条件をTable 2に示す。Fig. 2に示すモルタルモデルで面方向に縦が0.18cm、横が0.18cm、深さ方向に1.2cmの直方体を計算領域とした。縦横方向には周期的境界条件を課したので、無限平板の一部を用いた深さ方向の1次元解析にほぼ相当する。溶脱は右側端部の面方向から発生するとした。計算は、2000日後の結果までを求めた。細孔溶液中のCaの濃度のグラフをFig. 4に示す。

横軸は水接している境界面を原点に試験体の深さ方向を正にとり、縦軸に濃度を表す。グラフはFig. 2と左右が反転する表示になっている。端部から深さ1.5mm程度の範

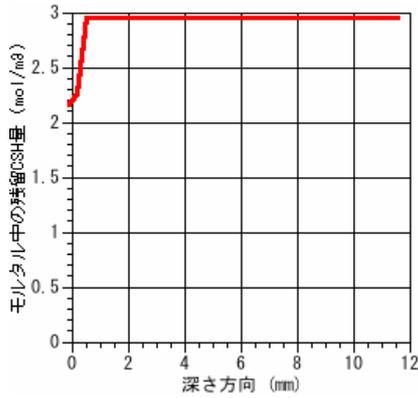


Fig. 6 深さ方向の残存CSH量分布
Distribution of Remaining CSH in Depth Direction

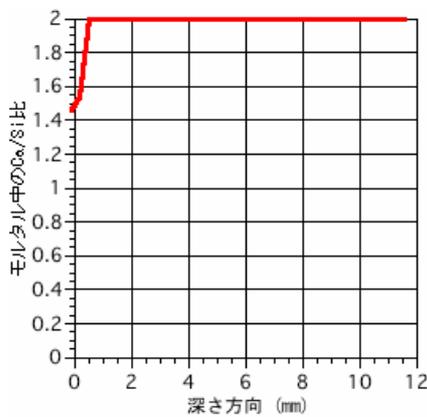


Fig. 7 深さ方向の残存Ca/Si比分布
Distribution of Ca/Si ratio in Depth Direction

囲で濃度の低下が見られる。また、CHやCSHから溶解によるCaの供給があるために、濃度低下は端部近傍のCHやCSHの残留量に比べ狭い範囲に限られている。Fig. 5にペースト部分の残存CH量を示す。横軸は深さ方向、縦軸は残存CH量を表す。CH量は内部まで若干の変動を伴いながら溶解している。

内部のCH濃度にも変動がみられるため、結果からの厳密な判定は難しいが、およそ5~6mmの範囲のCHに変化が生じていると考えられる。この値をもって一般的に溶脱範囲とすることが多い。CHの消失に引き続きCSHの溶解が始まる。Fig. 5と同様に、Fig. 6にペーストに残存するCSH量を示す。端部から1.5mm程度の溶脱が見られる。CSHの消失でセメントペースト組織は消失する。Fig. 7にペースト部分に残ったCaとSiの比を示す。これも同様に1.5mm程度の溶脱範囲となった。ほぼ同様の条件で差分法により解いた既出解析結果においてCaとSiの比の溶脱範囲は4mm弱となっており、本解析よりも大きい値となった。これらは、端部での流出速度やCSHの溶解割合の設定に起因すると考えられる。これらについては今後の課題としたい。

6. 骨材を含む場合の解析結果

本解析では、計算領域中に骨材などの不均質な領域を設

Table 3 解析に用いた試験体の諸量
Quantities of Test Piece for Analysis

諸量	
拡散係数(健全部)	$1.0 \times 10^{-10} [m^2/s]$
拡散係数(溶脱部)	$1.0 \times 10^{-8} [m^2/s]$
流出速度	$1.0 \times 10^{-6} [m/s]$

Table 4 計算条件
Calculation Condition

諸量	
試験体幅(X方向)	0.72 [cm]
試験体幅(Y方向)	0.72 [cm]
試験体深さ	1.8 [cm]

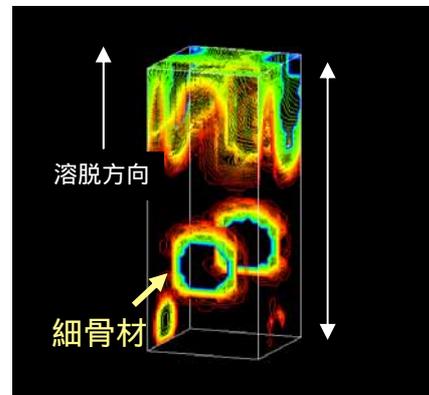


Fig. 8 解析領域の外周部のCa/Si比
Ca/Si ratio of Analytic Area

けることが可能である。実コンクリートを対象とした溶脱解析には骨材やひび割れの存在が大きく影響する。ここでは、骨材を考慮した場合の解析例を示す。

骨材として模擬的に直径8mmの球を配置した。今回は球の径を同一としたが、実際の粒度分布と分散に従った骨材の配置が可能である。骨材を模擬した球は乱数によって中心位置を決め、互いの間隔が一定距離以上になるように配置した。球との境界条件は、速度0境界、および濃度勾配0境界を用いた。骨材とモルタル境界には、遷移体を模擬した領域を設けた。この領域は、遷移帯が数百 μm の幅であるといわれていることから、今回は球に接するモルタル境界に存在する格子点を遷移帯に属するとして扱っている。遷移帯での拡散係数に関する知見はほとんど得られていない。このため、その値をTable 1に示した拡散係数の10倍と試行的に設定した。遷移帯での拡散係数を求めることは今後の課題である。その他、前章から変更した試験体の諸量と解析条件をTable 3とTable 4に示す。

今回の結果は、結果を強調するために、変質部の拡散係数を $1.0 \times 10^{-10} m^2/s$ に設定した。解析規模は、水平方向が0.72cm四方で、深さ方向が1.8cmの直方体とした。配置した骨材は5個である。Fig. 8とFig. 9にC/Sの断面分布、Fig. 10とFig. 11に残存CH量と残存CSH量の断面分布を示す。

拡散係数や遷移帯の効果は模擬的に与えたもので、この結果をもって定量的な判断はできないが、複雑境界条件の下での溶脱解析が可能になったことが示されたと考える。

本解析法は、これまで考慮されていなかった粗骨材の溶脱に対する影響や、ひび割れが入ってしまった場合の拡散係数が急激に変化する場合の溶脱範囲の予測を、現実的な条件設定で可能にし、溶脱予測の精度向上と共にさまざまな条件設定に関する自由度の拡大をもたらすと考えられる。

7. まとめ

本報告の成果を以下にまとめる。

LBMのコンクリート中カルシウムの溶脱現象への適応性を検討した。その結果、以下に示すことが明らかになった。

- 1) LBMの利点は、同様の計算規模であれば、従来法の1次元計算の時間で3次元計算の実施が可能であること、比較的粗いメッシュでも精度の良い解が得られること、複雑境界を自由に設定できるため、骨材やひび割れなどを容易に考慮できることである。
- 2) 非線形拡散LBMを用いて既存の劣化モデルによる溶脱解析を行い、計算結果を過去の計算例と比較を通じ評価を行った。
- 3) 従来法の結果より溶脱が抑制される結果となった。骨材を入れた複雑境界においても、解析実行可能であることを示した。

今後の展望をまとめる。

- 1) 実験結果を正しく再現できるようにソフトウェアを改善することが必須である。
- 2) その後、計算規模の拡大を図り、長期劣化に伴う大きな規模の劣化現象を扱う。
- 3) 数十センチ単位での解析が可能になれば粗骨材等の解析も可能になる。また、ひび割れなども考慮に入れることが可能になる。

参考文献

- 1) 鳶原道久, 高田尚樹, 片岡武: 格子気体法・格子ボルツマン法, コロナ社, 1999
- 2) 斉藤裕司, 辻幸和, 片岡浩人: セメント水和生成物の溶解に伴う変質予測のモデル化, コンクリート工学論文集, Vol.1, No.1, pp.51-59, 2000
- 3) Berner, U.R.: Modelling Porewater Chemistry in Hydrated Portland Cement, Mat. Res. Soc. Symp. Proc, Vol.84, pp.319-330, (1987)
- 4) Inamuro, T., Yoshino, M., Inoue, H., Mizno, R., Ogino, F.: A Lattice Boltzmann Method for a Binary Miscible Fluid Mixture and Its Application to a Heat-transfer Problem, J., Comp., Phys., Vol.179, pp.1-15, (2002)

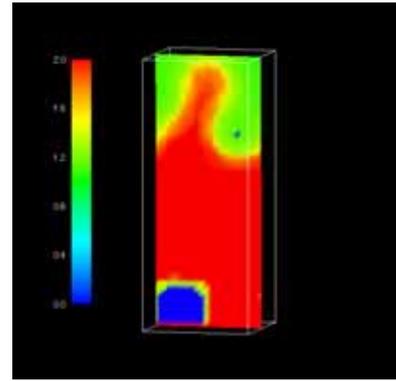


Fig. 9 Ca/Si比の断面分布
Distribution of Ca/Si ratio in Cross Section

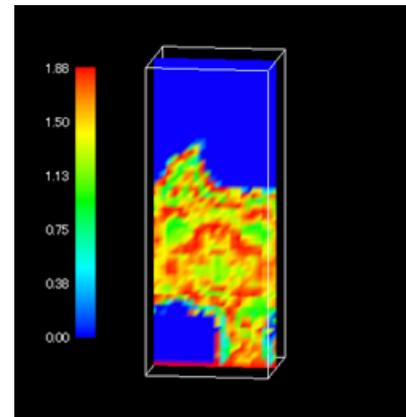


Fig. 10 CH量の断面分布
Distribution of CH in Cross Section

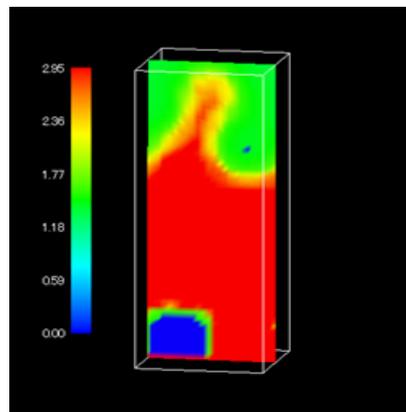


Fig. 11 CSH量の断面分布
Distribution of CSH in Cross Section

- 5) 蓮本清二, 内田善久, 原雅人, 谷智之, 池谷貞右, 斉藤裕司, 三好悟: 水和生成物の地下水への溶脱に伴うコンクリート長期劣化に関する調査, 土木学会第56回年次学術講演会概要集, Vol.2, pp70-71, 2001
- 6) Yoshino, M., Inamuro, T.: Lattice Boltzmann simulations for and heat/mass transfer problems in a three-dimensional porous structure, Int. J. Numer. Meth. Fluids, Vol.43, pp.183-198, (2003)