

二成分系 Lattice Kinetic スキームを用いたコンクリート内における カルシウムの物質移動解析*

吉野正人^{*1}, 村山寿郎^{*2}
松嶋彰啓^{*3}, 人見尚^{*4}

Mass Transfer Analysis of Calcium in Concrete Using the Lattice Kinetic Scheme for a Binary Miscible Fluid Mixture

Masato YOSHINO^{*5}, Toshiro MURAYAMA,
Akihiro MATSUZAKI and Takashi HITOMI

^{*5} Faculty of Engineering, Shinshu University,
4-17-1 Wakasato, Nagano-shi, Nagano, 380-8553 Japan

The lattice kinetic scheme (LKS) for a binary miscible fluid mixture is applied to mass transfer analysis of Calcium in concrete. In general, cement paste that is a major component of concrete is a porous medium with three-dimensional complicated geometries. The present concrete structure is determined on the basis of experimental data previously obtained by high-intensity X-Ray Computed Tomography (X-Ray-CT). As for the numerical method, the LKS, which is an improved scheme of the original lattice Boltzmann method (LBM), is employed to save computation memory and to maintain numerical stability. First, an unsteady convection-diffusion problem is calculated and the accuracy of the method and error norms with different lattice resolutions are investigated. Next, the mass transfer problem of Calcium in concrete is simulated. Pressure drops in the concrete are calculated for different Reynolds numbers and compared with the empirical equation based on experimental data. Also, velocity fields and concentration profiles are obtained at a pore scale in the structure with heterogeneous mass diffusivity. These simulations indicate that the present method can be useful for prediction of Calcium leaching in concrete from the microscopic point of view.

Key Words: Numerical Simulation, Lattice Boltzmann Method (LBM), Lattice Kinetic Scheme (LKS), Mass Transfer, Concrete, Porous Structure, X-Ray-Computed Tomography (X-Ray-CT), Pressure Drops, Péclet Number

1. 緒 言

構造物の基盤材料として広く用いられるコンクリートは、径が5~25ミリメートルの粗骨材(碎石), 5ミリメートル以下の細骨材(砂), およびセメントペースト(セメントを水で練ったもの)により構成されており, 特に細骨材とセメントペーストの混合物は, モルタルと呼ばれている. モルタルは多孔質材料で, 数ナノメートル~数十マイクロメートル径の細孔が分布し, ネットワーク構造をもつことが知られている⁽¹⁾. 水接条件下で長期供用されたコンクリートは, 次第に空隙量が増大し品質が劣化することがわかっており, 劣化程度の予測や評価方法の確立が求められている. 近年の研究⁽²⁾によると, 水接するコンクリートの構成材料が外部から浸入したイオンと結合して別の物質に化学

変化することや, 構成材料からカルシウムがイオン化し溶出することなどがわかってきているが, それらのメカニズムの理解は進んでいない. このうち, コンクリートの構成材料からカルシウムイオンが溶出しコンクリート内を移動する現象を調べるには, 空隙および細孔内におけるカルシウムの移流・拡散を考慮した詳細な解析が必要と考えられる⁽³⁾.

この問題に関する既存の研究では, 斉藤ら⁽⁴⁾が電気化学的劣化促進手法を用いて, コンクリート内におけるカルシウム移動のメカニズムを実験的に調べている. また, 彼らは空間平均手法に基づく方法でカルシウムの一次元物質移動解析を行い, 計算結果と実験データとの比較から, 同定した有効拡散係数の妥当性を示している. しかしながら, 実際のコンクリート内は複雑な三次元構造であるため, 実験によって局所の濃度分布を求めたり, 局所の物質移動係数を算出したりすることは容易ではない. また, 数値計算によるアプローチでも, 空間平均手法に基づくマクロ的な解析では不十分な場合が多い. それゆえ, ミクロな観点からの数値計算に基づいた移動現象解析が重要となってくる.

* 原稿受付 2006年10月4日.

^{*1} 正員, 信州大学工学部(☎380-8553 長野市若里4-17-1).

^{*2} 信州大学大学院工学系研究科.

^{*3} 信州大学工学部 [現:(株)二葉製作所(☎733-0025 広島市西区小川内町1-9-8)].

^{*4} 正員, (株)大林組技術研究所(☎204-8558 清瀬市下清戸4-640).

E-mail: masato@shinshu-u.ac.jp

1990年代以降、非圧縮性粘性流体の流動および熱・物質移動解析法として開発が進んでいる格子ボルツマン法⁽⁵⁾⁽⁶⁾ (Lattice Boltzmann Method, 以下LBMと呼ぶ)は、質量・運動量の保存性に優れており、アルゴリズムが簡単であるという利点をもっている。LBMによる多孔質内の移動現象解析に関する研究例としては、稲室ら⁽⁷⁾や吉野・稲室⁽⁸⁾が、多数の同一球からなる多孔質構造内の流動および二成分系物質移動解析を行い、低レイノルズ数域から高レイノルズ数域における本手法の妥当性ならびに複雑境界をもつ問題への有効性を確認している。また岡部・Blunt⁽⁹⁾は、多点相関統計手法⁽¹⁰⁾を用いて再構築した多孔質内の流れ解析をLBMにより行い、実際の測定値に良く対応した透過係数を算出している。Liら⁽¹¹⁾は、並列計算用のLBMコードを用いて三次元多孔質内における二相流問題の解析を行い、非混和性の二相系流れに特有な viscous coupling 効果⁽¹²⁾について詳細に調べている。最近では、瀬田ら⁽¹³⁾が多孔質内における自然対流問題の計算を行い、差分法などの従来法よりLBMの方が計算効率が良いことを示している。さらに、実際問題へのLBMの適用例としては、山本ら⁽¹⁴⁾が、ディーゼル車から排出される粒子状物質を除去するためのフィルター(空隙率が0.7~0.9程度の範囲で空間分布をもつ多孔質媒体)内における流動およびすすの物質移動解析をLBMにより行っている。このようにLBMは、とりわけ複雑な境界をもつ流れ場に対して有効な計算手法であり、コンクリート内におけるカルシウムの物質移動解析にもその長所が十分に発揮されるものと期待できる。

一方、実際のコンクリート内における物質移動現象を調べるためには、その細孔構造の把握が重要である。多孔質媒体内部の細孔構造の非破壊観察に関するこれまでの研究例としては、Landisら⁽¹⁵⁾やTurnerら⁽¹⁶⁾が、X線マイクロCT(Computed Tomography)を用いて多孔質内の細孔構造の測定を行っている。人見ら⁽¹⁷⁾も同様に、大型放射光施設SPring-8⁽¹⁸⁾における高分解能X線CTを用いてコンクリート内部の空隙構造を非破壊観察し、得られた断面図から空隙の立体構造を抽出している。よって、このような高精度測定技術によって得られたコンクリート内の微細構造データは、ミクロなレベルからの現象解明に有用であると考えられる。

本研究では、X線CTによるデータで再構成されたコンクリート構造内のカルシウムイオンの移動現象解析をLBMを用いて行い、有効拡散係数の同定や物質移動様式の詳細な把握に基づくコンクリート変質予測システムの開発を最終目的としている。特に本論文で

はその第一段階として、空隙の複雑な幾何形状がカルシウムイオンの物質移動に与える影響について調べることで、また、周囲に地下水などの流れ場が存在する場合にコンクリート内部にもその流れが励起されるようなケースを想定して、移流効果が物質移動に与える影響について調べることを目的とした。なお、計算手法には計算機メモリの軽減ならびに数値安定性を向上させる目的から、二成分系LBM⁽¹⁹⁾にLattice Kinetic スキーム⁽²⁰⁾を導入した手法(以下では二成分系LKSと呼ぶ)を用いた。

2. 数 値 計 算 法

使用する物理量はすべて、代表長さ L 、粒子の代表速度 c 、代表時間 $t_0 = L/V$ (V : 流れの代表速度)、基準密度 ρ_0 、および基準質量濃度 C_0 を用いて無次元化したものである⁽¹⁹⁾。水を主成分とする流体(以下では単に流体と呼ぶ)の中に拡散成分のカルシウムイオンが存在する二成分系混合物を考える。ここで、カルシウムは実際には陽イオンの形で存在するが、外場として電位差を加えていないこと、および空隙の壁面との電気的相互作用を微小なものと考え、以下の解析では電荷による効果を見捨てる(以下では単にカルシウムと呼ぶ)。また、カルシウムの質量分率は水に比べて十分小さい(希薄である)と仮定する。したがって、カルシウムの質量濃度はパッシブスカラーとして扱われる。

本手法の基礎となる二成分系LBM⁽¹⁹⁾では、二種類の速度分布関数を導入する。すなわち、分布関数 f_i を用いて流体の密度 ρ および流速 u を計算し、分布関数 g_i を用いてカルシウムの質量濃度 C を計算する。ここで、添字 $i = 1, 2, 3, \dots, N$ であり、 N は粒子の速度の個数を表す。格子気体モデルには、3次元15速度モデル($N = 15$)を用いる。このモデルにおける粒子速度 c_i は、次式で与えられる。

$$[c_1, c_2, c_3, c_4, c_5, c_6, c_7, c_8, c_9, c_{10}, c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{14}, c_{15}] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \dots \dots \dots (1)$$

この二成分系LBMにLKSを導入した手法では、時刻 t に格子点 x における流体の密度 ρ 、流速 u 、およびカルシウムの質量濃度 C がそれぞれ次式で定義される。

$$\rho(x, t) = \sum_{i=1}^{15} f_i^{\text{eq}}(x - c_i \Delta x, t - \Delta t) \dots \dots \dots (2)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_{i=1}^{15} c_i f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t - \Delta t) \dots \dots \dots (3)$$

$$C(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{15} g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta x, t - \Delta t) \dots \dots \dots (4)$$

ここに,

$$f_i^{\text{eq}} = E_i \rho \left[1 + 3c_{i\alpha} u_\alpha + \frac{9}{2} c_{i\alpha} c_{i\beta} u_\alpha u_\beta - \frac{3}{2} u_\alpha u_\alpha + A \Delta x \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) c_{i\alpha} c_{i\beta} \right] \dots \dots \dots (5)$$

$$g_i^{\text{eq}} = E_i C (1 + 3c_{i\alpha} u_\alpha) + E_i B \Delta x c_{i\alpha} \frac{\partial C}{\partial x_\alpha} \dots \dots \dots (6)$$

および

$$\left. \begin{aligned} E_1 &= 2/9 \\ E_2 &= E_3 = E_4 = \dots = E_7 = 1/9 \\ E_8 &= E_9 = E_{10} = \dots = E_{15} = 1/72 \end{aligned} \right\} \dots \dots (7)$$

ここで, 添字 $\alpha, \beta = x, y, z$ であり (添字 α, β はデカルト座標を表し, 総和規約に従う), Δx は格子間隔, Δt は時間刻み, また, $A = O(1)$ および $B = O(1)$ は後述のとおり, 粘性係数ならびに拡散係数に関するパラメータである. Δt は, 仮想粒子がちょうど隣の格子点まで移動する時間と等しくなるように選ばれる. このように, LKS では通常の LBM とは異なり, 粒子の速度分布関数が不要であるため, 計算メモリの削減が可能であるという利点がある⁽²⁰⁾.

さらに, 圧力 p は密度と次の関係がある.

$$p = \frac{1}{3} \rho \dots \dots \dots (8)$$

また, 流体の動粘性係数 ν および流体中におけるカルシウムの拡散係数 D は, それぞれ $A, B, \Delta x$ に関係し次式で与えられる.

$$\nu = \left(\frac{1}{6} - \frac{2}{9} A \right) \Delta x \dots \dots \dots (9)$$

$$D = \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{3} B \right) \Delta x \dots \dots \dots (10)$$

なお, 式 (5) および (6) における一階微分には, テーラー級数展開を用いて導出される次の二次精度中心差分近似式を用いた.

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} \approx \frac{1}{10 \Delta x} \sum_{i=2}^{15} c_{i\alpha} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta x) \dots \dots \dots (11)$$

漸近理論 (S 展開)⁽²¹⁾⁽²²⁾ を適用すると, 式 (1)~(7)

ならびに適切な初期・境界条件を用いることにより, 非圧縮性流体の流速, 圧力, およびカルシウムの質量濃度をそれぞれ相対誤差 $= O[(\Delta x)^2]$ で計算できることが示されている⁽¹⁹⁾. さらに, 質量中心に対する相対質量流束⁽²³⁾ j_C は, 次式で与えられる⁽⁸⁾.

$$j_C = C(\mathbf{u}_C - \mathbf{u}) \dots \dots \dots (12)$$

ここで, \mathbf{u}_C は次式で定義される.

$$\mathbf{u}_C = \frac{1}{C} \sum_{i=1}^{15} g_i c_i \dots \dots \dots (13)$$

3. 二成分系 LKS の精度に関する検討

本手法の妥当性は, 正方形キャビティ内の定常自然対流問題に対してすでに確認されている⁽²⁰⁾. そこで以下では, 非定常問題に対する二成分系 LKS の精度を調べるために, 一次元非定常移流拡散問題の計算を行い, 厳密解との誤差について検討した. $L_y = L_z = 0.1L_x$ の直方体領域を考え, 流体が x 方向に一定速度 U で流れている. 初期時刻 $t = 0$ において, 濃度一定の拡散成分を入口から投入したときの領域内における濃度分布の時間変化を計算した. 濃度に関して, 初期時刻 $t = 0$ で全領域における濃度を C_1 とし, 境界条件は入口 ($x = 0$) の濃度を C_{in} , 出口 ($x = L_x$) では $\partial C / \partial x = 0$ とした. 実際には, 二次精度の片側差分近似を用いてこの式を離散化し, 濃度勾配が 0 になるように出口のカルシウム濃度を与えた. さらに, $y = 0, L_y$ および $z = 0, L_z$ の側面における流速には周期境界条件, 濃度に対しては質量流束なしの境界条件を用いた.

いま, 無次元濃度を

$$\Pi = \frac{C - C_1}{C_{in} - C_1} \dots \dots \dots (14)$$

と定義すると, 支配方程式および初期・境界条件は次のようになる.

$$\text{Sh} \frac{\partial \Pi}{\partial t} + U \frac{\partial \Pi}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \Pi}{\partial x^2} \dots \dots \dots (15)$$

$$\left. \begin{aligned} t = 0, & \quad 0 \leq x \leq L_x : & \quad \Pi = 0; \\ t > 0, & \quad x = 0 : & \quad \Pi = 1; \\ t > 0, & \quad x = L_x : & \quad \partial \Pi / \partial x = 0 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (16)$$

ここで, $\text{Sh} (= V/c)$ はストローハル数である. 前述のとおり本手法では, Δt を仮想粒子が隣の格子点まで移動する時間と等しくなるように選ぶため, $\text{Sh} = \Delta t / \Delta x$ の関係があることに注意されたい. この問題において,

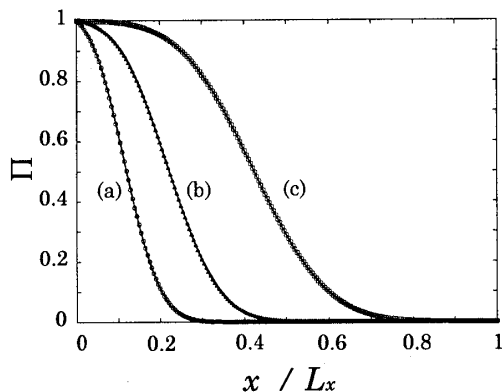


Fig.1 Normalized concentration profiles in unsteady convection-diffusion problem at different dimensionless times with $\Delta x = 1/200$: (a) \circ , $t^* = 0.1$; (b) Δ , $t^* = 0.2$; (c) \times , $t^* = 0.4$ ($t^* = tU/L_x$). The solid lines indicate the exact solution.

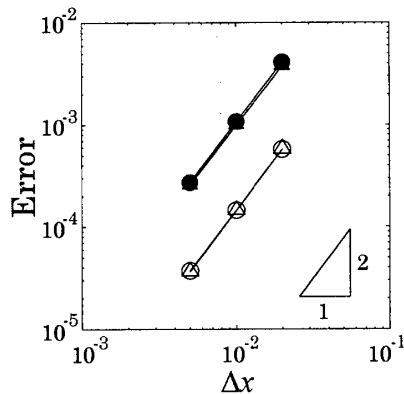


Fig.2 Error norms of unsteady convection-diffusion problem: \bullet and \blacktriangle indicate respective Er_1 and Er_2 norms for the present calculation. \circ and Δ represent the corresponding results for original LBM.

L_x を ∞ としたときには次の厳密解 Π^* が存在する⁽²⁴⁾.

$$\Pi^* = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{Ut/Sh - x}{\sqrt{4Dt/Sh}} \right) \right] + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{Ux}{D} \right) \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{Ut/Sh + x}{\sqrt{4Dt/Sh}} \right) \right] & (\text{for } x < Ut/Sh) \\ \frac{1}{2} \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x - Ut/Sh}{\sqrt{4Dt/Sh}} \right) \right] + \frac{1}{2} \exp \left(\frac{Ux}{D} \right) \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{Ut/Sh + x}{\sqrt{4Dt/Sh}} \right) \right] & (\text{for } x \geq Ut/Sh) \end{cases} \quad (17)$$

ここで、 $\operatorname{erf}(x)$ は次式で定義される誤差関数である。

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \quad (18)$$

本計算では、 x 方向の領域を十分長く設定することにより、この厳密解と計算結果との比較を行った。与えたパラメータの値は、 $L_x = 200\Delta x$, $B = 0.35$, $U = 0.01$, $C_1 = 1$, $C_{in} = 5$ である。このときペクレ数 $Pe = UL_x/D$ は 40 となる。

まず、異なる三つの無次元時刻における濃度分布の計算結果を Fig. 1 に示す。実線は、式 (17) により求められる厳密解を表している。いずれの時刻においても、計算結果は厳密解と良く一致していることがわかる。次に、格子数を $L_x = 50\Delta x$, $100\Delta x$, $200\Delta x$ とし、ペクレ数を一定にしたまま流速のみを変化させて計算を行った。同じ無次元時刻 ($t^* = 0.2$) における

誤差を求めた結果を Fig. 2 に示す。誤差ノルムとしては、 $Er_1 = \sum_x |\Pi - \Pi^*| / \sum_x |\Pi^*|$ および $Er_2 = \sqrt{\sum_x (\Pi - \Pi^*)^2} / \sqrt{\sum_x (\Pi^*)^2}$ を用いた。ここで、いずれのケースにおいても、誤差は x 方向の 51 個の同一格子点に対する和を計算した。この図から、 Δx を小さくするにつれて誤差 Er_1 および Er_2 が減少する割合（両対数グラフにおける傾き）は、それぞれ $m_1 = 1.9823$ および $m_2 = 1.9587$ となり、本手法がほぼ二次精度であることがわかる。なお、予備計算によると、二成分系 LBM を用いて同じ問題を計算したときの結果は、それぞれ $m'_1 = 1.9905$ および $m'_2 = 1.9970$ となった。また、各誤差の大きさは、いずれのケースも本計算結果より約 1/10 程度になっている。この理由について考察すると次のようになる。LKS では通常の LBM と異なり、式 (5) および (6) 中に流速あるいは濃度の一階微分が存在するため、それらを何らかの手法で離散化する必要がある。本問題では、流速が一様であるため、式 (6) における $\partial C / \partial x_\alpha$ の離散化のみを考慮すればよいが、この離散化で生ずる誤差が両手法による結果の差異の主な原因と考えられる。なお、LKS による結果の誤差を小さくする必要がある場合には、式 (11) に代わる高次精度の差分近似式を用いればよいと考えられる。

4. コンクリート内におけるカルシウムの移動現象解析

4.1 解析対象の構造 本研究では、X 線 CT によるモルタル内部構造のデータ⁽¹⁷⁾ を基に再構成されたコンクリートモデルを用いて、カルシウムの物質移動解析を行った。その三次元構造の様子を Fig. 3 に

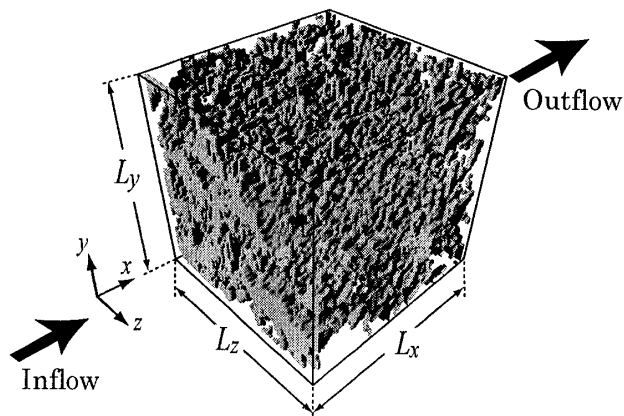


Fig.3 Three-dimensional concrete structure reconstructed using data⁽¹⁷⁾ by high-intensity X-Ray CT. Degraded and non-degraded regions are represented by pore and solid phases, respectively.

示す。コンクリート内部の微細構造は、セメント水和組織がほとんど変化していない部分と、カルシウムがイオンの形で溶出してセメント水和組織がポーラス状になった部分とに分けられる。以下では、前者を未変質部、後者を変質部と呼ぶことにする。Fig. 3において、灰色の固体部分が未変質部、その他の空隙部分を変質部に相当する。実際には、X線CTを用いて撮影したモルタル内部の画像に対して二値化処理を行うことで、1マイクロメートル以上の細孔の三次元分布が得られ、これをもとに未変質部と変質部の区別を行った。詳細については、文献(17)を参照されたい。また、 x 方向の各断面における空隙率の分布をFig. 4に示す。全計算領域 $L_x \times L_y \times L_z$ において、 $0.029 \leq x/L_x \leq 0.97$ の区間はコンクリートを模擬した多孔質部分であり、その前後には空隙部を設けた。ここで、多孔質部分の平均空隙率は $\varepsilon = 0.609$ である。

未変質部には、数ナノメートル程度の細孔があるが、流動抵抗が大きいためその部分を水などの流体はほとんど流れないことがわかっている。一方、カルシウムの拡散速度は、未変質部のセメント水和組織の中では遅く、逆に変質によってできた空隙の大きな部分では速いことがわかっている。この拡散速度の相違は、未変質部と変質部における細孔径のスケールや屈曲率などの違いによるものと考えられ、文献(4)および(25)の実験的研究によると、変質部におけるカルシウムの有効拡散係数の値は未変質部のそれに比べて1オーダーほど増加することが報告されている。以下では、有効拡散係数が空隙量の相違を反映した物理量であるというこの考え方にに基づき、変質部と未変質部におけるカルシウムの拡散係数には異なる値を与えて計算を行った。

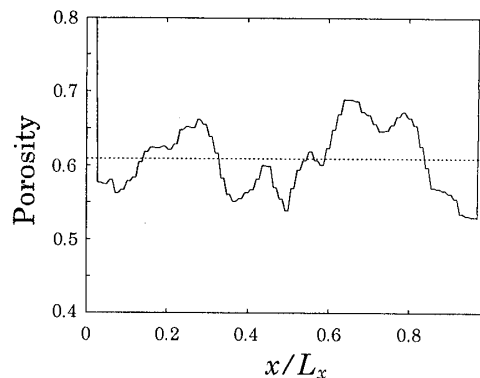


Fig.4 Porosity distribution in the cross-sections perpendicular to the streamwise direction.

4・2 計算条件 全領域を $138 \times 130 \times 130$ 個の立方体格子に分割した。初期条件は、全領域で $\rho = 1$, $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, $C_1 = 1$ とした。境界条件は次の通りである。まず領域の入口・出口において、流体に関しては圧力差を伴う周期境界条件⁽⁷⁾を用いた。カルシウム濃度に関しては、領域入口では $C_{in} = 5$ で一定とし、領域出口では $\partial C / \partial x = 0$ とした(前問と同様、二次精度の片側差分近似を用いて離散化し、勾配が0になるように出口におけるカルシウム濃度を与えた)。次に領域の側面では、流体はすべり境界条件、カルシウムに対しては質量流束なしの境界条件を用いた。さらに未変質部と変質部との境界には、流体に対してすべりなし境界条件を適用した。本計算で与えたパラメータの値は次の通りである。流体に関して、動粘性係数を $\nu = 0.05 \Delta x$ とし、未変質部の細孔への流体の浸入はないものとした。一方、カルシウムの拡散係数は、未変質部では $D_0 = 2.86 \times 10^{-3} \Delta x$, 変質部では $D_1 = 0.1 \Delta x$ とし、このときの両者の比 $r = D_1 / D_0 = 35$ は文献(25)のデータ(例えば、水セメント比が0.4で砂セメント比が1.5であるモルタルの場合、 $r = 30 \sim 40$ 程度になるという実験結果)と対応する値にした。また、入口・出口の圧力差 Δp を変化させることによって、レイノルズ数 $Re = u_0 d / \nu$ およびペクレ数 $Pe = u_0 d / D_1$ がそれぞれ $0.0994 \leq Re \leq 7.38$, $0.0497 \leq Pe \leq 3.69$ の計算を行った。ここで、 u_0 は空塔速度⁽²³⁾(未変質部が存在しないと仮定したときの流速)であり、 d はコンクリート構造を表す代表長さである。本研究では、レイノルズ数が最小のケース($Re = 0.0994$)において、後述する圧力損失の計算値がErgunの実験式⁽²⁶⁾と一致するように d の値を選んだ。その結果、 $d = 15.2 \Delta x$ となった。

なお、文献(4)、(17)などによると、実際のコンクリートにおける代表的な有次元量としては、流速 $\bar{u} \approx 10^{-8}$ [m/s]、代表細孔径 $\bar{d} \approx 10^{-5}$ [m]、カルシウムの

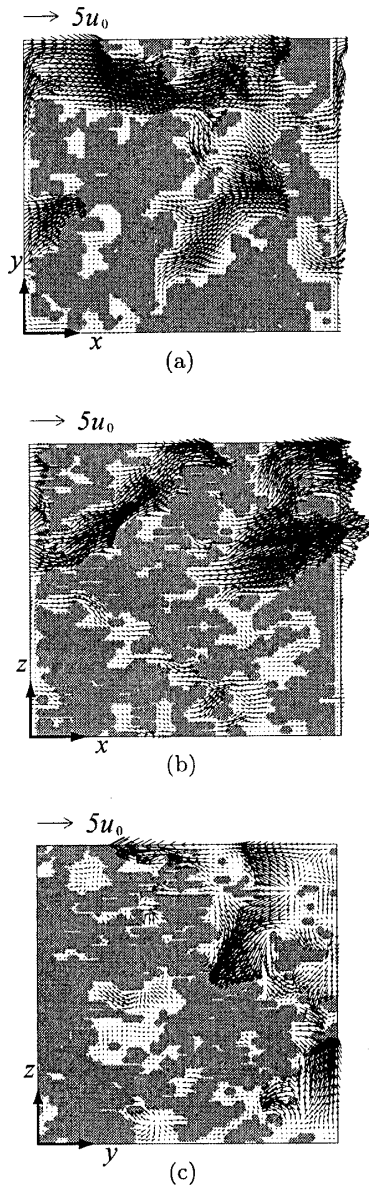


Fig.5 Velocity vectors at $t^* = 4.23$ for $Re = 0.977$: (a) $z/L_z = 0.50$; (b) $y/L_y = 0.50$; (c) $x/L_x = 0.50$. $t^* = tu_0/d$ and $Re = u_0d/\nu$, where u_0 is the superficial velocity.

有効拡散係数 $\bar{D}_1 \approx 10^{-12}$ [m²/s] である。したがって、これらを用いて計算されるペクレ数は $Pe = \bar{u}\bar{d}/\bar{D}_1 \approx 10^{-1}$ となり、物質移動に関する本シミュレーションがコンクリート内におけるカルシウムの移動現象にほぼ対応するものであると言える。

4.3 結果と考察 まず、レイノルズ数 $Re = 0.977$ において、過渡状態後の異なる三つの断面 ($z/L_z = 0.50$, $y/L_y = 0.50$, $x/L_x = 0.50$) 上の速度ベクトルを Fig. 5 に示す。図において、灰色の部分が未変質部、白色の空隙部分が変質部に対応している。Fig. 5 (a) および (b) より、流体は主流方向の閉塞部では流れに

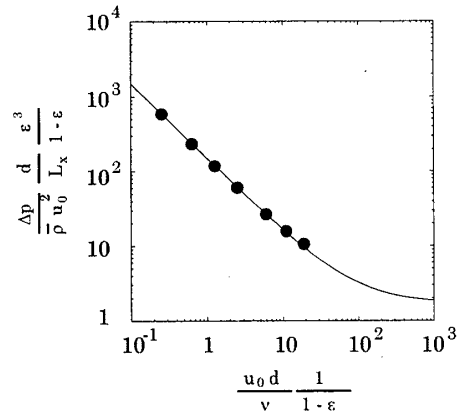


Fig.6 Pressure drops versus Reynolds numbers in the concrete structure with porosity $\varepsilon = 0.609$: •, the present results; —, the Ergun equation⁽²⁶⁾, where $\bar{\rho}$ is the time- and space-averaged fluid density at the inlet.

くく、空間的に広い部分を選択的に流れる様子が見える。また、Fig. 5 (c) より、流体が未変質部に衝突することで生じる二次流が見られ、コンクリート内の複雑構造により流体が三次元的に流れていることがわかる。さらに、レイノルズ数と圧力損失との関係を Fig. 6 に示す。本計算結果は、Ergun の実験式⁽²⁶⁾と非常に良く一致することがわかった。

次に、ペクレ数 $Pe = 0.489$ のときの断面 $z/L_z = 0.50$ および $x/L_x = 0.50$ におけるカルシウム濃度分布の時間変化を、それぞれ Fig. 7 および Fig. 8 に示す。これらの図においても同様に、灰色の部分が未変質部、白色の空隙部分が変質部に対応している。Fig. 7 より、カルシウムが未変質部（灰色部分）に比べて変質部（白色部分）をより速く移動し下流側に到達していることがわかる。また Fig. 8 より、主流方向に垂直な断面においては、二次流がもたらす局所的な濃度分布の不均一性が見られ、移流による効果が確認できる。なお、Fig. 7 および Fig. 8 において、それぞれの図 (e) と (f) に大きな変化が見られないことから、本ケースでは無次元時間 $t^* = tu_0/d \approx 20$ で、濃度場は定常状態に達することがわかった。

最後に、移流の効果を定量的に評価するために、異なるペクレ数 ($Pe = 0.0497, 0.247, 0.489$) に対する計算を行い、局所のカルシウム濃度の時間変化を調べた。一例として、任意の点 ($x/L_x, y/L_y, z/L_z$) = (0.50, 0.77, 0.50) における結果を Fig. 9 に示す。図には比較のために、同様の計算条件で全領域の流速を $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ (つまり $Pe = 0$) としたときの計算結果も示す。流体の速度が大きくなるにつれ、カルシウムの移動速度の上昇が顕著に見られる。特に $Pe = 0.489$ のケース

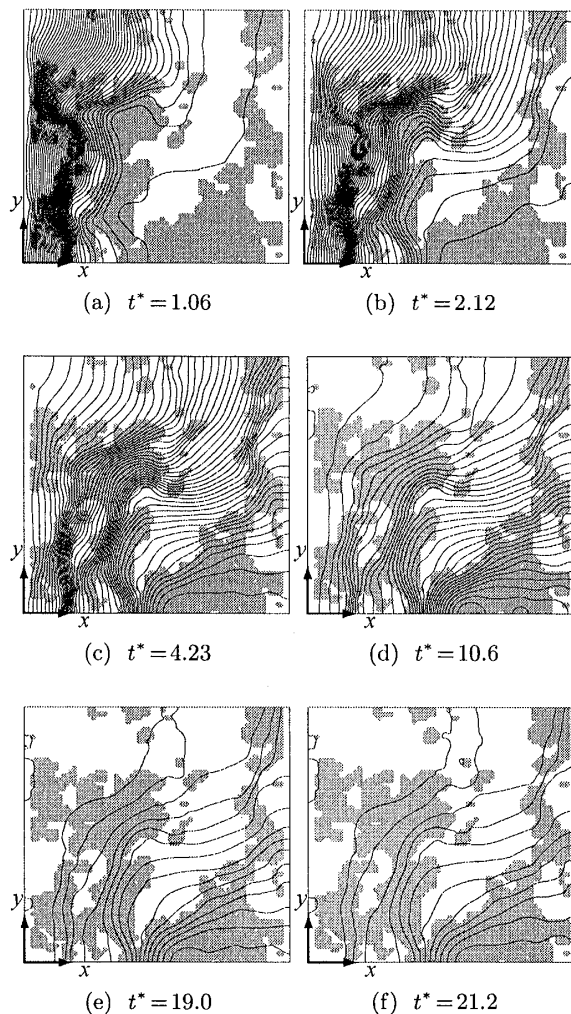


Fig.7 Time variation of concentration contours of Calcium on $z/L_z = 0.50$ for $Pe = 0.489$ and $r = 35$ ($t^* = tu_0/d$, $Pe = u_0d/D_1$, $r = D_1/D_0$). The contour interval is 0.08.

では、移流のない場合 ($Pe = 0$) に比べて、濃度の増加率 (初期段階におけるグラフの接線の傾き) が約 4 倍大きく、また無次元時間 $t^* \approx 20$ でほぼ飽和濃度に達している。以上のことから、コンクリート内におけるカルシウムの移動現象には、地下水や海水などの浸入による移流の影響が大きく作用することがわかった。

5. 結 言

二成分系 LKS を用いて、実物の構造を模擬した複雑な三次元構造をもつコンクリート内のカルシウムの移動現象解析を行った。既存の実験で得られた測定データを参考にして、実際のコンクリートに近い条件の下で、カルシウムの局所的な濃度分布を計算することができた。得られた結果から、複雑な流路内における物質移動問題に対して、本手法の有効性が示された。な

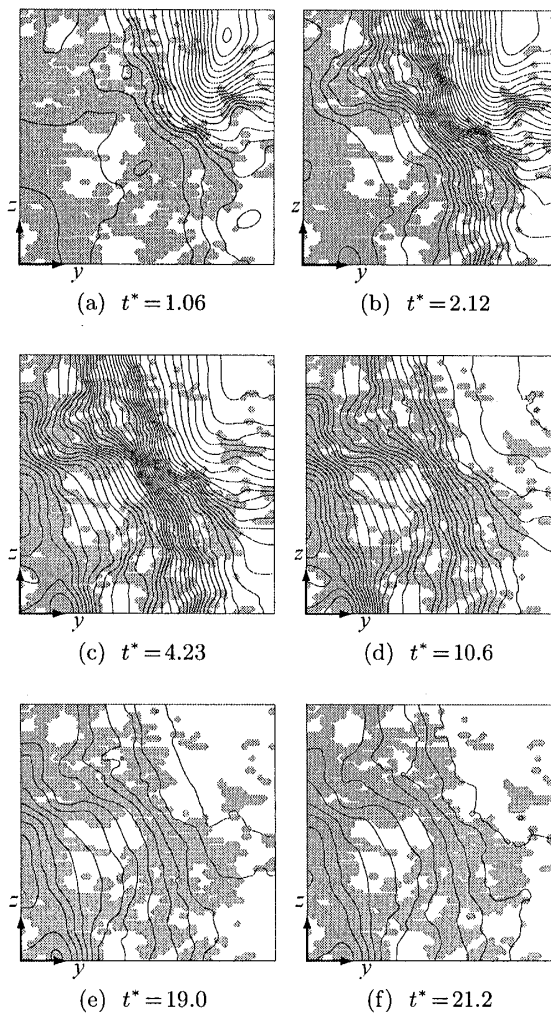


Fig.8 Time variation of concentration contours of Calcium on $x/L_x = 0.50$ for $Pe = 0.489$ and $r = 35$ ($t^* = tu_0/d$, $Pe = u_0d/D_1$, $r = D_1/D_0$). The contour interval is 0.08.

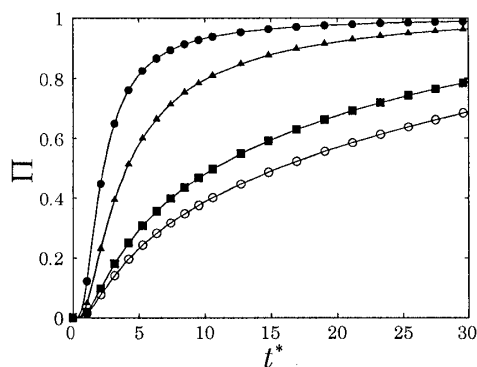


Fig.9 Time variation of Calcium concentration at $(x/L_x, y/L_y, z/L_z) = (0.50, 0.77, 0.50)$ for different Péclet numbers: \bullet , $Pe = 0.489$; \blacktriangle , $Pe = 0.247$; \blacksquare , $Pe = 0.0497$; \circ , $Pe = 0$. $\Pi = (C - C_1)/(C_{in} - C_1)$ and $t^* = tu_0/d$, where u_0 is the superficial velocity for $Pe = 0.489$.

お、本文では述べなかったが、既存の二成分系 LBM⁽⁷⁾を用いて同様の計算を行ったところ、高ペクレ数域で数値不安定となり、計算を安定に実行するためには格子分割数を増やす必要が生じた。したがって、このような問題の計算には、二成分系 LKS の方が数値安定性に優れていることがわかった。

最後に、実際のコンクリート内では、その構成材料からカルシウムがイオン化し溶出する現象が起こっているが、本研究ではこの現象を考慮に入れていない。そのため、境界形状が時間とともに変化するように工夫したシミュレーションが必要となるが、これについては今後の課題である。

謝 辞

本研究は、平成 17 年度 国立大学法人 信州大学 産学連携経費 (株式会社 大林組) により行われたものであります。また本研究は、高輝度光科学研究センターの大型放射光施設 SPring-8 における研究 (課題番号: 2005A0090-NI-np) の成果を用いて実施しました。ここに銘記し謝意を表します。

文 献

- (1) Hitomi, T. et al., Evaluation of Calcium Leaching in Concrete using High-Intensity X-Ray Computed Tomography (in Japanese), *Proceedings of the Concrete Structure Scenarios, JSMS*, Vol.5, (2005), pp.223-228.
- (2) Sugiyama T. et al., Determination of Pore Structure Characteristic of Mortar using a Steady-State Migration Test (in Japanese), *Journal of Materials, Concrete Structures and Pavements*, Vol.767, Nos.5-64 (2004), pp.227-238.
- (3) Hironaga, M., Perspectives of Disposal of Radioactive Waste and Concrete Technology (in Japanese), *Concrete Journal*, Vol.37, No.3 (1999), pp.3-10.
- (4) Saito, H. et al., A Model for Predicting the Leaching Degradation of Cement Hydrate (in Japanese), *Concrete Research and Technology, Japan Concrete Institute*, Vol.11, No.1 (2000), pp.51-59.
- (5) Chen, S. and Doolen, G.D., Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows, *Annual Review Fluid Mechanics*, Vol.30 (1998), pp.329-364.
- (6) Succi, S., *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*, (2001), Oxford University Press.
- (7) Inamuro, T. et al., Lattice Boltzmann Simulation of Flows in a Three-Dimensional Porous Structure, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol.29, No.7 (1999), pp.737-748.
- (8) Yoshino, M. and Inamuro, T., Lattice Boltzmann Simulations for Flow and Heat/Mass Transfer Problems in a Three-Dimensional Porous Structure, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol.43, No.2 (2003), pp.183-198.
- (9) Okabe, H. and Blunt, M.J., Prediction of Permeability for Porous Media Reconstructed using Multiple-Point Statistics, *Physical Review E*, Vol.70 (2004), 066135.
- (10) Caers, J., Geostatistical Reservoir Modelling using Statistical Pattern Recognition, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol.29, Nos.3-4 (2001), pp.177-188.
- (11) Li, H. et al., Pore-Scale Investigation of Viscous Coupling Effects for Two-Phase Flow in Porous Media, *Physical Review E*, Vol.72 (2005), 026705.
- (12) Ayub, M. and Bentsen, R.G., Interfacial Viscous Coupling: A Myth or Reality?, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, Vol.23, No.1 (1999), pp.13-26.
- (13) Seta, T. et al., Lattice Boltzmann Simulation of Natural Convection in Porous Media, *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol.72, Nos.2-6 (2006), pp.195-200.
- (14) Yamamoto, K. et al., Lattice Boltzmann Simulation on Porous Structure and Soot Accumulation, *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol.72, Nos.2-6 (2006), pp.257-263.
- (15) Landis, E.N. et al., Microstructure and Fracture in Three Dimensions, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol.70, Nos.7-8 (2003), pp.911-925.
- (16) Turner, M.L. et al., Three-Dimensional Imaging of Multiphase Flow in Porous Media, *Physica A*, Vol.339, Nos.1-2 (2004), pp.166-172.
- (17) Hitomi, T. et al., Observation of Microscopic Structures of Mortar by X-Ray Computed Tomography in SPring-8 (in Japanese), *Annual Transactions of the Japan Concrete Institute*, Vol.26, No.1 (2004), pp.645-650.
- (18) <http://www.spring8.or.jp/>
- (19) Inamuro, T. et al., A Lattice Boltzmann Method for a Binary Miscible Fluid Mixture and Its Application to a Heat-Transfer Problem, *Journal of Computational Physics*, Vol.179, No.1 (2002), pp.201-215.
- (20) Inamuro, T., A Lattice Kinetic Scheme for Incompressible Viscous Flows with Heat Transfer, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A*, Vol.360, No.15 (2002), pp.477-484.
- (21) Sone, Y., Asymptotic Theory of Flow of Rarefied Gas over a Smooth Boundary. II, In *Rarefied Gas Dynamics* (ed. Dini, D.), Vol.2 (1971), Editrice Tecnica Scientifica, Pisa, pp. 737-749.
- (22) Sone, Y. and Aoki, K., *Molecular Gas Dynamics (in Japanese)*, (1994), p.97, Asakura Publishing Co. Ltd.
- (23) Bird, R.B. et al., *Transport Phenomena*, (1960), p.500, John Wiley & Sons.
- (24) Tanahashi, T., *Introduction to Computational Fluid Dynamics—Convection-Diffusion Equation— (in Japanese)*, (1996), pp.224-264, Corona Publishing Co. Ltd.
- (25) Saito, H. et al., Application of Electrochemical Acceleration Test Method to Changes in Cementitious Barrier Performances by Leaching Degradation, *Materials Research Society Symposium - Proceedings*, Vol.506, No.2 (1998), pp.449-456.
- (26) Ergun, S., Fluid Flow through Packed Columns, *Chemical Engineering Progress*, Vol.48, No.93 (1952), pp.89-94.