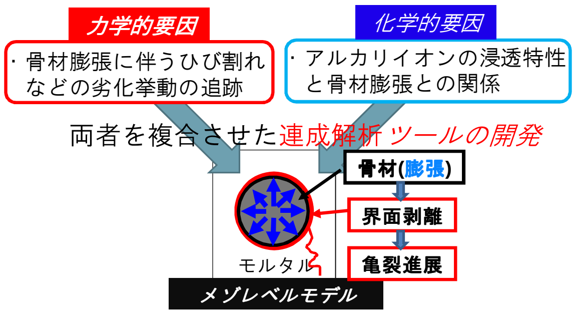
ASR 破壊メカニズム解明に向けたイオン拡散・反応膨張・亀裂進展の統合解析

浅井光輝[1]、渡邊茜[2]
1 博士（工） 九州大学大学院准教授 工学研究院社会基盤部門
2 九州大学大学院修士課程 工学府建設システム工学専攻

本研究では，アルカリ骨材反応によるコンクリートの損傷過程であるイオン拡散現象から亀裂進展までを統合して解析する新たな解析技術を提案する．まずは拡散現象を予測し，次に骨材に膨張ひずみを与えることで局所的な変形を与え，モルタル部まで亀裂が進展していくまでの ASR 損傷の全行程を統合した解析を行う．

1．はじめに

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．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（図－1 を参照）の開発を目指す．本研究では，まず非定常拡散解析における時間積分法について精度検証を行った．その後，内在物膨張に伴う不連続面進展解析と組み合わせ，連成解析シミュレータの開発を行った．また，微細な領域における不連続面進展のモデル化として損傷モデルの導入を検討した．



図－1 連成解析ツールイメージ図

2. イオン拡散解析

まず，拡散方程式の導出を行う．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[1)]. 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)で表わされるフィックの法則を用いる．

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

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

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．

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

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

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．

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

次に，式(5)を有限要素近似し，各節点でのイオン濃度cを求めるものとする. 式(5)の離散化を行うと式(6)が得られる．

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{c}} + \mathbf{K}\mathbf{c} = \mathbf{f} \qquad (6)$$

ここで$\mathbf{M} = \int \mathbf{N}^T\mathbf{N}dx$である．また，この式から時間微分項を消去すると定常型拡散解析で解く式が得られる．

$$\mathbf{Kc}=\mathbf{f} \tag{7}$$

非定常拡散解析では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，クランク−ニコルソン法，後退オイラー法，2次ルンゲ−クッタ法を用いた際の結果を比較・検討することで，非定常拡散解析に適した時間積分法の選別を試みた[2)].

(1) クランク - ニコルソン法

濃度の時間微分項を中央差分により近似すれば，次の時間ステップにおける濃度は次式により求められる．

$$\mathbf{c}_{n+1}=(2\mathbf{M}+\Delta t\mathbf{K})^{-1}\{2\Delta t\mathbf{f}+(2\mathbf{M}-\Delta t\mathbf{K})\mathbf{c}_n\} \tag{8}$$

この時間積分法はクランク－ニコルソン法と呼ばれるものである．比較的高精度な積分法であるが，数値的振動が減衰しにくいという欠点をもつと指摘されている．

(2) 後退オイラー法

次に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，前者と比べて数学的には時間積分の精度はあまり期待できないが，数値不安定を起こさないといった特徴がある．濃度の時間微分を後退差分により近似すれば，次の時間ステップでの濃度は次式により求められる．

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

(3) 2次ルンゲ - クッタ法

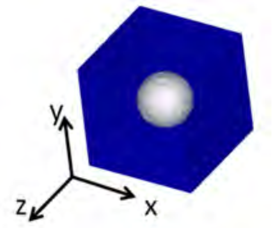
一般的に，ルンゲ−クッタ法による時間積分法は，計算精度は良いが計算量が多く，計算に時間がかかるとされている． 2 次ルンゲ−クッタ公式に従い時間積分を行えば，最終的に解く式は次のようになる．

$$\mathbf{c}_{n+1}=\mathbf{M}^{-1}\{(\mathbf{M}-\Delta t\mathbf{K}+\frac{\Delta t^2}{2}\mathbf{K}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{K})\mathbf{C}_n+(\Delta t\mathbf{I}-\frac{\Delta t^2}{2}\mathbf{K}\mathbf{M}^{-1})\mathbf{f}_n\} \tag{10}$$

各時間ステップにおいて，**M** 行列を係数行列とした連立一次方程式を 3 度解く必要があるが，**M** 行列を対角化すれば計算負荷を軽くできる（構造解析の陽解法に相当）．本研究では，**M** 行列の対角化を行う場合と行わない場合の両方について検証を行った．

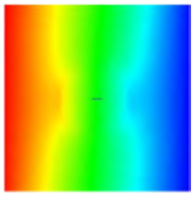
3.　拡散問題における時間積分法の精度検証

各時間積分法の精度検証として，**図−2**に示すモデルについて拡散解析を行う．解析モデルは，一辺40mm立方体の中心に半径8mmの球形内在物を挿入したものである．要素は1辺1mmのボクセル要素であり，総要素数は64,000要素である．解析条件として，暫定的にモルタル，内在物の拡散係数をそれぞれ$1.0\,\mathrm{m^2/sec}$，$1.0\times10^{-4}\,\mathrm{m^2/sec}$ とし，時間刻みは0.5 sec と設定した．境界条件として，yz平面(x=1)から濃度$1.0\,\mathrm{g/m^3}$のアルカリイオンを与え続けるものとし，イオン濃度の時間変化を評価した．



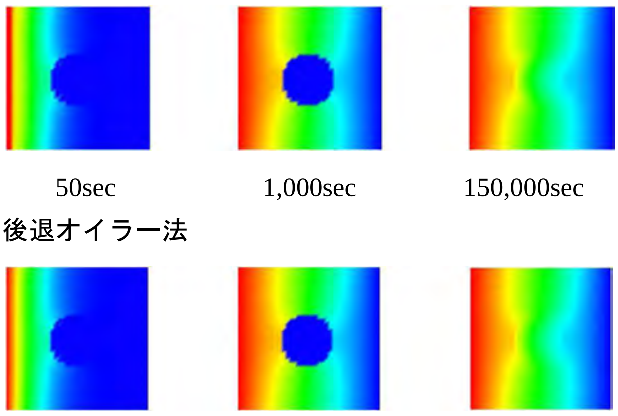
図−2　単一球形骨材モデル

まず，定常型拡散解析により得られた結果としてz=20のxy平面の濃度コンター図を**図－3**に示す．球形の骨材を避けるように物質が拡散していることが分かる．



図－3　定常型拡散解析結果

次に，非定常型拡散解析により得られた結果をまとめる．後退オイラー法，クランク－ニコルソン法を用いた場合の濃度分布の時間変化を**図－4**に示す．



クランク－ニコルソン法

50sec　1,000sec　150,000sec

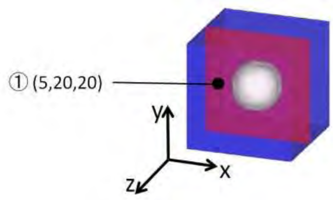
後退オイラー法

50sec　1,000sec　150,000sec

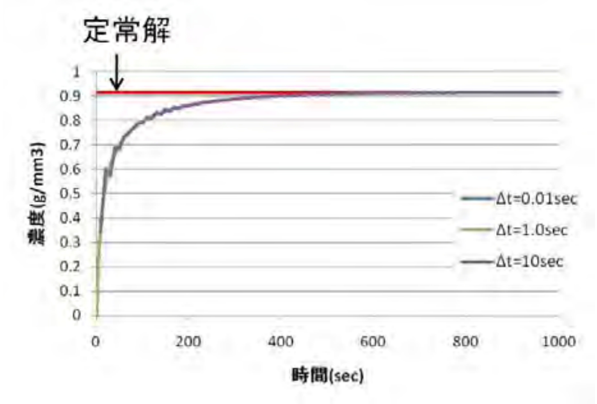
図－4 クランク－ニコルソン法，後退オイラー法 非定常拡散解析結果

クランク-ニコルソン法と後退オイラー法では有意な差は見られず，はじめに内在物を避けてアルカリイオンが拡散し，時間差が生じて段階的に内在物にも浸透していく様子が表現できた．

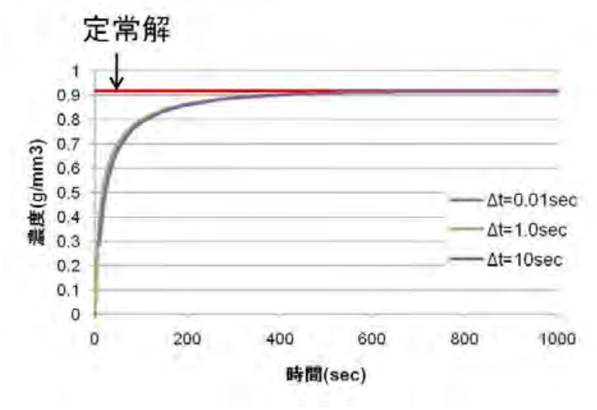
図－5には濃度進展の時間変化を検証するために設定した節点①の座標値を示している．図－6では，節点①における濃度値の時間変化について結果を比較する．



図－5 節点①



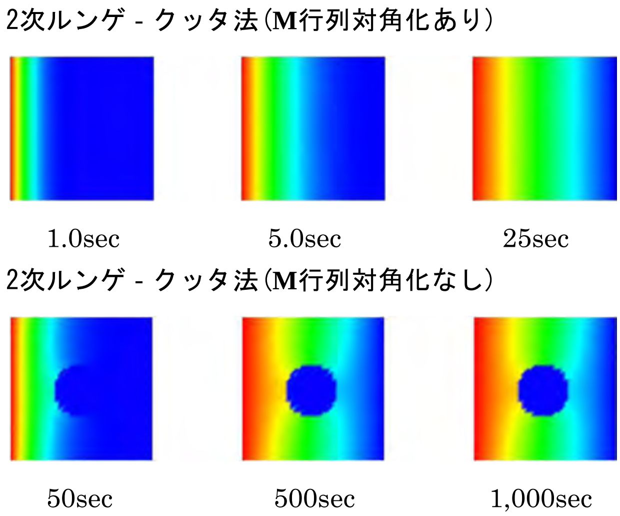
クランク－ニコルソン法



後退オイラー法

図－6 節点①の濃度変化

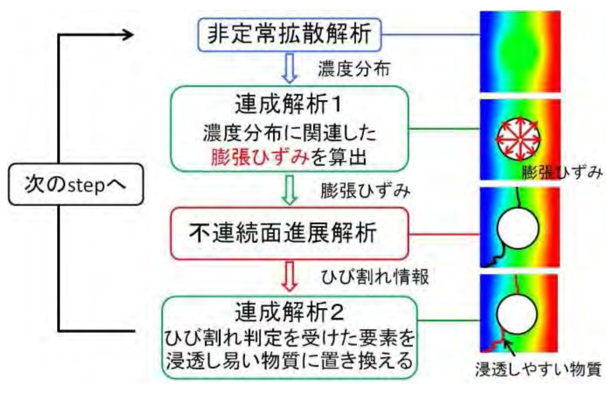
図－6のように，クランク－ニコルソン法を用いた場合，時間刻みを大きくすると数値振動が発生することが確認された．また，2次のルンゲ－クッタ法を用いた場合の濃度分布の時間変化を図－7に示す．2次のルンゲ-クッタ法のみ，時間刻みを0.5secとすると解が発散したため，時間刻みを0.01secとした．ルンゲ-クッタ法では**M**行列の対角化を行うと材料の非均質性の識別が困難となり，内在物までほぼ同時にイオンが拡散してしまい，最終的に定常解には収束しなかった．**M**行列の対角化を行わなければ，非均質性の識別は可能であり，定常解に収束することを確認したが，他の2つの時間積分法と比較すると倍以上の計算時間がかかる．以上の考察より，非定常拡散問題の時間積分法としては後退オイラー法を選択する方針とした．



図－7　非定常拡散解析結果

4. 拡散・膨張・不連続面進展の連成解析手法

非定常拡散解析の時間積分法に後退オイラー法を用い，内在物膨張に伴う不連続面進展解析と組み合わせ，連成解析手法の構築を行う．コンクリートのアルカリ骨材反応を想定した連成解析の手順を図－8 に示す．



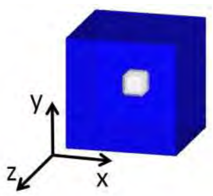
図－8　連成解析手順

まず，非定常拡散問題を解き拡散物質の空間分布を予測する．そして，濃度の空間分布の結果を基に膨張力を決定する．この際，膨張力によって引張り応力が基準値を超え不連続面と判定される領域（要素）は，拡散係数の高い仮想空隙領域に置換し，再び拡散問題を解く．以上の手順を繰り返すことで，浸透・拡散に伴う不連続面進展解析を実施する．

5.　連成解析手法の解析例

(1)　単一立方体内在モデル

図－7 に示すような解析フローを持つ連成シミュレータによって図－9 に示す単純なモデルで連成解析を行い，その精度を検証する．



	引張強度 (MPa)	弾性定数 (MPa)	ポアソン比	拡散係数 (mm^2/sec)
モルタル	70	20000	0.25	1.0
界面	15	-	-	1.0
骨材	-	60000	0.25	1.0×10^{-4}

図-9　立方体内在モデル

このモデルは，40mm 立方のモルタル内中央に 8mm 立方の内在物を挿入したモデル(64,000 要素)である．解析条件として，暫定的にモルタル，骨材の拡散係数をそれぞれ $1.0m^2/sec$，$1.0\times10^{-4}m^2/sec$ とし，時間刻みは 0.5 sec と設定した．境界条件としては，*yz* 平面以外，全面の変位を拘束し，非拘束面である *yz* 平面から拡散物質を浸透させるものとする．濃度分布と最大主応力図，不連続面進展挙動を図-10 に示す．拡散物質が骨材に到達すると骨材に膨張力が発生し，界面からひび割れが発生していることが確認できる．しかし，骨材周辺で同心円状にひび割れが進展しており，非現実的な空隙が発生する結果となった．また，ひび割れと判定された要素の拡散係数を大きくすることで急速な拡散の表現を試みたが，期待する結果は得られなかった．

濃度分布

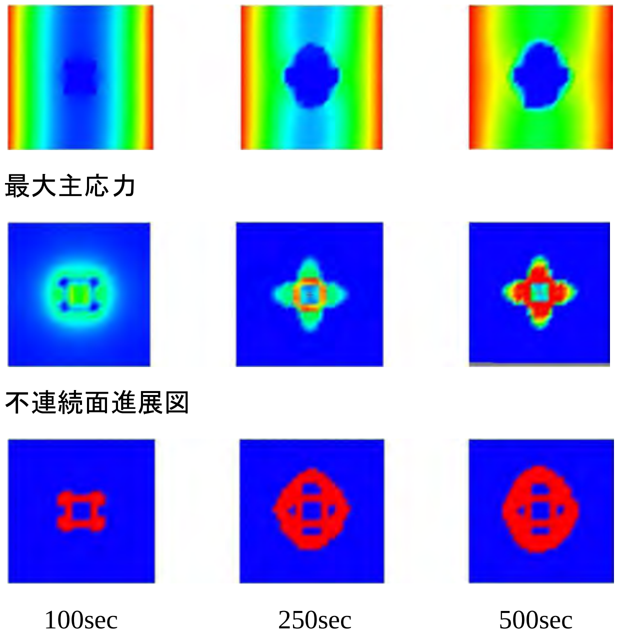


図-10　立方体内在モデル連成解析結果

図－10 の最大主応力図及び不連続面進展図から，空隙となった部分に応力が発生していることが分かる．そこで，連成解析プログラムを確認したところ，ひび割れと判定を受けた要素に対しても膨張ひずみ，剛性を与えていたことが判明した．そこで，ひび割れと判定を受けた要素に対しては膨張ひずみ，剛性ともに 0 となるように変更した．このような変更を行った連成解析プログラムによる解析結果を図－11 に示す．

濃度分布

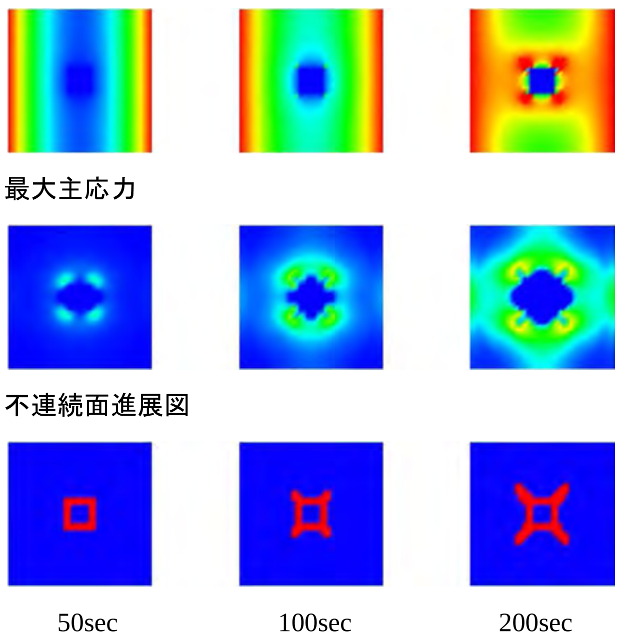
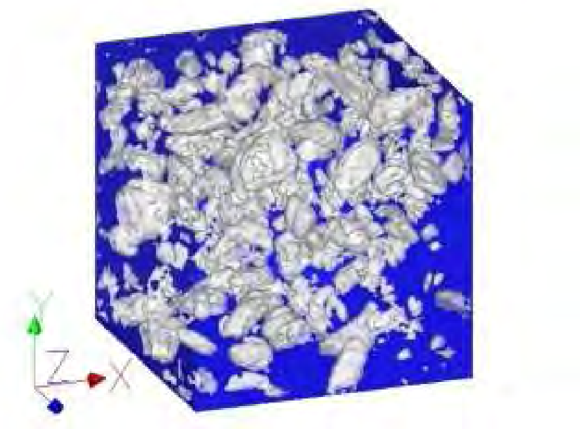


図-11　立方体内在モデル連成解析結果(改良後)

プログラム変更前と同様に拡散物質が骨材に達すると骨材に膨張力が発生し，界面からひび割れが発生していることが確認できる．また，ひび割れが骨材の角から放射状に進展しており，プログラムの変更前と比較すると現実的な結果が得られた．また，空隙部分の濃度が高くなることも表現可能であることが確認できた．

(2) 3 次元コンクリートモデル

図-12 に示すコンクリートモデルを用いて連成解析を行う．このモデルは，100mm 立方の実際のコンクリートを研磨し，断面をスキャンした画像から作成したモデル(100 万要素)である． 解析条件は立方体内在モデルと同様とし，境界条件は yz 平面以外，全面の変位を拘束し，非拘束面である x=1 の yz 平面から拡散物質を浸透させるものとする．

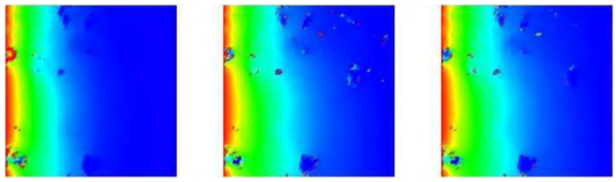


	引張強度 (MPa)	弾性定数 (MPa)	ポアソン比	拡散係数 (mm^2/sec)
モルタル	70	20000	0.25	1.0
界面	15	-	-	1.0
骨材	-	60000	0.25	1.0×10^{-4}

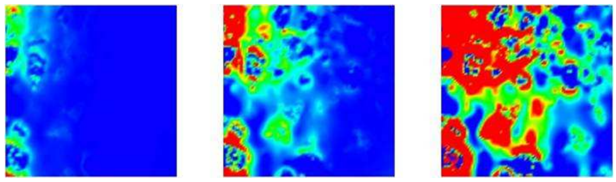
図-12　3 次元コンクリートモデル

濃度分布と最大主応力図，及び不連続面進展挙動をそれぞれ**図-13** に示す．コンクリートモデルでも，拡散物質が骨材に達すると，膨張力が発生し，界面からひび割れが生じていることが確認できる．

濃度分布



最大主応力



3次元不連続面進展図

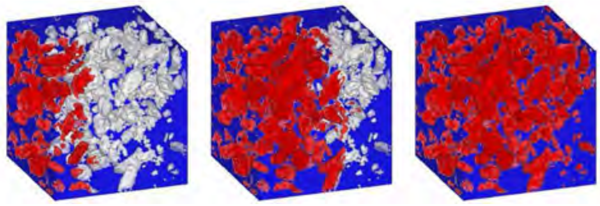


図-13　3次元コンクリートモデル連成解析結果

6. 損傷理論の導入（今後の方針）

連成解析では，ひび割れ判定を受けた要素については直ちに拡散係数の高い仮想空隙領域に置換した．今後，マイクロクラックが集積しマクロ的なひび割れとして成長するまでの過程をより現実的に表現するために，損傷モデルの導入を検討している．現時点では，以下にまとめるLemaitreの損傷理論を基にしたクラックの閉合効果を考慮した弾性損傷理論の導入を検討中である．

(1) Lemaitreによる損傷弾性理論

Lemaitreは損傷材料の変形挙動は，応力 σ を有効応力 $\tilde{\sigma}$ で置き換えて記述した非損傷材料の構成式で表現されるというひずみ等価性の仮説を適用し，損傷材料に対する材料構成則を以下のように規定した[3]．

$$\boldsymbol{\sigma} = (1-D)\mathbf{C}^e : \boldsymbol{\varepsilon}^e \tag{11}$$

ここで，C^eは一般的な等方弾性テンソルであり，Dはヤング係数の低減率で表される損傷変数である．無損傷状態のヤング係数をE_0，損傷後のヤング係数をEとするとDは次のように表される．

$$D = \frac{E_0 - E}{E_0} \tag{12}$$

また，有効応力テンソルは以下のように定義される．

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{1-D}\boldsymbol{\sigma} \tag{13}$$

⑵ クラックの閉合効果

コンクリートのような脆性損傷材料のき裂は、開いたときにだけ効果を持ち，完全に閉じるとその効果は現れず，圧縮応力によるクラック閉合の効果は無視できない．すなわち損傷の発達は，引張応力と圧縮応力とでは異なった様相を示す．そこで，応力を引張成分と圧縮成分に分解する．以下に示すように主応力σ_iの行列を引張成分$\boldsymbol{\sigma}_+$と圧縮成分$\boldsymbol{\sigma}_-$に分解する．

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_+ + \boldsymbol{\sigma}_- \tag{14}$$

$$\begin{cases} [\boldsymbol{\sigma}] = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix} \\ [\boldsymbol{\sigma}_+] = \begin{bmatrix} \langle\sigma_1\rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle\sigma_2\rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle\sigma_3\rangle \end{bmatrix} \\ [\boldsymbol{\sigma}_-] = -\begin{bmatrix} \langle-\sigma_1\rangle & 0 & 0 \\ 0 & \langle-\sigma_2\rangle & 0 \\ 0 & 0 & \langle-\sigma_3\rangle \end{bmatrix} \end{cases} \tag{15}$$

ここで〈〉は任意のスカラー値aについて以下の式を満たすMacauleyの括弧である．

$$\langle a \rangle = \begin{cases} a & (a \geq 0) \\ 0 & (a < 0) \end{cases} \tag{16}$$

⑵ クラックの閉合効果を考慮した損傷弾性則

式(11)に示す応力－ひずみ関係の逆関係である式(17)を利用する．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\varepsilon} &= \frac{1}{1-D}\mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma} \\ &= \frac{1}{1-D}\left[\frac{1+\nu}{2E_0}\boldsymbol{\sigma} - \frac{\nu}{2E_0}(tr\boldsymbol{\sigma})\mathbf{I}\right] \end{aligned} \tag{17}$$

この式に引張/圧縮成分に分解した応力を代入する．損傷に対する圧縮応力の力学的効果は，引張応力の効果より小さいことが多い．これを表現するために，パラメータη ($0 \leq \eta \leq 1$)を導入し，損傷の効果は引張応力に対してはD，圧縮応力に対してはηDであると考える．すると式(12)は次のように書き換えられ，クラック閉合効果を考慮した損傷弾性則が得られる．

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1+\nu}{2E_0}\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}_+}{1-D} + \frac{\boldsymbol{\sigma}_-}{1-\eta D}\right) - \frac{\nu}{2E_0}\left(\frac{\langle tr\boldsymbol{\sigma}\rangle}{1-D} - \frac{\langle -tr\boldsymbol{\sigma}\rangle}{1-\eta D}\right)\mathbf{I} \tag{18}$$

7. 結論

本研究では，まず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．2次ルンゲ-クッタ法は時間増分によっては数値不安定性が生じるうえに，他の時間積分法と比較すると解析に多くの時間がかかることを確認した．また，クランク-ニコルソン法と後退オイラー法は解析結果に大きな差は見られなかったが，クランク-ニコルソン法では時間刻みを大きくすると数値解が振動する傾向にあった．以上の考察より，非定常拡散問題の時間積分法としては後退オイラー法を選択することにした．

また，非定常拡散解析と内在物膨張に伴う不連続面進展解析とを組み合わせ，連成解析手法の開発を試みた．両者を連成させる基本的なフローは完成し，内部膨張により不連続面が進展する様子を解析することができた．

今後はクラックの閉合効果を考慮した損傷弾性則を連成解析に導入することで，マイクロクラックが成長する過程までをより現実的に再現することを目指す．

参考文献

1) Jacob Fish, Ted Belytschko，山田貴博[監訳]：有限要素法 A First Course in Finite Elements，pp.78-80，丸善株式会社，2008.

2) 峯村吉泰：CとJavaで学ぶ数値シミュレーション入門，pp.156-160，森北出版株式会社，1999.

3) 村上澄男：連続体損傷力学，pp.128-131，森北出版株式会社，2008.