

コンクリート材料劣化予測に向けたイオン拡散解析に関する基礎研究

九州大学	学生会員	○渡邊 茜
九州大学大学院	正会員	浅井 光輝
九州大学大学院	正会員	園田 佳巨

1. 目的

コンクリート構造物の経年劣化の要因は、中性化・アルカリシリカ反応・塩害等様々である。その多くは力学的要因と化学的要因が複雑に連成しており、劣化メカニズムを詳細に把握したうえで合理的な対策することは非常に困難である。そこで、コンクリート内部での物質の浸透・拡散現象と同時に亀裂、はく離等の損傷現象を再現可能なシミュレータの開発を目指す。本研究では、その準備段階として非定常拡散問題の有限要素法を用いて物質の浸透・拡散解析について基礎検討を行った。

2. 定常型拡散方程式

まず、定常状態の拡散方程式の導出を行う。定常型拡散方程式の有限要素式を導出するためには、偏微分方程式を積分形の弱形式に変換する必要がある。微分方程式の弱形式は、支配方程式と境界条件を合わせた強形式と同値である。拡散に対する支配方程式として式(1)で表わされる連続方程式と式(2)で表わされるフイックの法則を用いる。

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} - s = 0 \quad (1)$$

$$\mathbf{J} = -D \nabla c \quad (2)$$

ここで c は濃度、 J は濃度流束、 s は物質の発生速度、 D は拡散係数である。また、境界条件は境界上のどの点においても濃度か法線方向の流束のいずれか一方のみを規定しなければならない。

濃度規定の境界を Γ_c 、流束規定の境界を Γ_J とし、濃度規定の境界条件を式(3)、流束規定の境界条件を式(4)のように定義する。

$$c(x, y) = \bar{c} \quad (\Gamma_c \text{ 上}) \quad (3)$$

$$J_n = \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = \bar{J} \quad (\Gamma_J \text{ 上}) \quad (4)$$

以上の境界値問題に関する（強形式の）支配方程式に対して重み付き残差法を適用すれば、次式に示す積分型の（弱形式の）支配方程式が得られる。

$$\int (\nabla w)^T K \nabla c d\Omega = \int_{\Omega} w \left(\frac{\partial c}{\partial t} \right) d\Omega + \int_{\Gamma_J} w \bar{J} d\Gamma - \int_{\Omega} w s d\Omega \quad (5)$$

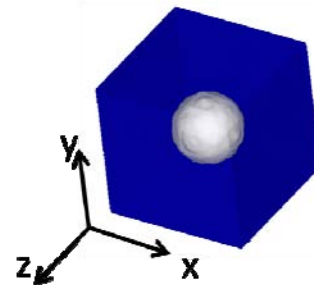
以下では、式(5)を有限要素近似し、各節点でのイオン濃度を求めるものとする。たとえば、濃度分布が定常になったときには、時間部分項が消去した以下の定常拡散方程式を得る。

$$\mathbf{Kc} = \mathbf{f} \quad (6)$$

非定常拡散方程式を解くには、後述する時間微分項の近似方法、および時間積分法について別途議論する必要がある。

3. 定常型拡散方程式の解析例

導出した定常型拡散方程式の検証例題として、図-1に示す単一球形内在物モデルについて拡散解析を行う。



Size: x=40 (mm), y=40 (mm), z=40 (mm)
1ボクセル=1mm³
(64000 elements)
内在物のサイズ: R=8 (mm)
拡散係数
Material number 1 (青): K=1.0 m²/sec
2 (白): K=1.0 × 10⁻² m²/sec

図-1 解析モデル

境界条件として $x=1$ の yz 平面には濃度を与えず、 $x=40$ の yz 平面には試料の濃度 2 mol/m³ を与える。それ以外の領域には濃度 1 mol/m³ を与えた状態で解析を行う。

解析結果として図-2に $z=20$ の xy 平面の濃度コンター図を示す。球形の内在物を避けるように物質が拡散していることが分かる。

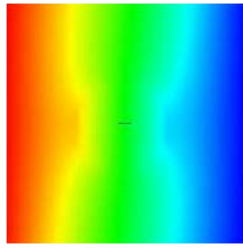


図-2 定常型拡散解析結果

4. 非定常型拡散方程式

定常型の拡散方程式の解析例を示したが、ほぼすべての現象は時間とともに変化する非定常型の現象であり、コンクリート内の物質の浸透・拡散においても例外ではない。そこで、非定常型の拡散方程式についての有限要素方程式の導出を行う。拡散方程式の弱形式である式(5)の時間項を残したまま離散化を行うと式(7)が得られる。

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{c}} + \mathbf{K}\mathbf{c} = \mathbf{f} \quad (7)$$

ここで $\mathbf{M} = \mathbf{N}^T \mathbf{N}$ である。ここで濃度の時間微分項について時間積分法を用いる。時間積分法には様々な手法がある。本研究では後退オイラー法とクランク-ニコルソン法を用いて解析を行い、それぞれの手法によって得られた結果を比較し、どちらが非定常拡散方程式の解析に適しているか検討した。

4.1 後退オイラー法

まずは後退オイラー法による数値積分法を整理する。この方法は、時間積分の精度はあまり期待できないが、数値不安定を起こすことがない。濃度の時間微分を差分近似すると式(8)となる。

$$\dot{\mathbf{c}}_{n+1} = \frac{\mathbf{c}_{n+1} - \mathbf{c}_n}{\Delta t} \quad (8)$$

式(8)を式(7)に代入し、式(9)を得る。

$$\mathbf{c}_{n+1} = (\mathbf{M} + \Delta t \mathbf{K})^{-1} (\Delta t \mathbf{f} + \mathbf{M} \mathbf{c}_n) \quad (9)$$

4.2 クランク-ニコルソン法

次に時間微分項の近似に次式に示す中心差分を用いることを考える。

$$\dot{\mathbf{c}}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{c}_{n+1} - \mathbf{c}_n}{\Delta t} \quad (10)$$

$$\mathbf{c}_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{c}_{n+1} + \mathbf{c}_n}{2} \quad (11)$$

これらの式を式(7)に代入し、式(12)となる。

$$\mathbf{c}_{n+1} = (2\mathbf{M} + \Delta t \mathbf{K})^{-1} \{2\Delta t \mathbf{f} + (2\mathbf{M} - \Delta t \mathbf{K}) \mathbf{c}_n\} \quad (12)$$

この時間積分法はクランク-ニコルソン法と知られている。後退オイラー法と比較すると、係数行列と右辺項を僅かに変更するだけであり、同程度の負荷で計算でき、より高精度な積分法として知られている。

5. 非定常型拡散方程式の解析例

定常解析と同様のモデル・条件において非定常解析を行う。後退オイラー法を用いた解析結果を図-3に、クランクニコルソン法を用いた解析結果を図-4に示す。

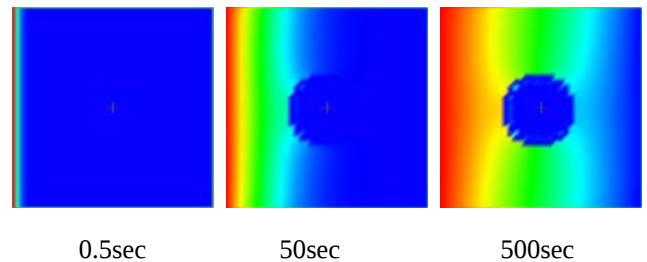


図-3 後退オイラー法解析結果

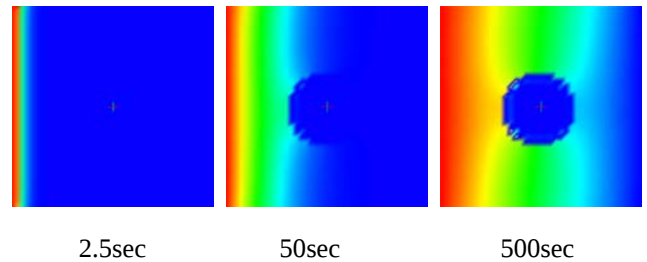


図-3 クランク-ニコルソン法解析結果

図-3、図-4には、両時間積分法を用いたときのイオン分布の時間変化の計算結果を示す。いずれの解析結果も500sec程度経過したときに、図-2に示した定常状態の解に漸近していった。ちなみに、後退オイラー法では時間刻みを1.0秒より大きくすると異なる定常解に漸近してしまうことを確認した。一方、クランク-ニコルソン法によれば時間刻みを2.5秒程度まで大きくしても定常解とほぼ同等な結果に漸近していった。これは、後退オイラー法は2次精度であるのに対し、クランク-ニコルソン法は3次精度であるためであると考えられる。

5. 結論

本研究では、コンクリート材料中のイオン拡散現象を予測するために、非定常拡散問題の数値解析法の精度を確認した。具体的には、後退オイラー法とクランク-ニコルソン法を用いた有限要素法による結果を比較・検証した。理論通り、クランク-ニコルソン法の方が大きな時間刻みを用いても妥当な解が得られることを確認した。今後は、反応-膨張に伴う材料劣化の数値解析法へと発展させる予定である。