

投稿論文(和文ノート)

**TECHNICAL
NOTE**

Fick の拡散方程式の係数の同定

松島 学¹・松井邦人²・関 博³・堤 知明⁴

¹正会員 工博 東電設計(株) 技術開発本部耐震技術部課長 (〒110 台東区東上野 3-3-3)

²正会員 Ph.D. Visiting Professor, University of IOWA, College of Engineering (Iowa City IOWA 52246 USA)

³正会員 工博 早稲田大学教授 理工学部土木工学科 (〒169 新宿区大久保 3-4-1)

⁴正会員 工修 東京電力(株) 電力技術研究所構造研究室主任研究員 (〒182 調布市西つつじが丘 2-4-1)

本論文は、塩分の浸透を一次元拡散方程式で表されると仮定したときに、 t 年経過したコンクリート構造物で、現場で採取された試料の分析結果である深さ方向の塩化物イオン量の実測データから近似計算された一次元拡散方程式の係数値、表面塩化物イオン量 C_0 、等価拡散係数 D_c を同定する手法を提案したものである。提案した逆解析手法は、Gauss-Newton法を用いている。

Key Words: Fick's diffusion equation, inverse analysis, Gauss-Newton method

1. はじめに

海水中には、塩化物イオンをはじめ数多くの種類のイオンが存在しているが¹⁾、コンクリート中に深く浸透するのは塩化物イオンのみと言われている。塩害による鉄筋コンクリート部材の劣化は、塩化物の浸透による鉄筋の不動態被膜の破壊が発端と考えられる。コンクリート表面から浸透しコンクリート中に浸透蓄積する塩化物は、固体空隙溶液中のイオンの拡散、乾湿による移動、細孔中の毛管現象、塩化物イオンの一部のセメント水和物との反応による固定化、コンクリートの炭酸化による塩化物イオンの移動など総合した要因により生じる^{2), 3)}。現在、この種の現象をすべて理論的に、解析的に表現するには至っていないため、そのため実用的にはマクロ的に従来からFickの一次元拡散方程式⁴⁾で表せるものと仮定されている。図-1にFickの一次元拡散方程式で求められた計算値と実測値の関係を表す。同図に見られるように、比較的よく実際の挙動を説明しており、実用的には問題がないとされている。

本研究は、実測された塩化物イオン量の深さ方向の値から、この式の係数値を同定する数値解析手法を提案するものである。既に、筆者らは逆解析手法を土木工学に應用しており、本研究はその手法を應用したものである^{5), 6), 7)}。これらの係数値を求める今までの方法では、対数グラフ上に各深さ方向の塩化物イオン量をプロットし、その傾きから拡散係数を求めており

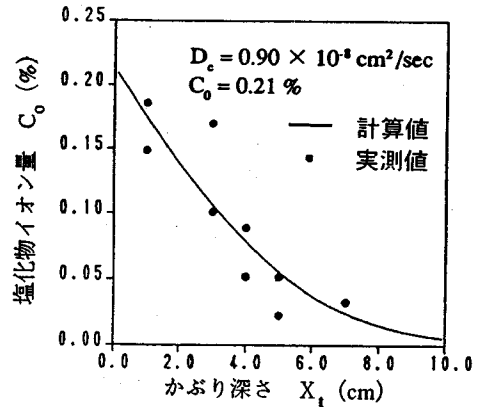


図-1 実測値と計算値の比較

個人誤差が避けられないものとなっている⁸⁾とともに手間が大きい。また、自動化の方法として、データの対数を取り、そのデータを直線回帰する方法も考えられているが、対数を取ったことでデータに勝手に重みを考えたことになり本来の回帰にはなっていない。

2. 同定手法

Fickの一次元拡散方程式は、式(1)の微分方程式で表される。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_c \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} \quad (1)$$

この一次元拡散方程式の解は、式(2)で求められる。

$$C(X_i, t) = C_0 \left(1.0 - \operatorname{erf} \left(\frac{t_x}{2\sqrt{D_c \cdot t}} \right) \right) \quad (2)$$

ここで、 D_c, C_0, t_x, t は拡散係数、表面塩化物イオン量、コンクリート表面からの位置および経過時間である。 $\operatorname{erf}(\cdot)$ はGauss誤差関数であり、式(3)で表される。

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (3)$$

式(3)の実際の計算は、文献(8)に示してある式(4)の近似式を利用した⁹⁾。

$$1 - \operatorname{erf}(x) = 1 / (1 + \alpha_1 \cdot x + \alpha_2 \cdot x^2 + \alpha_3 \cdot x^3 + \alpha_4 \cdot x^4)^4 \quad (4)$$

$$\alpha_1 = 0.278393$$

$$\alpha_2 = 0.230389$$

$$\alpha_3 = 0.000972$$

$$\alpha_4 = 0.078108$$

本研究は、経過時間 t は既知であるとし、実測された深さ方向の塩化物イオン量のデータセット $\{t_x, C\}$ の値より拡散方程式のパラメータ D_c, C_0 を同定しようとするものである。モデルの深さ方向での塩化物イオン量の測定点 t_j (j : 実測値の番号) における実測値を v_j 、計算値を u_j 、測定誤差を ϵ_j とし、測定誤差を介して計算値と実測値が一致すると仮定すると、式(5)の関係が成立する。

$$v_j = u_j + \epsilon_j \quad (5)$$

拡散方程式の未知パラメータを $\{D_c, C_0\}$ とすると、 $x = \{D_c, C_0\}^T$ であり、 $u(x)$ は $\{D_c, C_0\}$ の関数とすると、評価関数 J は式(6)のように定義される。

$$J = \frac{1}{2} \int_{x_i} (v - u(x))^2 dt_x \quad (6)$$

ここで、 $J = \int_{x_i} (\cdot) dt_x$ は、実測された深さ方向の塩化物イオン量のデータセット $\{t, C\}$ の値を実測した最大深さ x_i まで積分することを意味している。次に、式(6)の評価関数 J の値を最小にするように未知パラメータ $x = \{D_c, C_0\}^T$ を決定する。 $u(x)$ を x の推定値で Taylor 展開すると、式(7)が得られる。

$$J = \frac{1}{2} \int_{x_i} \left(v - u - \frac{\partial u}{\partial D_c} \cdot \delta D_c - \frac{\partial u}{\partial C_0} \cdot \delta C_0 \right)^2 dt_x \quad (7)$$

次に、式(7)が Gauss Newton 法により最小になるための必要条件 $\partial J / \partial X_i = 0$ ($i=1 \sim 2$) から式(8)が求められる。

$$A \cdot \Delta X = B \quad (8)$$

ここで、

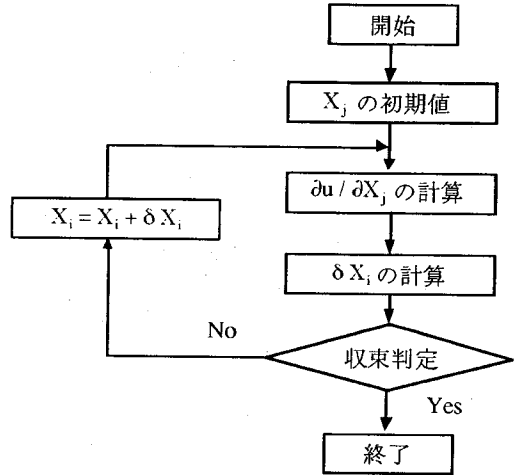


図-2 本同定手法

$$\Delta X = \{ \delta D_c, \delta C_0 \}^T$$

$$A = \begin{bmatrix} \int_{x_i} \left(\frac{\partial u}{\partial D_c} \right)^2 dt_x & \int_{x_i} \frac{\partial u}{\partial D_c} \frac{\partial u}{\partial C_0} dt_x \\ \int_{x_i} \frac{\partial u}{\partial D_c} \frac{\partial u}{\partial C_0} dt_x & \int_{x_i} \left(\frac{\partial u}{\partial C_0} \right)^2 dt_x \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} \int_{x_i} (u - v) \frac{\partial u}{\partial D_c} dt_x \\ \int_{x_i} (u - v) \frac{\partial u}{\partial C_0} dt_x \end{bmatrix}$$

式(8)は δX_i に関する連立方程式である。 u の同定パラメータに関する偏微分係数は動的感度であり、式(2)を X_i で偏微分し、数値積分により求められる。式(8)を δX_i について解き、 $X_i = X_i + \delta X_i$ として繰り返し計算を行うことにより、 X_i の最適推定値を求めることになる。図-2に本同定手法の解析フローを示す。

3. 計算例

次に、2.で説明した手法を用いた計算例を示す。計算にあたり問題となるのは初期値である。本手法では、 C_0 の初期値は実測された最も浅い位置での塩化物イオン量と仮定した。また、 D_c は、初期値を一般的な拡散係数の取りうる $10^{-8} \sim 10^{-9} \text{ cm}^2 / \text{sec}$ の範囲の10個のデータを用意し、この初期値で得られた推定値の

表-1 実測データ

No.	深さ t_x (cm)	塩化物イオン量 C (kg/m ³)
1	1.0	6.40
2	3.0	6.30
3	5.0	3.57
4	7.0	1.79
5	9.0	0.60

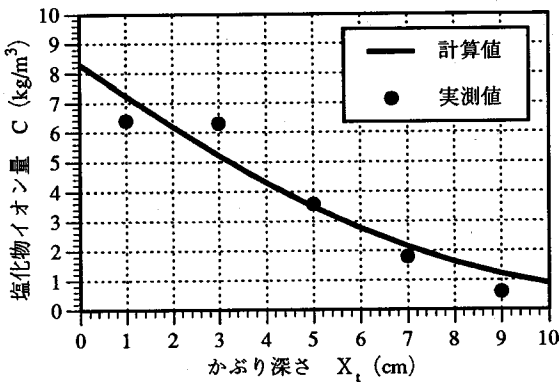


図-3 収束した推定値と実測値の比較

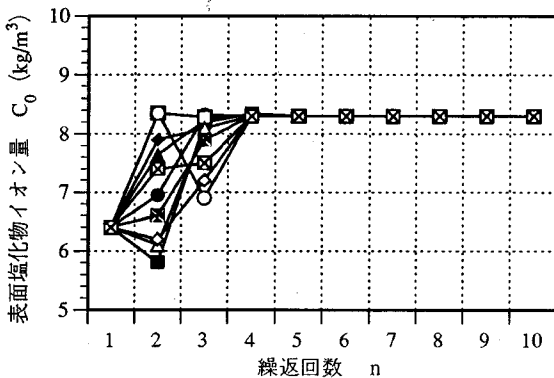


図-4. a 収束過程 (表面塩化物イオン量 C_0)

内、誤差が最小のものを最適推定値として選択した。計算に利用された実測データを表-1に示す。得られた実測データ数は全5個で、経過年数は32年である。

図-3に収束結果と実測値の関係を示す。同図に見られるように本システムの近似解法は良好な計算結果を示している。初期値の違いによる収束状況を図-

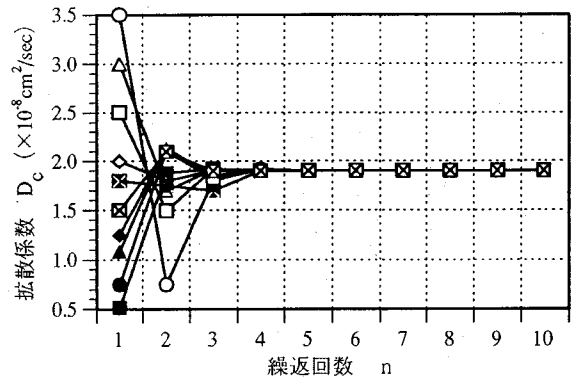


図-4. b 収束過程 (拡散係数 D_c)

4. aに表面塩化物イオン量を、図-4. bに拡散係数についての収束過程の結果を示す。どの初期値を設定しても収束値は同じ値を取り、始めに初期値により収束値が局所的な最小値に落ちつき、真の最小値に収束しない場合があることの危惧は心配する必要がなかった。また、収束までの計算回数は3~4回程度で安定している。計算時間は、数値演算プロセッサ付きのNEC-PC9801DAで、F77L (FORTRAN) のコンパイラを利用して、3.0sec程度である。

4. まとめ

本研究は、塩化物イオン浸透が一次元の拡散方程式で近似できる場合に、その拡散係数及び表面塩化物イオン量を求めるための数値解析手法を提案したものである。得られた深さ方向の塩化物イオン量から拡散係数および表面塩化物イオン量を人間の経験的に行ってきたものを本方法によれば数値解析による逆算で求めることができる。

謝 辞:本研究を行うにあたり、奥村敏恵 東京大学名誉教授から、常に適切な助言をいただきました。ここに深く感謝の意を表す次第である。

参考文献

- 1) 森好生, 野木孝次: コンクリートの耐海水性に関する研究-材令10年試験結果報告-, セメントコンクリート N0.417, 1981.
- 2) 小林一輔, 白木亮司, 河合研司: 炭酸化によって引き起こされるコンクリート中の塩化物, 硫酸塩化物及びアルカリ化合物の移動と濃縮, コンクリート工学論文集, 第1巻第2号, 1990.7.
- 3) 小林一輔, 宇野祐一: コンクリートの炭酸化のメカニズ

- ム, コンクリート工学論文集, 第1巻第2号, 1990.7.
- 4) John Crank : *The Mathematics of Diffusion*, Oxford Univ. Press, 1956
- 5) 松島学, 松井邦人, 大滝普: 実測データに基づく基礎地盤系構造物の振動特性の同定, 土木学会論文集, No.465, I - 23, pp.127-136, 1993.4.
- 6) Matsui, K. and Kurita, T. : Sensitivities of Parameters due to Model Error and Measurement Noises in Structural Identification Problems, *Struct Eng./Earthquake Eng.*, Vol.7, No.2, 263s-272s October 1990
- 7) 栗田哲史, 松井邦人, 松島学: 構造同定における on-line 法の比較, システム最適化に関するシンポジウム講演論文集, pp.93~98, 1989年11月
- 8) 永野広雄: 塩分汚染コンクリート構造物の診断手法の提案, 大成建設技術研究所報, 第19号, pp.41~48, 1989
- 9) 数学公式・数表ハンドブック, スピーゲル著, 氏家勝巳訳, マグロウヒル社, p.183, 1984
- (1994. 2. 15 受付)

INVERSE ANALYSIS OF COEFFICIENTS C_0 AND D_0 ON FICK'S DIFFUSION EQUATION

Manabu MATSUSHIMA, Kunihiro MATSUI, Hiroshi SEKI
and Tomoaki TSUTSUMI

Deterioration of reinforced concrete under chloride ion atmosphere is presented by penetration of chloride ion. Penetration of chloride ion is explained by Fick's diffusion equation. The constant parameters on Fick's diffusion equation are diffusion coefficient D_0 and surface chloride ion density C_0 .

The parameters on Fick's equation are estimated by structural identification techniques based on Gauss-Newton method by using the recorded chloride ion density of existing structures.