

論文 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

嶋 毅*1・佐伯竜彦*2・長瀧重義*3

要旨： 格子 Boltzmann 法 (LBM) を用いたコンクリート中の物質移動解析手法を開発を目的として、基礎的な検討を行った。コンクリートのような多孔質媒体を模擬するモデルを構築し、それを用いてコンクリート中の透気および拡散をシミュレートした。その結果、連続体力学では表現できないコンクリートの浸透性の局所的なはらつきを LBM を用いることによって容易に表現できることがわかった。LBM が、移動媒体としてのコンクリートの特性を評価するための最も有効な手法たり得ることを示すことができた。

キーワード： 格子 Boltzmann 法 (LBM), 熱流体格子 BGK モデル, 多孔質媒体, 空隙率

1. はじめに

移動媒体としてのコンクリートは、多孔質であるという特徴を持っている。したがって、系内には多くの不連続面が存在する。このような特徴を持つコンクリート中の物質移動現象に対して、連続体力学を適用する場合、拡散係数などの巨視的な移動係数が系の状態の関数となる。この関数は非常に複雑で、これを理論的に求めることは不可能である。系内に複数の不連続面を有する、多孔材料中の物質移動のような現象には、むしろ離散力学を適用すべきである。多孔質媒体中の流れや混相流等の複雑な流れの取り扱いが、離散力学では、連続体力学に比べて容易である。また、局所的な微視的相互作用に着目し、その集合体として巨視的現象をとらえることによって、多くの新たな知見が得られる可能性もある。このような局所的相互作用に基づく解析手法として、最近注目を集めているのが格子 Boltzmann 法 (以下 LBM) である。これは、流れと空間を離散化する方法で、複雑な流れの解析に対して非常に有効な結果をもたらしている。LBM はその特徴から、コンクリート中の物質移動現象の解析に適した手法といえる。そこで本研究では、LBM をコンクリート中の物質移動に適用するための基礎的な検討を行った。

2. 基礎理論

LBM では粒子間の相互作用が時間、空間および速度について完全に離散化される。本研究では、格子 BGK モデル¹⁾を利用して、コンクリート中の物質移動シミュレーションを試みた。まず、空間および速度の離散化について説明する。空間は、図-1 に示すような正三角形格子で離散化する。格子間距離を Δx 、時間刻みを Δt とすると、1 時間刻みに隣接格子点に移動する運動粒子の速度 c は、 $\Delta x/\Delta t$ である。正三角形格子の場合、粒子の移動方向が 6 方向なので、静止粒子を加えた 7 種類の粒子を考えることになる。熱を取り扱う場合には、複数の速度を考えなければならないので、 $c, 2c$ の 2 種類の速度を持つ運動粒子を考えると、図-2 に示すように 13 種類の粒子を用いることになる。

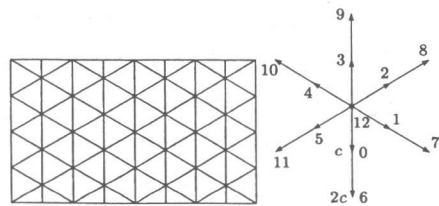


図-1 正三角形格子 図-2 2D13V モデル

*1 新潟大学大学院 自然科学研究科 環境管理科学専攻 (正会員)

*2 新潟大学助教授 工学部建設学科 工博 (正会員)

*3 新潟大学教授 工学部建設学科 工博 (正会員)

格子 BGK モデルの発展方程式は、以下のよう
に表すことができる。

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (1)$$

ここで、 f_i は分布関数であり、 \mathbf{c}_i は分布関数 f_i で表される粒子の並進速度、 τ は単一時間緩和係数と呼ばれる定数である。また、 f_i^{eq} は局所平衡分布関数であり、以下のように表すことができる。

$$f_{\sigma i}^{\text{eq}} = F_{\sigma} \rho \left[1 - 2B(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + 2B^2(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 + Bu^2 \right] \quad (2)$$

ここに、 ρ は密度で、 \mathbf{u} は流速である。質量保存則、運動量保存則およびエネルギー保存則から次式が成立する。

$$\rho = \sum_a f_a^{\text{eq}} \quad (3)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_a f_a^{\text{eq}} \mathbf{c}_a \quad (4)$$

$$\frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e = \sum_a \frac{1}{2} f_a^{\text{eq}} c_a^2 \quad (5)$$

式(10)の係数 F_{σ} および B は、式(3)-(5)より決定される。

3. 多孔質媒体のモデル化

本研究では、ある存在確率で正三角形格子上に正六角形を配置することで、多孔質媒体であるコンクリートを模擬することにした。このような方法でモデル化した媒体の一例を図-3に示す。なお、正六角形が存在確率を調整することは、コンクリートの空隙率を考慮することに相当する。

本研究では、透気試験を模擬することを目的とし、図-3に示すようなメディアを、薄いコンクリート片の一部として考えることにした。移動物質である気体は左端から流入し、右端から流出するものとした。左右境界上の格子番号をそれぞれ $0, n$ とし、それらの外側にそれぞれ格子番号 $-1, n+1$ なる仮定の格子点を考えた。こ

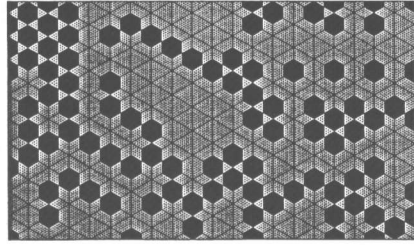


図-3 解析対象媒体の例

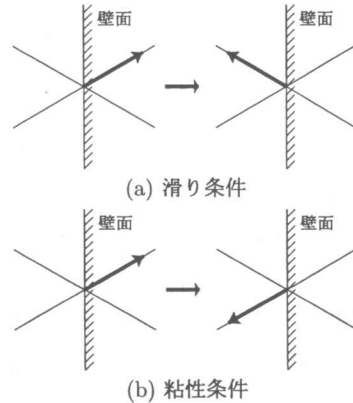


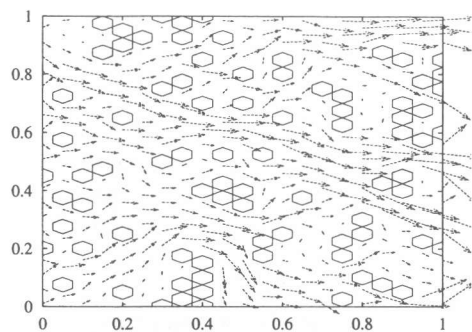
図-4 固体壁での跳ね返り条件

れらの仮定の格子点では、それぞれに一定の圧力値を与えた。また流速に関しては、境界上で流速勾配が0となるようにした。さらに内部エネルギーに関しては、両境界で同一の一定値を与えた。また上下端は、実際にはコンクリートが続くものとして、周期境界とした。セメント硬化体を模擬した正六角形との境界では、運動粒子は、図-4(a)に示すような滑り条件で跳ね返るものとした。

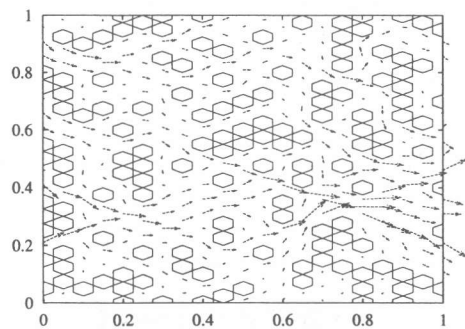
4. 透気への適用

透気性と空隙率の関係を模擬する目的で、正六角形が存在確率を変えてシミュレーションを行った。存在確率 r_p は、0.2, 0.3, 0.4 および 0.5 の4パターンとした。4つのパターンに共通する設定は、表-1に示す通りである。

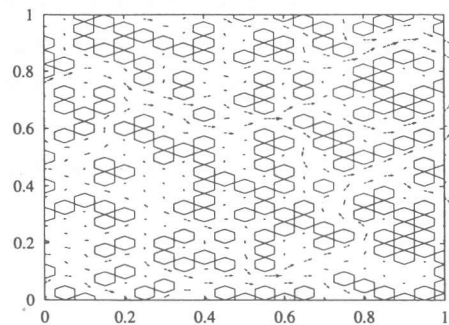
図-5にそれぞれの正六角形の分布と5000ステップ目における流速分布を示す。また、図-6に5000ステップ目のそれぞれの圧力分布を示す。図-5および図-6からわかるように、多孔質



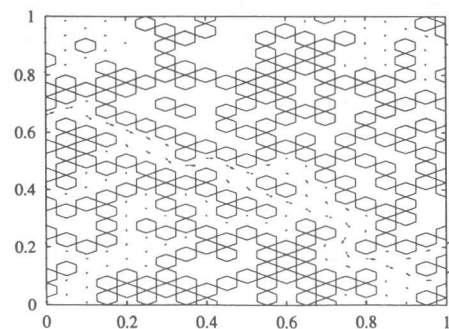
(a) 存在確率 $r_p = 0.2$



(b) 存在確率 $r_p = 0.3$



(c) 存在確率 $r_p = 0.4$

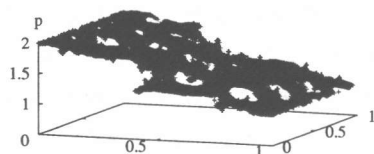


(d) 存在確率 $r_p = 0.5$

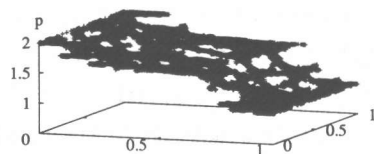
図-5 流速分布

表-1 計算に使用した各パラメータ

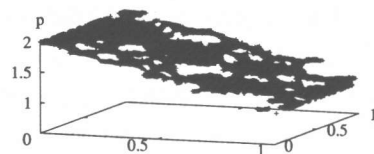
x 方向の格子点数	$n = 200$
y 方向の格子点数	$m = 200$
上流側 (高压側) の圧力	$P_i = 2.0$
下流側 (低压側) の圧力	$P_o = 1.0$
内部エネルギー	$e = 0.40$



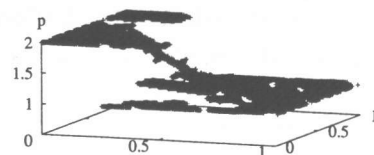
(a) 存在確率 $r_p = 0.2$



(b) 存在確率 $r_p = 0.3$



(c) 存在確率 $r_p = 0.4$



(d) 存在確率 $r_p = 0.5$

図-6 圧力分布

媒体中の流れの局所的なばらつきがよく表現できていることがわかる。LBM では、このような結果を得るために、場所ごとに輸送係数を与えるというような複雑な作業を必要としない。LBM は、コンクリートの局所的な特徴を極めて簡単に再現し得る可能性を秘めていることがわかる。

図-5 より、存在確率の小さいものほど、流速が大きいことがわかる。また、流路の幅が狭いほど流速が大きくなりやすい。図-5 と図-6 を比較すると、流路の幅が狭いところほど圧力損失が大きいことがわかる。また、流路の幅が広い場合でも、流速が大きければ、比較的圧力損失が大きくなることもわかる。流体の粘性の影響をよく再現できており、実現現象を再現できる可能性を示唆しているといえる。しかし、図-6 の圧力分布は、既往の研究で報告されているような放物線分布⁴⁾を再現できていない。これは、今回使用したモデルのメッシュが粗かったことが、ひとつの原因であると思われる。

図-7 に流出側の流速の時間変化を示す。図より、存在確率の小さいものほど流出側の流速が大きいという当然の結果を得た。流出側の流速が急激に増加する部分が存在していることがわかる。本解析では初期に流入側で急激な圧力勾配を与えるので、媒体内に圧力波が生じる。この流速が急激に変化する部分は、圧力波が流出側の境界を通過していることをあらわしている。当然ながら、存在確率が小さいものほど圧力波の通過が早い。

図-8 に透気係数と空隙率の関係を示す。透気係数 K_A は、式(6) から供試体の厚さと両端の圧力が一定値ならば、流出側の流速に比例する⁴⁾。

$$K_A = \frac{2LP_0}{P_i^2 - P_0^2} v \quad (6)$$

ここで、 L は供試体の厚さ、 P_i, P_0 はそれぞれ流入側、流出側の圧力、 v は流出側の流速。したがって本研究では、実現現象とモデルとを補完する定数 k を用いて $K_A = kv$ と表す。また、空隙率 ε は正六角形の存在確率 r_p を用いて、 $\varepsilon = 1 - r_p$

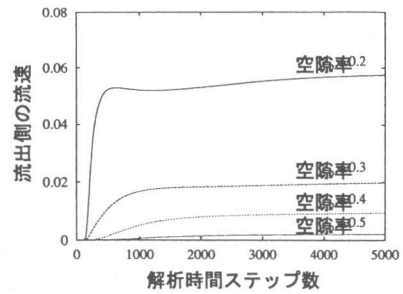


図-7 流出側の流速の時間変化

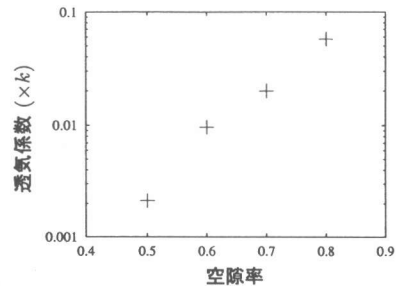


図-8 透気係数と空隙率の関係

とした。図-8 より、両者は片対数グラフ上ではほぼ直線関係となる。2次元と3次元という違いはあるものの、この傾向は氏家⁴⁾の実験結果と一致する。このことより、定数 k の値を適切に推定することができれば、本解析により実現現象をうまく再現できるといえる。

5. 拡散への適用

コンクリート中のイオンの移動へのLBMの適用を目的として、多孔質媒体中の拡散をシミュレートした。二成分流の発展方程式および局所平衡分布関数は、Swiftら⁵⁾が提案した以下の式を用いた。

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) \\ = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) \\ = g_i(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [g_i(\mathbf{r}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (8) \end{aligned}$$

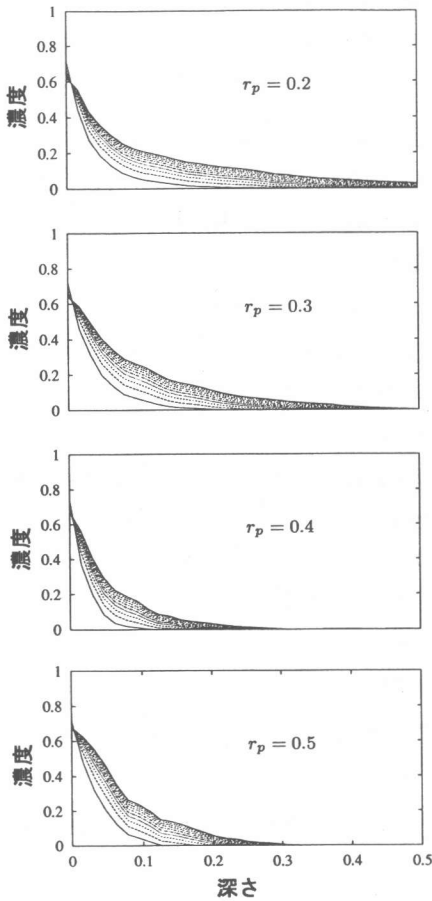


図-9 濃度分布

$$f_i^{eq} = A + Bc_i \cdot u + Cu \cdot u$$

$$D(c_i \cdot u)^2 + Gc_i \cdot c_i \quad (9)$$

$$g_i^{eq} = H + Kc_i \cdot u + Ju \cdot u + Q(c_i \cdot u)^2 \quad (10)$$

局所平衡分布関数の係数は、以下の保存則より決定する。

$$\rho = \sum_i f_i^{eq}, \quad \rho u = \sum_i f_i^{eq} c_i \quad (11)$$

$$\Delta \rho = \sum_i g_i^{eq} \quad (12)$$

ここで、各成分の密度をそれぞれ ρ_1, ρ_2 とすると、 $\rho = \rho_1 + \rho_2$, $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2$ である。

境界条件は、左端流入側の外側に仮想的境界層を設け、その左端の密度を一定とした。また、右端の境界は固体壁とした。透気のシミュレー

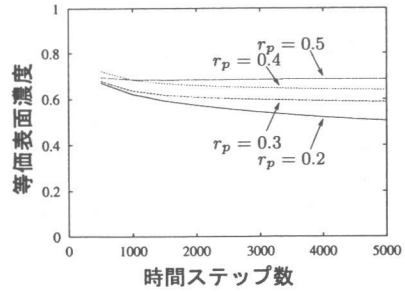


図-10 等価表面濃度の経時変化

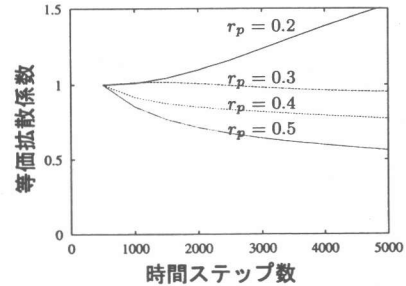


図-11 等価拡散係数の経時変化

ションと同様に、存在確率が0.2,0.3,0.4および0.5の4種類のメディアに対して計算を行なった。

図-9に深さ方向に関する濃度分布を示す。濃度は、各深さごとに幅で平均化した。図より、疎なメディアほど内部への浸透量が大きく、逆に緻密なメディアでは、表層部の濃度が疎なものに比べて若干大きくなっているのがわかる。これは実際のコンクリート中の塩分濃度分布と同様の傾向である。特に、存在確率0.5の濃度分布は、実際のコンクリート中の塩分濃度分布と酷似している。この濃度分布を式(13)で回帰して、等価表面濃度および等価拡散係数⁶⁾を求めた。

$$c = c_{eq} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{D_{eq}t}} \right) \quad (13)$$

その経時変化をそれぞれ図-10、図-11に示す。存在確率0.5の場合、等価拡散係数が時間とともに減少している。これは濃度分布と同様に実現象に類似しており、存在確率0.5のメディアは、実現象を再現し得る可能性を大いに秘めているといえる。等価表面濃度は、やや減少する傾向にある。これは境界層内での拡散により、境界の濃度が与えた濃度よりも低くなるためである。

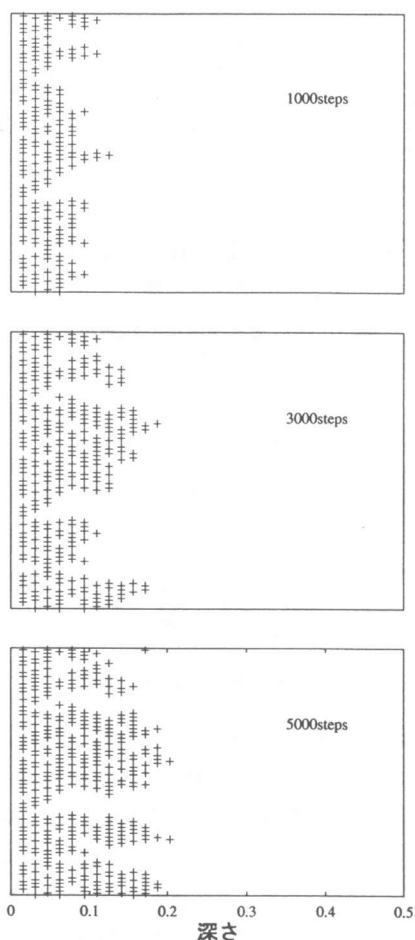


図-12 濃度 0.1 のフロントの分布

存在確率 0.2 の等価拡散係数が増加しているのは、この等価表面濃度の減少が原因である。境界条件に関しては、今後さらなる検討が必要である。

図-12に濃度 0.1 の等濃度線を示す。図より表面からの距離が等しくても、イオンが浸透しているところとしていないところが明瞭にわかる。LBMは、このような浸透程度の局所的なばらつきを容易に表現することができるのわかる。これは鉄筋腐食への応用に有効であるものと思われる。

6. まとめ

コンクリート中の物質移動解析に格子 Boltzmann 法 (LBM) を適用するために、多孔質媒体

を模擬するモデルを構築した。そして、それを用いて透気および拡散をシミュレートした。その結果、以下のような成果を得た。

- (1) LBMを用いることにより、連続体力学では表現できなかったコンクリートの浸透性の局所的ばらつきを容易に表現することができた。
- (2) 透気、拡散ともに実現象に似た傾向を示すことがわかり、LBMがコンクリート中の物質移動解析に対しても有効であることを示せた。
- (3) 移動媒体としてのコンクリートの特性を評価するための手法として、LBMは非常に有用で、さらなる可能性を秘めていることを示すことができた。

参考文献

- 1) 葛原道久, 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) 加藤恭義, 光成友考, 築山 洋: セルオートマトン法, 森北出版, 1998
- 3) 姜 鎬根, 葛原道久: 熱流体格子ボルツマンモデルに関する一考察, 第 14 回数値流体力学シンポジウム, C08-1, 2000
- 4) 氏家 勲: コンクリートの透気係数の定量的検討と密実性評価への適用に関する研究, 東京工業大学学位論文, 1994
- 5) Michael R. Swift, E. Orlandini, W. R. Osborn, and J. M. Yeomans: Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems, PHYSICAL REVIEW E, VOLUME 54, NUMBER 5, NOVEMBER 1996
- 6) 嶋 毅, 佐伯竜彦: 等価拡散係数の経時変化のメカニズム, コンクリート工学年次論文集, Vol.22, No.1, pp.121-126, 2000