

相平衡と物質移動モデルによる劣化シミュレーション

構造物の長寿命化が求められる中、コンクリートの劣化シミュレーションは高度化が進み、コンクリート内部で起こっている実現象をより忠実に模擬する努力が今も続けられています。今回は劣化に深く関わる物理化学的現象として、相平衡に着目したシミュレーションについて解説します。

Q1

劣化シミュレーションとはなんですか？

A1

コンクリート構造物の劣化現象の発生メカニズムを、コンピューター計算により再現することで構造物の寿命や経年劣化について予測・調査する手法のことです。

解説

従来、コンクリート構造物はメンテナンスをほとんど必要としない半永久的な構造物であると考えられてきました。しかし、建設後10~20年という早い時期に劣化が進行し、構造物へのひび割れやコンクリート片の落下などの問題が顕在化しており、大きな社会問題となっています。

コンクリート構造物の劣化現象として、塩害、中性化、アルカリ骨材反応、化学的腐食などが挙げられます。これらの劣化現象の引き金となる劣化因子は様々で、現象により異なりますが、基本的にはこれらの劣化因子がコンクリート構造物内部を移動・拡散することで劣化作用が発現します。例えば、海洋構造物における塩害は、飛来した塩化物イオンがコンクリート内部の空隙水中を移動、拡散し鉄筋まで到達したのち、鉄筋表面の不動態皮膜を破壊することで鉄筋が腐食する現象です。鉄筋が錆びることにより体積膨張が生じてひび割れが発生し劣化の促進を招きます。また、

腐食により鉄筋の断面が減少し、構造物の耐力が低下するなどの被害を受けることとなります。

物質移動モデルによる劣化シミュレーションとは、このような劣化因子の移動を再現するためのモデルを構築し、コンピューターによる計算・解析を行うことで、「劣化の進行度合いはどの程度なのか?」、「劣化はいつ発生するのか?」、「構造物の寿命はあと何年程度なのか?」などを予測する技術なのです。

Q2

なぜ、コンクリート構造物の劣化シミュレーション技術が求められるのですか？

A2

補修・補強の必要となるコンクリート構造物の増加は今後本格化することが予想され、コンクリート構造物の維持管理費用は増大するものと考え

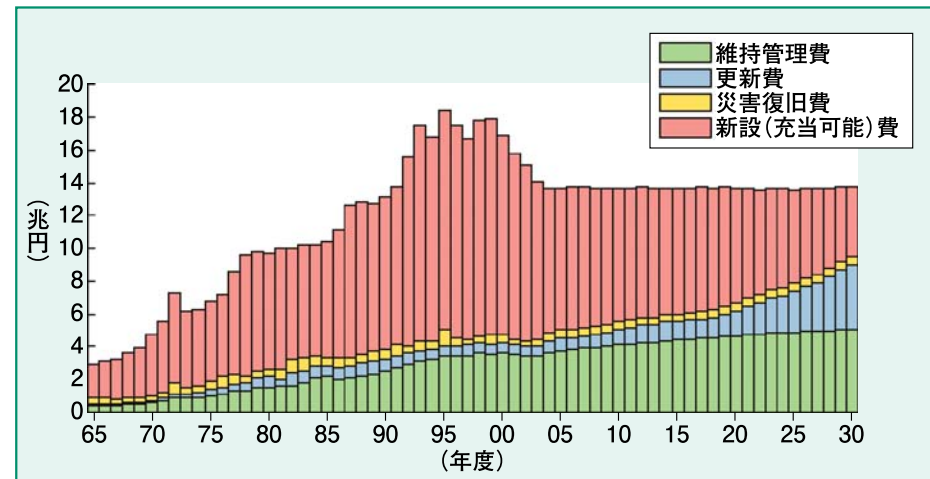


図-1 社会資本の維持管理・更新投資の見通し(投資可能額が一定の場合)¹⁾

られます。したがって、合理的・効率的な耐久性・劣化シミュレーション技術の確立が望まれています。

解説

国土交通省の推計による道路・空港などの社会資本を対象とした維持管理・更新費について図-1に示します。高度成長期に建設された大量のコンクリート構造物の多くは、2010年以降に約50年の供用期間を迎え、今後補修・補強を必要とする構造物が増加することが予想されます。しかしながら、わが国の財政状況が悪化していることから、公共投資費用の抑制は今後より厳しさを増していくものと考えられます。また、コンクリート構造物や材料を取り巻く社会環境は変化してきており、環境負荷低減への要求は年々高まりを見せています。このような社会・経済的背景を鑑みると、今後の社会資本の新設費は減少し、補修、維持費用が増大していくことになるでしょう。

そのため、構造物の耐久性予測や劣化状況の調査などの維持管理およびそれに関わる調査・診断・補修・予測といった技術は今後益々重要視されるものと予想されます。

このような背景から、当社では相平衡と物質移動モデルによる劣化シミュレーションを用いて、構造物の耐久性や劣化状況について予測・再現できる技術の開発を行ってきました。コンクリート構造物の耐久性を予測できれば、出来上がる構造物が予定使用期間の間、性能を満足できる設計が可能で、すなわち、必要以上の過剰なスペックになることがなく、無駄な資源を使用しない極めて合理的な設計を行うことができ、経済的で低環境負荷型の社会構築に貢献することができます。また、過酷な環境で使用される構造物の補修がいつ、どの程度必要なのかを推測することもでき、安全性確保の点でも重要な技術といえます。

Q3

相平衡モデルとはなんですか？物質移動モデルと組み合わせた劣化シミュレーションにはどんな利点があるのでしょうか？

A3

相平衡モデルとは、ある系に存在する成分が、与えられた条件(温度、pH、酸化還元状態など)において、どのような化学種や固相として存在し、それらの量がどの位なのかを、平衡論に基づいて計算するモデルのことです。コンクリートの空隙水中に溶存するイオン、固相を構成する各種水和物、これらの種類や量は平衡論に従って変化します。この時、イオンが空隙水中を移動する場合でも、イオンは水和物と常に相平衡を保ち、両者の間には物質のやり取りが生じていると考えることができます。このような物質のやり取りは、イオンの移動に大きな影響を及ぼします。したがって、物質移動モデルに相平衡モデルを組み合わせることには、コンクリート内部で生じているイオンと水和物間の相互作用を、理論に基づいて定量的に評価できるといふ利点があります。こうすることで、より実現象に則した劣化シミュレーションが可能になるのです。

しかし、当然ながら実際のコンクリート構造物の空隙水中には、塩化物イオンのみならず種々の共存イオンが存在しています。これらのイオンは相互に影響を及ぼしあうことに加えて、各種水和物と物質のやり取りが行われています。こうしたイオン-水和物間の相互作用、すなわち相平衡はイオンが空隙水中を移動する間にも生じているため(図-2)、劣化シミュレーションにおいて物質の移動を精度良く予測するには、相平衡モデルを組み合わせた物質移動のモデル化が不可欠といえます。また、実環境の構造物では、塩害だけではなく、中性化などの劣化も複合して起こることが一般的であり、空隙水や固相の組成変化はより複雑化しているといえます。一方、塩害あるいは中性化のみを対象とした個々の劣化シミュレーションでは、こうした複合劣化で生じているコンクリート内部の複雑な組成変化を再現することはできません。したがって、実現象に基づいた構造物の寿命予測を行うためには、劣化因子となる元素だけでなく、共存する様々なイオンも解析の対象とし、それらイオンと水和物との相平衡についても考慮した包括的なシミュレーションが必要となります。

解説

本シミュレーションで用いる相平衡モデルは、セメント硬化体中で生じている様々な化学的作用を平衡論に基づいて計算します。様々な化学的作用とは、コンクリート中の液相と固相との間の物質授受、すなわち、各水和物の溶解、析出や水和物表面への吸着、取着反応などです。本モデルは、これらの反応を平衡論に基づいてコンピューター計算により再現し、コンクリート空隙水中のイオンの分布や水和物の生成状態などを予測することができます。こうした相平衡モデルを、劣化シミュレーションの物質移動モデルに組み込むとどのような利点が得られるのか、ここでは従来の劣化シミュレーションモデルと比較しながら、塩害劣化を例に説明します。

上述したように、塩害は、コンクリート構造物中の塩化物イオンと密接に関連し、特に海洋環境下のコンクリート構造物にとっては、その経年劣化を考える上で最も重要な現象の一つです。そのため、コンクリート内部への塩化物イオンの浸透予測に関する研究は古くから行われています。こうした塩分浸透の研究の多くは、塩化物イオンの浸透だけを解析の対象としていました。したがって、これらの研究で提案されている方法では、空隙水中の塩化物イオンの濃度勾配による移動のみしか計算されていません。

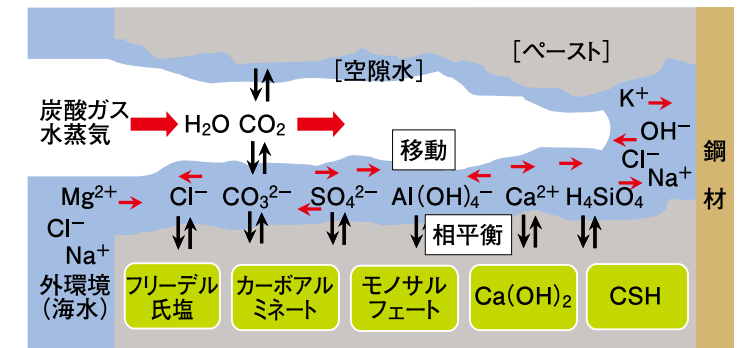


図-2 コンクリート構造物中での物質移動と相平衡の概念図

このような現象に対して当社では、Johannesson博士(デンマーク工科大学准教授)が開発した複数種イオンの解析が可能なマルチスピーシーズ物質移動モデル²⁾に、当社にて開発したセメント硬化体の相平衡モデルを組み合わせた先端物質移動モデルを構築し、より実現象に則したシミュレーションを可能としました。

このように、相平衡モデルを組み合わせることには、コンクリート内部で生じているイオンと水和物間の相互作用を、理論に基づいて定量的に評価できるといふ利点があります。こうすることで、より実現象に則した劣化シミュレーションが可能になるのです。

シミュレーションの一例として、セメント硬化体への海水成分の浸透について本モデルで解析した結果を図-3に示しました。ここでの解析対象は、海洋構造物の海中浸せき部位（浸せき期間9.5年）としています。また、比較として、解析対象部位から採取したコンクリートコアのEPMA測定結果（実測値）についても図-4に示しました。今回のシミュレーションでは、硫酸塩、マグネシウム塩が顕著に、炭酸塩についてはごくわずかに表面付近に浸透した結果が得られました。これらはそれぞれ、海水中の SO_4^{2-} 、 Mg^{2+} 、 HCO_3^{2-} の浸透により固相内に生成したEttringite、Brucite、Calciteに由来しています。実際に、完全に水没した海洋構造物には、上記の3種の塩類が表層部に析出することが知られており、この計算結果は、本モデルが海洋構造物に生じる実現象を再現することができることを示しています。また、図-4に示したのは、EPMAによって測定した海洋構造物のコンクリートコア内部の元素濃度プロファイルですが、実際の海中浸せき部位においても、海水成分の浸透により、表層部に硫酸塩、マグネシウム塩および炭酸塩が生成していることが認められました。さらに、Cl濃度のプロファイルを他の元素のものと比較すると、シミュレーション、EPMA測定結果の両方で、これら3種の塩類の生成領域では、Cl濃度が低下していることが確認できます。このように、本モデルでは、物質移動モデルに相平衡を組み込むことによって、海水の浸透作用によって生じる固相、液相内の複雑な挙動について、精度良く実現象を再現することが可能といえます。

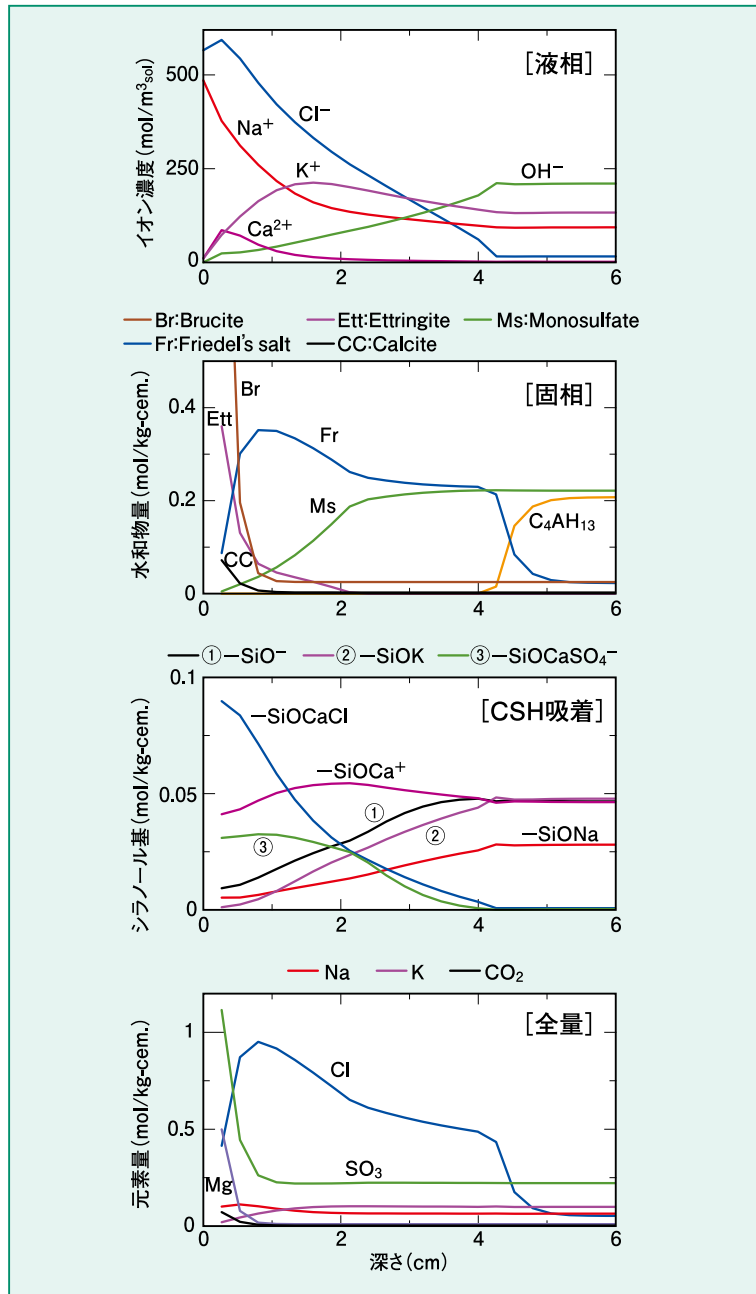


図-3 液相・固相の組成および各元素(全量)プロファイルの計算結果(海洋構造物)³⁾

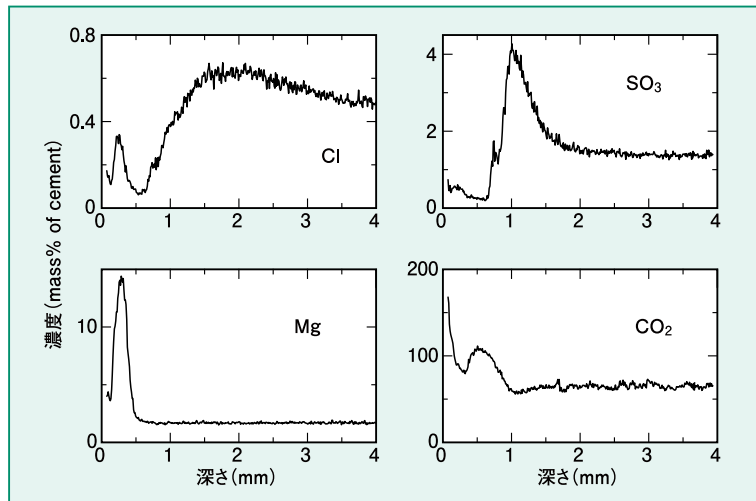


図-4 EPMAにより測定されたコンクリートコア内部の元素濃度プロファイル³⁾

Q4

モデルの適用範囲は?

A4

従来のモデルに比べ様々な環境条件や劣化現象に対応可能であり、コンクリート構造物の配合、セメント種類や材料に捉われない高い汎用性を有しています。

解説

相平衡と物質移動モデルを組み合わせたことの副次的効果として、本シミュレーションは多様な劣化現象に対応できることが挙げられます。上述したように本シミュレーションでは、マルチスピーシーズ物質移動モデルと相平衡モデルを連成させた構成によりセメント硬化体の固液相組成変化の計算を行っていることから、その適用範囲は、例として示した塩害だけにとどまらず、中性化やアルカリ骨材反応など様々な劣化予測に対応可能です。加えて、塩害と中性化が同時に発生したケースなど複合劣化の場合にも対応することができます。

本モデルでのシミュレーション時に必要な入力条件の各項目および解析手順

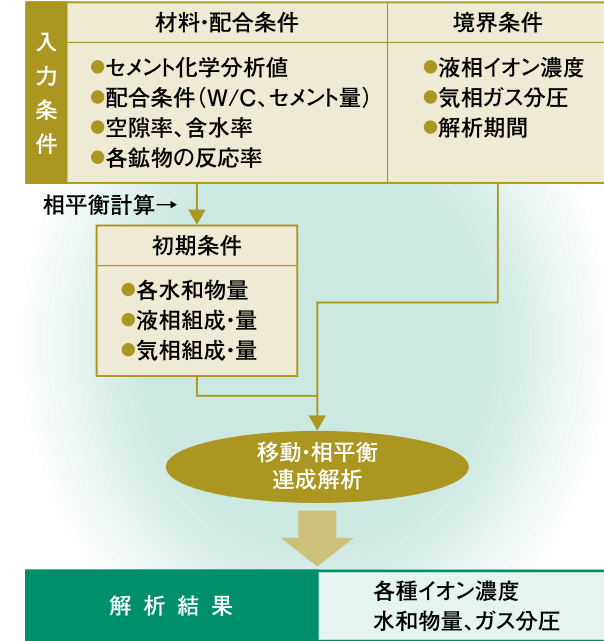


図-5 必要となる入力条件と解析のフロー

を図-5に示します。本モデルでは、相平衡モデルによって、初期条件として必要な固液相組成が、セメントの化学分析値や鉱物の反応率、コンクリートの配合から算定されます。すなわち、本モデルではセメントの種類に限定されることなく、各種のポルトランドセメントやスラグ、フライアッシュを混合したセメントなどについて、様々な配合条件で使用するというような多様なケースについても、原理的には対応可能です。また、環境条件についても、上述の海洋構造物でのシミュレーション例のように、複数種イオンの境界条件の設定が可能であり、さらに、本モデルでは気相も解析対象となっているため、気相組成の設定(二酸化炭素など)も含めた、任意の環境条件への対応が可能といえます。

今後は、本モデルの利点や特徴を活かし、当社グループの各種分析技術や商材、工法を適切に組み合わせることで、これまでにない劣化シミュレーションとして、コンクリートソリューション、コンサルティングへ適用されることを期待しています。

太平洋セメント株式会社中央研究所
研究開発1部セメント化学チーム
北澤 健資、細川 佳史

【参考文献】
1) <http://www.mlit.go.jp/hakusyo/mlit/h17/hakusho/h18/index.html>: 国土交通省ホームページ, 平成17年度国土交通白書
2) Johannesson, B.:Transport and Sorption Phenomena in Concrete and Other Porous Media, Ph.D thesis, Lund university, 2000
3) 細川佳史他, 熱力学的相平衡を考慮したMulti-species物質移動モデルの構築, コンクリート工学年次論文集, vol.29, No.1, 957-962, 2007