Japan Concrete Institute

論文　格子ボルツマン法(LBM)を用いたコンクリートの溶脱解析

人見　尚[*1]・竹田　宣典[*2]・入矢　桂史郎[*3]

要旨：物質移行と移流の新しい解析法として格子ボルツマン法(LBM)がある。本報告では，格子ボルツマン法をコンクリートのカルシウム溶脱への適用を検討した結果について述べる。コンクリート溶脱の化学モデルを導入したカルシウム拡散に関する格子ボルツマン法で解析結果と既出文献で報告されている結果との比較を行い，本法の有効性を確認した。

キーワード：長期健全性，コンクリート溶脱，数値解析，格子ボルツマン法

1. はじめに

構造物の長期健全性の把握の需要が近年高まっている。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，超長期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においては構造物の現状診断と余寿命予測が挙げられる。

放射性廃棄物処分場やダム等は，いずれも数十年から数万年に及ぶ，長期の期間の現象を扱うことになる。このような期間の劣化現象の研究手段としての促進実験は、手間がかかること，実験の促進倍率や現実の現象と同様の変質が起こっているかの見極めが難しい等の問題を抱えている。このため，劣化現象をモデル化し解析的に予測するのが望ましい。

本研究の目的は，劣化現象のうち特に長期の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。これまでも既往の解析法[1)]はあったが，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，実現象を忠実にあらわ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、骨材やひび割れ等、コンクリートの元来持っている不均一性は境界条件の複雑化を招き，従来解析法では事実上解くことができなかった。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)が提案されている。コンクリートに関する解析では塩分浸透現象を嶋ら[2)]が扱っている。本報告では，斉藤らの提案による化学モデルに基づき開発したコンクリート溶脱の格子ボルツマン法を用いて，モルタル試料の溶脱解析を行った。斉藤らの結果との比較と併せ解析結果について評価を行い，解析の有効性を示す。

2. 格子ボルツマン法の概要[3)]

2.1 格子ボルツマン法とは

格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method：LBM)とは，流体や拡散体の平衡状態を仮定し，流れや拡散現象を平衡状態からのずれと考え，そのずれ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 は一定のレイノルズ数以下などの条件の下でナビエ＝ストークス方程式や拡散方程式と等価であることが数学的に示されている。

2.2 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

*1　(株) 大林組　技術研究所土木材料研究室ＬＣＣグループ副主査　　工博　(正会員)
*2　(株) 大林組　技術研究所土木材料研究室ＬＣＣグループグループ長　工博　(正会員)
*3　(株) 大林組　技術研究所土木材料研究室材料施工グループグループ長　工博　(正会員)

NII-Electronic Library Service

Japan Concrete Institute

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 $f_i(x,t)$ がある時刻における分布関数と呼ぶ。LBM では無次元化された長さと時間を用いており，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 は時刻 t から単位時間だけ経過した時刻を表す。右辺は衝突項と呼ばれる関数である。

分布関数は各方向にどれほどの速度の粒子がどれほど存在するかを表すもので，その値は正の実数をとる。速度分布は本来連続的であるが，LBM では単位時間後に隣接する格子点に移動できる速度ということで隣接する格子点に向かう離散的な値で代表させている。

2.3 衝突項

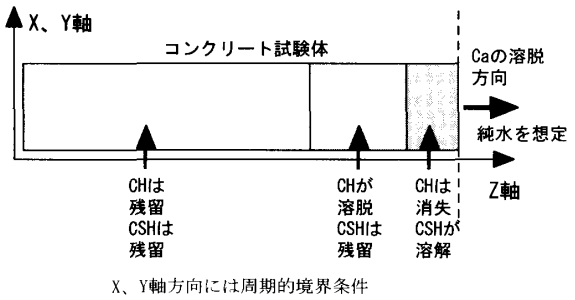
セルオートマトンや格子ガス法では，同じ格子点に到達した粒子の衝突による方向の変化を調整する衝突項があるが，格子ボルツマン法では平衡状態からのずれを伝播する項になっている。LBM における平衡状態は，流体であればボルツマン分布を，拡散であれば一様分布をあたえている。式(2)に衝突項の具体例を示す。

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

流体や拡散問題では，十分大きな時間経過の後は平衡状態を表す平衡分布関数 f^{eq} に到達すると仮定し，流れや物質の移動は平衡状態からのずれという情報で表現する。衝突項には緩和係数 τ と呼ばれる量が現れるが，これが粘性係数や拡散係数の効果を表し，隣接する格子点へのずれの伝播がある速度をもつことを示している。

2.4 LBM を用いる利点

LBM の大きな利点は，比較的粗いメッシュでも良い精度の解が得られること，複雑形状の伝播問題を容易に扱えること，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。最初の利点は，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。次の利点は，あくまでも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。最後の利点は，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。



図－1　コンクリート溶解の模式図

これまで粗骨材やひび割れを解析対象となる材料のモデルに入れ込むことが困難であったが格子ボルツマン法ではこれが容易に実現できる。

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は斉藤らの溶脱劣化モデルをまとめる。このモデルにおいては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，ペーストは CH と CSH で構成されている。溶脱は，**図－1** の模式図に示すように可溶性の CH が選択的に先に溶解し，CH が消失した後で CSH の溶解が発生するとした。このモデルのコンクリートの溶解は，カルシウム(以下 Ca)の濃度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

NII-Electronic Library Service

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て式(4)に示す関係より求めている。

$$C_r = C \cdot \rho t \cdot \omega / (100 + \omega) \quad [\mathrm{mol/m^3}] \qquad (4)$$

ここで，ρt はセメント密度[t/m^3]，ω が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媒質中の Ca 濃度 C_r と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。飽和濃度は **図－２** に示す Berner のまとめた関係 [4]に基づいている。CSH 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。

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

CH 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/m^3]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。

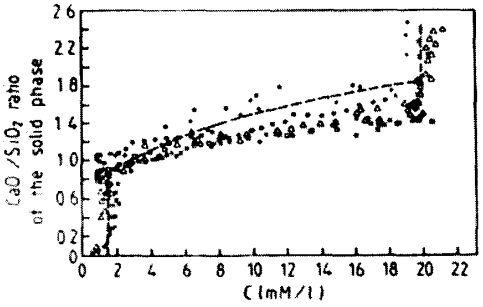
CH や CSH の溶解速度に関しては詳しい知見が得られていないため，CH は飽和濃度を常時満たすように飽和濃度との差の全量が，CSH に関しては飽和濃度との差の 1 割の分量が計算ステップごとに溶解すると感度解析より仮定した。これらの設定は，改めて考察が必要と考える。

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[m^2/s]は，式(6)で与えられる。D_0 および D_1 は未変質部の拡散係数，CH_x および CH_i は各位置と未変質部の CH 量[mol/m^3]を表す。

$$D = D_0 + (D_1 - D_0) \cdot (1 - CH_x / CH_i)^2 \quad [\mathrm{m^2/s}] \qquad (6)$$

CSH に溶解の影響は，CSH の溶解の影響を把握していないために，拡散係数も CSH 中の Ca の残存量には依存しないと仮定した。



図－２　飽和溶解度と Ca/Si 比の関係 [1)]

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，斉藤らが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。透過速度は Ca の水中の拡散係数を参考に決めた値である。

4. LBM による溶脱解析の概要

前章で紹介した斉藤らのモデルを 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稲室ら [5)]の文献による。

4.1 LBM での支配方程式

コンクリート内の水分移流の LBM による方程式は式(7)に示される。τ_f は緩和係数で後述する水の粘性係数で定まる値である。f が移流に関する分布関数である。

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

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。τ_g は同様に緩和係数で，Ca の拡散係数で定められる。

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

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 は分布関数の重み定数である。本

NII-Electronic Library Service

表－1　試験体で定めた諸量

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]
流出速度	1.0×10^{-7}[m/s]

解析では**図－3**に示す 3 次元 15 速度(3D15V)モデルを採用した。これは，静止の分布関数 1 つと第一隣接格子に向かう 6 つと第三隣接格子に向かう 8 つの方向の分布関数から構成されている。Δx は代表長さを基準にとった格子間隔である。g_{det} が 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。

それぞれの平衡分布関数 f^{eq} と g^{eq} の具体的な表式は式(10)および(11)に示される。

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

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

ここで，E_i は重み定数，ρ は媒質および Ca 密度，c は隣接格子への方向ベクトルで，u は媒質である水分の流れの速度を表している。

分布関数と密度ρ，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。

$$\rho=\sum_i f_i=\sum_i f_i^{eq},\quad \rho u=\sum_i f_i c_i=\sum_i f_i^{eq}c_i,$$

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

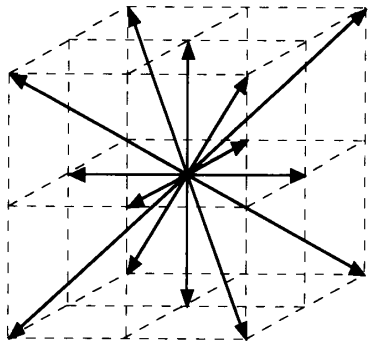
水分の粘性係数ν および Ca の拡散係数 D と緩和係数の関係は式(12)および(13)に示される。

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

$$D=\frac{1}{3}\left(\tau_g-\frac{1}{2}\right)\Delta x \quad (13)$$

表－2　計算条件

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



図－3　3D15V モデル

このように拡散に関する衝突項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，コンクリート中の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。

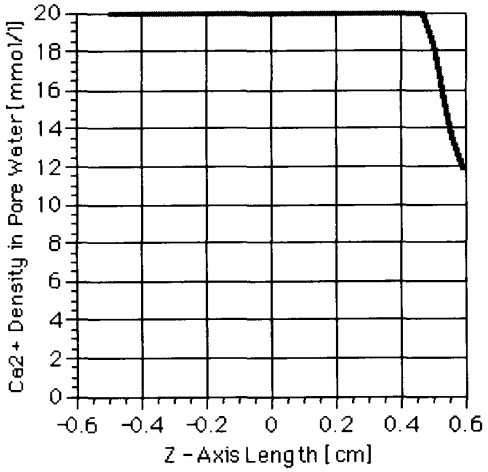
4.2 Ca の溶脱メカニズム

CH と CSH の溶解は前述のとおり Berner のまとめた関係に基づき，CH は格子点の占める領域の細孔溶液の飽和濃度に対し，拡散によって失われた量を CH と CSH からの溶解で供給することにした。

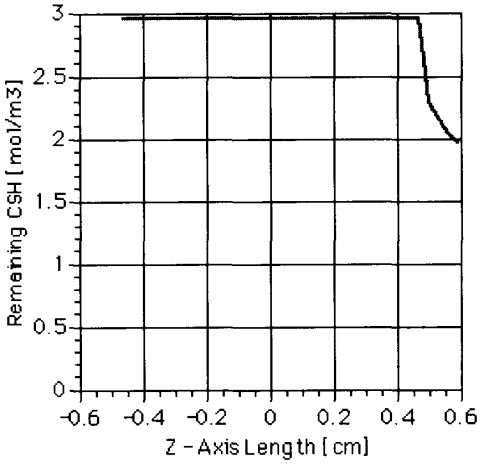
4.3 境界条件

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，周期的境界条件を課している。外部水に接する端部では，透過速度を与え [6]，端部の溶液中の Ca が外部に流出するような状況を与え，反対側の端部はすべての値を固定する境界条件を課している。

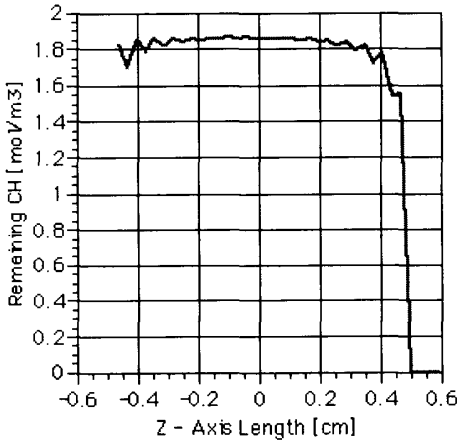
NII-Electronic Library Service



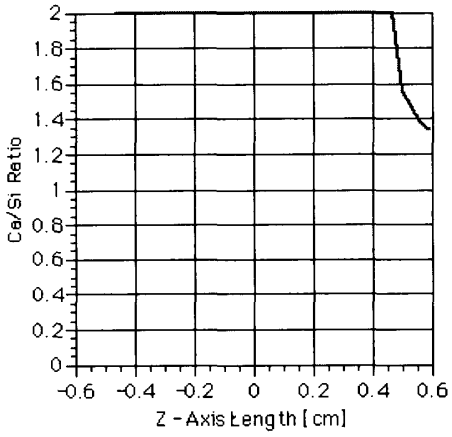
図－４　溶液中の Ca 濃度の厚さ方向分布



図－６　残存 CSH 量の厚さ方向分布



図－５　残存 CH 量の厚さ方向分布



図－７　Ca/Si 比の厚さ方向分布

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，斉藤らが差分で解いた結果との比較によって評価を行った。計算に用いた諸量を表 1 に示す。また計算条件を表２に示す。**図－１**に示すモルタルモデルで面方向に縦が 0.18cm，横が 0.18cm，厚さ方向に 1.8cm 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厚さ方向の１次元解析にほぼ相当する。溶脱は端部の面方向から発生するとした。

計算は，2000 日経過までを求めた。**図－４**に計算終了時の細孔溶液中の Ca の濃度を示す。横軸は試験体の Z 軸方向，縦軸に濃度を表す。図の右端が外部水に接触している端部となっている。端部では外部での流出 1.5mm 程度の範囲で濃度の低下が見られる。また， CH や CSH から溶解による供給があるために，端部近傍の狭い範囲での濃度変化と思われる。**図－５**に溶解していない残存 CH 量を示す。縦軸は残存 CH 量を表す。CH 量は内部まで若干の変動が見られるように，Ca 自体は広い範囲でお奥から端部までの移動が起きている。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。**図－５**と同様に**図－６**に残存する CSH 量を示す。明確に端部から 1.5mm 程度の溶脱が見られる。**図－７**に Ca/Si 比を示す。これも同様に 1.5mm 程度の溶脱範囲

NII-Electronic Library Service

Japan Concrete Institute

となった。斉藤らの解析結果において Ca/Si 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 の溶解の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. まとめ

本報告の成果を以下にまとめる。

- 新しい解析法である LBM の溶脱現象への適応性を検討した。
- LBM の利点は，同様の計算規模であれば従来法の１次元の計算を３次元の計算で，同等の計算時間で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。
- 非線形拡散 LBM 等が既に考案されており，この LBM を用いて斉藤らの劣化モデルを導入した溶脱解析を行い，計算結果を過去の計算例と比較を通じ評価を行った。
- 従来法の結果より溶脱が抑制される結果となった。

現状の課題と今後の展望をまとめる。

- 実験結果を正しく再現できるようにソフトウエアを改善することが必須である。
- 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。
- 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。
- 一方，入力値となる，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 [7]，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。
- 長期の溶脱現象では CSH の変質も考慮に入れる必要があるが，変質の形態や，拡散係数に及ぼす影響はよく分かっていないため，CSH の溶解に伴う諸現象の把握も目指す。

参考文献

1) 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.51-59，2000.1
2) 嶋毅，佐伯竜彦，長瀧重義：コンクリート中の物質移動に対する LBM の適用への基礎的検討，コンクリート工学年次論文報告集，Vol23，No.2，pp.817-822，2001
3) 蔦原道久，高田尚樹，片岡武：格子気体法・格子ボルツマン法，コロナ社
4) Berner,U.R.: Modelling Porewater Chemistry in Hydrated Portland Cement, Mat. Res. Soc. Symp. Proc, Vol.84, pp.319-330,1987
5) 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
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
7) 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

NII-Electronic Library Service