

結晶質岩を対象とした長期岩盤挙動評価のための
理論的研究
(委託研究)

Theoretical Study on Crystalline Rock for Estimating Long-Term Behavior
(Contract Research)

市川 康明* 瀬野 康弘* 平野 享 中間 茂雄
松井 裕哉

Yasuaki ICHIKAWA*, Yasuhiro SENO*, Toru HIRANO, Shigeo NAKAMA
and Hiroya MATSUI

地層処分研究開発部門
結晶質岩地質環境研究グループ
Crystalline Environment Research Group
Geological Isolation Research and Development Directorate

November 2008

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail: ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail: ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2008

結晶質岩を対象とした長期岩盤挙動評価のための理論的研究
(委託研究)

日本原子力研究開発機構 地層処分研究開発部門 東濃地科学研究ユニット
市川 康明*1、瀬野 康弘*2、平野 享※、中間 茂雄+1、松井 裕哉

(2008 年 9 月 18 日受理)

岩盤を構成する岩石は、クリープや応力緩和のような時間依存性挙動を示すことが知られている。高レベル放射性廃棄物の地層処分時には、建設時および操業時には言うまでもなく、坑道埋め戻し後も数千年から数万年の超長期にわたる坑道の安定性が要求される。このため、超長期にわたる岩石の時間依存性挙動を把握することは、そのような坑道の長期安定性を評価する上で重要な課題である。

そこで本研究はこの課題に対し、クリープや応力緩和の状態にある岩石中のマイクロクラック進展に着目し、動分子力学や均質化理論、強不連続解析を用いて、その進展のメカニズムを計算によって解析する手法（理論的方法）でアプローチしている。そして、これに基づく岩盤構造物の長期挙動予測評価手法を開発するとともに、その検証を超深地層研究所計画の研究坑道を利用した研究段階（第3段階）で行うことを目的としている。

本報告書は、2007 年度に実施した研究をまとめたものである。

第1章では、研究内容とその背景を概括した。続いて、第2章では、長期挙動予測評価手法の開発において解明が必要と考えられる石英の圧力溶解反応現象について、現象の理論的取り扱いと均質化法をベースにした数値解析手法を考案し、その適用例としてベントナイトに含まれる石英粒子の溶解を解析している。次の、第3章と第4章は、第3段階の研究で評価手法の検証が行なえるよう、主要な研究対象とする土岐花崗岩をモデルとする基礎的な検討を行ったものである。このうち、第3章では、応力緩和状態下の土岐花崗岩に認められる微視的変形状況を約1ヶ月まで顕微鏡で観察し、鉱物表面の変形から内部のひずみを計算している。また、第4章では、微視・巨視問題を同時に扱うことのできる均質化解析を用いて土岐花崗岩の巨視的な力学的挙動を再現するとともに、微視問題には強不連続解析を導入して土岐花崗岩内のマイクロクラック進展を再現している。

本報告書は名古屋大学が日本原子力研究開発機構との委託研究により実施した研究成果に関するものである。

東濃地科学センター（駐在）：〒509-6132 岐阜県瑞浪市明世町山野内 1-64

*1 名古屋大学

*2 東急建設株式会社

※ 技術開発協力員

+1 地層処分基盤研究開発ユニット

Theoretical Study on Crystalline Rock for Estimating Long-Term Behavior
(Contract Research)

Yasuaki ICHIKAWA^{*1}, Yasuhiro SENO^{*2}, Toru HIRANO[※], Shigeo NAKAMA⁺¹
and Hiroya MATSUI

Tono Geoscientific Research Unit
Geological Isolation Research and Development Directorate
Japan Atomic Energy Agency
Akeyo-cho, Mizunami-shi, Gifu-ken

(Received September 18, 2008)

The Japan Atomic Energy Agency (JAEA) is conducting the Mizunami Underground Research Laboratory (MIU) Project in order to develop comprehensive geological investigation and engineering techniques for deep underground applications (e.g. repository of HLW). The purpose of this study is to contribute to the evaluation of the mechanical stability of a research drift and to plan the future studies.

Rock shows time-dependent behavior such as creep/relaxation. For the shaft and gallery of the geological disposal for the radioactive waste, the mechanical stability over a period of thousands of years is demanded not only during construction and operation but also after back-filling. So, to understand the time-dependent behavior of rock is very important for evaluating the long-term mechanical stability.

In this research, we aim to clarify a long-term behavior of crystalline rocks, and performed the following subjects: 1) Theory establishment of pressure dissolution of quartz and a homogenization analysis for quartz dissolution. 2) Uniaxial and stress relaxation tests under observation of a con-focal laser scanning microscope (CLSM) by using granite specimens of MIU. 3) Strong discontinuity analysis introduced in a micro-scale problem of the multi-scale homogenization analysis for applying Toki granite samples.

This report describes the results of the works in the fiscal year 2007. In Chapter 1, we described the overview and background of this study. In Chapter 2 a reaction theory of pressure dissolution of quartz was proposed and by using a homogenization analysis the dissolution of quartz in bentonite was simulated by a modified diffusion model. In Chapter 3 CLSM was used to acquire clearly focused three-dimensional images of granite specimens of MIU for stress relaxation tests, and observed the change of micro-scale structure including the mineral configuration under applying compression stress. The local strain distributions suggest that a shearing mode is dominant in the granite samples. In Chapter 4 a strong discontinuity concept is introduced in the micro-scale problem of the multi-scale homogenization analysis, and Toki granite sample problems were solved.

Keywords: Crystalline Rock, Time-dependent Behavior, Strong Discontinuity Analysis, Homogenization Analysis

This work was performed by Nagoya University under contract with Japan Atomic Energy Agency.

*1 Nagoya University

*2 Tokyu Construction Co., LTD.

※ Collaborating Engineer

+1 Geological Isolation Research Unit

目 次

1. 序論	1
2. 石英の溶解拡散に関する均質化解析	3
2.1 石英の溶解機構と溶解速度式	3
2.2 微視的スケールの拡散方程式	4
2.3 微視的・巨視的スケールの拡散理論	6
2.4 ベントナイト中の石英溶解の均質化解析	10
3. 土岐花崗岩の一軸試験並びに応力緩和試験	16
3.1 岩石試料と試験装置および試験方法	16
3.1.1 岩石試料	16
3.1.2 試験システム	17
3.1.3 試験方法	20
3.2 試験結果および考察	21
3.2.1 一軸圧縮試験	21
3.2.2 応力緩和試験	21
3.2.3 応力緩和現象における微視的構造の変化の観察	22
3.2.4 平均ひずみと偏差ひずみの算定	26
4. 強不連続解析を導入した均質化法による土岐花崗岩のマイクロクラック進展解析	30
4.1 強不連続解析	30
4.1.1 強不連続解析	30
4.1.2 等方損傷モデルの導入	31
4.1.3 応力の有界性	32
4.1.4 連続関数近似による不連続変位場の修正	33
4.2 均質化理論による強不連続解析	34
4.2.1 均質化理論の概念	34
4.2.2 釣り合い問題	35
4.2.3 釣り合い式の漸近展開	36
4.3 有限要素法の適用	40
4.3.1 微視的スケールの方程式の有限要素近似	40
4.3.2 巨視的スケールの方程式の有限要素近似	42
4.3.3 デルタ関数の近似と積分規則	43
4.3.4 不連続面の傾角 θ_e と単位法線ベクトル n_e	43
4.4 土岐花崗岩を対象とした一軸圧縮実験の数値解析による再現	45
4.4.1 解析モデルの作成	45
4.4.2 数値解析で得られた応力-ひずみ関係	47
4.4.3 数値解析で得られたマイクロクラックの進展状況	48
5. まとめ	50
参考文献	52

CONTENTS

1. Introduction	1
2. Homogenization analysis applied to quartz dissolution	3
2.1 Dissolution of quartz	3
2.2 Diffusion equation in micro scale	4
2.3 Theory of diffusion in micro/macro scale	6
2.4 Application to bentonite clay	10
3. Uniaxial compression or relaxation test on Toki granite	16
3.1 Specimens, testing equipments and test process	16
3.1.1 Toki granite specimens	16
3.1.2 Testing equipments	17
3.1.3 Test process	20
3.2 Result and discussion	21
3.2.1 Uniaxial compression test	21
3.2.2 Relaxation test	21
3.2.3 Observation of micro-scale structures during relaxation tests	22
3.2.4 Surface deformation and local strain distribution	26
4. Homogenization analysis applied to micro-crack growth in Toki granite	30
4.1 Strong discontinuities in solid mechanics analysis	30
4.1.1 Discontinuous displacement field and discontinuous strain field	30
4.1.2 Isotropic continuum damage model	31
4.1.3 Stress boundedness	32
4.1.4 Regularization of discontinuous displacement field	33
4.2 Strong discontinuity analysis under homogenization procedure	34
4.2.1 Homogenization scheme	34
4.2.2 Field equations	35
4.2.3 Asymptotic expansion of field problem	36
4.3 Finite element method	40
4.3.1 Finite element approximation to the micro-scale equation	40
4.3.2 Finite element approximation to the macro-scale equation	42
4.3.3 Regularization of δ -function and integration rule	43
4.3.4 Determination of inclination angle θ_e and normal n_e	43
4.4 Application to Toki granite	45
4.4.1 Modeling	45
4.4.2 Simulated stress-strain curve	47
4.4.3 Simulated micro-crack growth	48
5. Summary	50
Reference	52

図目次

図 2.1	石英の溶解機構	4
図 2.2	粘土鉱物の微視的な吸脱着領域の構造	5
図 2.3	入れ子構造を有する多孔質体	7
図 2.4	石英溶解量の均質化解析(HA)の概念図	10
図 2.5	ベントナイト粘土の一次元モデル	11
図 2.6	ユニットセルモデル	12
図 2.7	水酸基濃度(pH)の変化($t=20[\text{days}]$, $T=20[^\circ\text{C}]$)	13
図 2.8	水酸基濃度(pH)の変化($t=20[\text{days}]$, $T=70[^\circ\text{C}]$)	13
図 2.9	石英溶解速度($t=20[\text{days}]$, $T=20[^\circ\text{C}]$)	14
図 2.10	石英溶解速度($t=20[\text{days}]$, $T=70[^\circ\text{C}]$)	14
図 2.11	石英溶解量($t=20[\text{days}]$, $T=20[^\circ\text{C}]$)	15
図 2.12	石英溶解量($t=20[\text{days}]$, $T=70[^\circ\text{C}]$)	15
図 3.1	試料作成方法	16
図 3.2	試料模式図	17
図 3.3	試験システムの構成	17
図 3.4	試験システムの外観	18
図 3.5	共焦点光学系	18
図 3.6	載荷装置と試料	20
図 3.7	OLS1100 の観察プラットフォームに設置された載荷装置	20
図 3.8	一軸圧縮試験結果	21
図 3.9(a)	緩和応力-時間関係	22
図 3.9(b)	緩和応力-時間関係	22
図 3.10	供試体 A2-1 の初期状態と変位計測メッシュ	24
図 3.11	供試体 A2-2 の初期状態と変位計測メッシュ	24
図 3.12	供試体 A1-3 の初期状態と変位計測メッシュ	25
図 3.13	供試体 A1-3 の低倍率写真(倍率 10)	25
図 3.14	供試体 A2-1 の平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ の分布	27
図 3.15	供試体 A2-1 の偏差ひずみ ε' の分布	27
図 3.16	供試体 A2-2 の平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ の分布	28
図 3.17	供試体 A2-2 の偏差ひずみ ε' の分布	28
図 3.18	供試体 A1-3 の平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ の分布	29
図 3.19	供試体 A1-3 の偏差ひずみ ε' の分布	29
図 4.1	物体内部の変位の不連続面	30
図 4.2	弾性・脆性材料に対する一次元の構成関係	32
図 4.3	不連続面 ϕ を含む微小領域 Ω_h	33

図 4.4	微視的な周期構造を有する材料とユニットセル	34
図 4.5	不連続面積積分規則	43
図 4.6	土岐花崗岩サンプルとポイントカウンター用メッシュ	45
図 4.7	土岐花崗岩のユニットセルモデル	46
図 4.8	D100 の材料定数等で計算した応力-ひずみ関係	47
図 4.9	D600 の材料定数等で計算した応力-ひずみ関係	47
図 4.10	D100 の材料定数等で計算したマイクロクラックの進展	48
図 4.11	D600 の材料定数等で計算したマイクロクラックの進展	49

表目次

表 2.1	水酸基の拡散係数	11
表 2.2	解析条件	11
表 2.3	ユニットセル:入力パラメータ	12
表 3.1	レーザー共焦点顕微鏡 OLS1100 システム	19
表 4.1	積分規則	43
表 4.2	土岐花崗岩の鉱物組成	46
表 4.3	各鉱物の材料定数	47

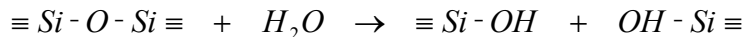
1. 序論

岩盤は様々な階層の不連続面群と非均質物質を内包した複合材料である。岩石レベルでみると、結晶質岩は個々の結晶と結晶境界およびマイクロクラックの集合体である。したがって、結晶質岩の変形・破壊に関わる力学挙動は、個々の結晶と結晶境界の微視的な挙動を理解すればよいと考えられる。

一方、岩石の長期挙動を考える上で基礎となる、クリープや応力緩和に代表される岩石の時間依存変形破壊挙動を引き起こすメカニズムは、これまで十分には理解されていなかった。具体的には、一定の応力・ひずみの中で変形・破壊が進行する現象、水浸下で、乾燥下とは異なる変形・破壊挙動を示し、強度が低下する現象などについて原因の理解が不足している。よって、その原因を探り、物理化学的な理論背景を明らかにすることは、岩石の長期挙動の評価において非常に重要であると考えられる。

そこで本研究では、結晶質岩を対象とし、長期挙動(時間依存変形・破壊挙動)のメカニズムを解明するため、(1)瑞浪超深地層研究所において採取した土岐花崗岩を用いたレーザー共焦点顕微鏡(CLSM)観察下における応力緩和試験、(2)石英の溶解拡散に関する均質化解析、(3)強不連続解析を導入した均質化法による土岐花崗岩のマイクロクラック進展解析を実施した。

結晶質岩は多くのケイ酸塩* 鉱物を含んでおり、超深地層研究所計画で主要な研究対象とする土岐花崗岩は、石英(SiO_2)・長石(アルミノケイ酸塩)・黒雲母(層状ケイ酸塩)といった造岩鉱物が集合したものである。これらケイ酸塩鉱物は、一般に強アルカリの条件下でなければ水に難溶である。しかしながら、一定以上の応力が作用すると、いわゆるシロキサン(siloxane)** が加水分解されて水に溶け出す¹⁾。その反応は、



と書かれる。水の供給量に応じてこの反応が制御されるのは、言うまでもない。

石英や長石等の鉱物が応力負荷条件下で溶解することによって岩石の時間依存変形・破壊挙動が生ずるのは、1)マイクロクラック先端部における応力集中に起因する場合、2)石英結晶等が接触した境界において圧力溶解反応を起こす場合、があると考えられる。これらはいずれも機械的作用と化学反応場が複合した連成現象である。この時に、温度場と浸透流場も重要な働きをしている。

第2章では、石英の圧力溶解反応現象についての理論的取り扱い並びに均質化法をベースにした数値解析法を開発し、ベントナイト中における水酸基の拡散に伴ってベントナイトに含まれる石英結晶が溶解する計算を実施している。

第3章では、土岐花崗岩のマイクロクラックの進展状況を応力緩和試験条件下で観察している。CLSMはレーザービームを対物レンズで微小なスポットに絞り、試料上を二次元的に走査し、試料からの反射光を検出器でとらえモニタ上に試料像を出力する顕微鏡である。このCLSMの観察下で花崗岩の応力緩和試験を実施し、花崗岩の微視的な破壊形態の詳細を観察している。すなわち、応力緩和試験装置をレーザー共焦点顕微鏡のステージ上に設置し、試料端に一定の変位を与

* ケイ酸塩(岩波・理化学辞典第5版)：一般式 $xM_2^I O \cdot u\text{SiO}_2$ で表わされる化合物。……天然に広く多量に存在し、造岩鉱物としてマントルおよび地殻の主成分であり、 M が $\text{Al}, \text{Fe}^{\text{II}}, \text{Ca}, \text{Mg}, \text{Na}, \text{K}$ などの塩が最も多い。……結晶構造は種類によって異なるが、基本的には4つの O が正四面体形4配位として Si に配位した SiO_4^{4-} またはそれらが O 共有で連なったポリ酸陰イオンが規則的に配列し、そのすきまに M のイオンが入ったイオン結晶である。

** シロキサン(岩波・理化学辞典第5版)：ケイ素、酸素、水素からなる化合物のうち $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 結合をふくむものの総称。

えて岩石亀裂の変化を観察・測定した。昨年度までの応力緩和試験では、試験方法の開発も目的であり、試行的に1供試体について1週間程度の緩和時間を設定していた。そのため、結果的には、試験の開始直後に認められる応力緩和が顕著に進む段階の途中で試験が終了し、応力緩和前後の状態を観察するものとして緩和時間が不十分である問題が残された。そこで本年度は同じく土岐花崗岩の供試体を用いるが、緩和時間を約1か月と、前回に比べて長期間に設定し実施している。

第4章では、花崗岩におけるマイクロクラックの生成・進展過程の計算による再現を行った。再現では、花崗岩の内部に岩体生成の過程で形成された無数の先在微細亀裂群が存在し、ここに荷重を加えると、微視的レベルではこれらの先在亀裂が進展・複合化し、結果的に巨視的亀裂が形成されるものと考えた。そこで、このような過程を計算で再現するために、**Oliver**による強不連続解析²⁾³⁾を均質化法に導入し、これを用いて、土岐花崗岩の結晶解析を基に作成した微視的モデルを対象とする微視的・巨視的解析を実施した。

2. 石英の溶解拡散に関する均質化解析

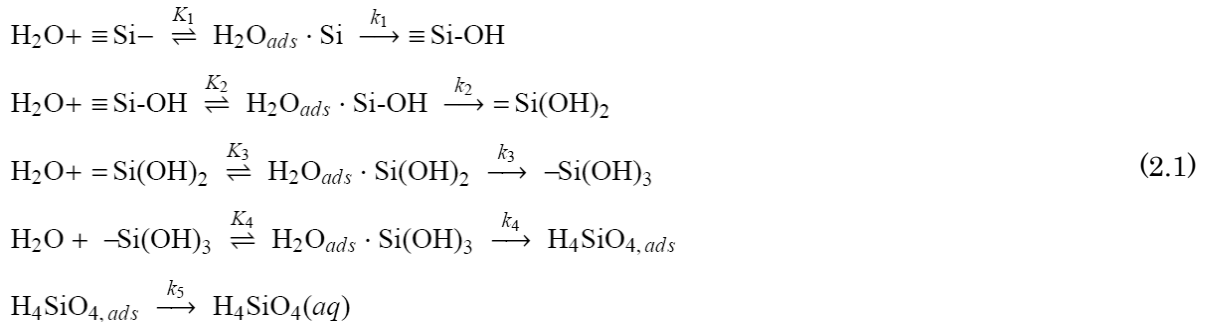
地下空洞の掘削では、湧水抑制や支保効果を得るためのセメント材料の注入・吹付け等が実施される。その際、セメント材料の使用は多量であることから、周囲の地下水にこれらセメント材料が由来の高アルカリ化を引き起こす可能性が考えられる。結晶質岩や人工遮水材料に多く含まれる石英は、高アルカリ環境下において溶解量・反応速度共に高い値を示すことが知られている。本章では、高アルカリ環境下における石英の動態、時間的变化を定量的に把握することを目的に、微視的現象と巨視的挙動を結びつける石英鉱物の溶解に関する均質化解析を実施した。

2.1 石英の溶解機構と溶解速度式

石英の溶解は吸着理論に関係している。石英の結晶構造は SiO_2 が組み合わされた四面体の三次元構造をしている。すなわち、 SiO_4 四面体の全て(4個)の酸素イオンが別々の四面体に共有され、立体網状に連結している。したがって、四面体間を結び付けているものは $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 基であることが分かる。

水分子はシリカの表面に吸着し、吸着した水分子はシリカ表面上もしくはその周辺で $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 基と反応することが可能である。その結果、 $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 基の結合が破壊されて溶解を引き起こすと考えられている。溶解速度は吸着した水分子による $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 基の加水分解速度に依存していると仮定できる。

詳細な溶解のメカニズムは、以下のように考えられている。すなわち、四面体の4つの結合一つずつが水によって加水分解されていき、すべての $\text{Si}-\text{O}-\text{Si}$ 基が外れた後、四面体は表面から脱着し、 $\text{H}_4\text{SiO}_4(\text{aq})$ として溶液に溶けることができる $\text{Si}(\text{OH})_4$ (または H_4SiO_4) になる(図 2.1)。このメカニズムを表すと式(2.1)となる。



ここで、 ads は吸着状態を表し、 (aq) は溶液中に溶解した状態を示している。

Dove⁴⁾は純粋な石英を用いて種々の温度条件、pH 条件における溶解実験を行った。実験結果からのフィッティングにより温度、pH の影響を考慮した石英の溶解速度式を式(2.2)のように提案している。

$$\begin{aligned}
 \text{Rate} = &\exp^{-10.7 \pm 1.1} \cdot T \exp\left(\frac{-66 \pm 2.3}{10^{-3}RT}\right) (\theta_{>\text{SiOH}})^1 \\
 &+ \exp^{4.7 \pm 0.8} \cdot T \exp\left(\frac{-82.7 \pm 2.1}{10^{-3}RT}\right) (\theta_{>\text{SiO}_{\text{tot}}^-})^{1.1 \pm 0.06}
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

ここで、 Rate [$\text{mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$] は石英の溶解速度、 T [K] は絶対温度、 R [$\text{kJ}/\text{K} \cdot \text{mol}$] は気体定数、 $\theta_{>\text{SiOH}}$ は表面錯体としての SiOH の表面被覆率、 $\theta_{>\text{SiO}_{\text{tot}}^-}$ は水酸基の活量である。

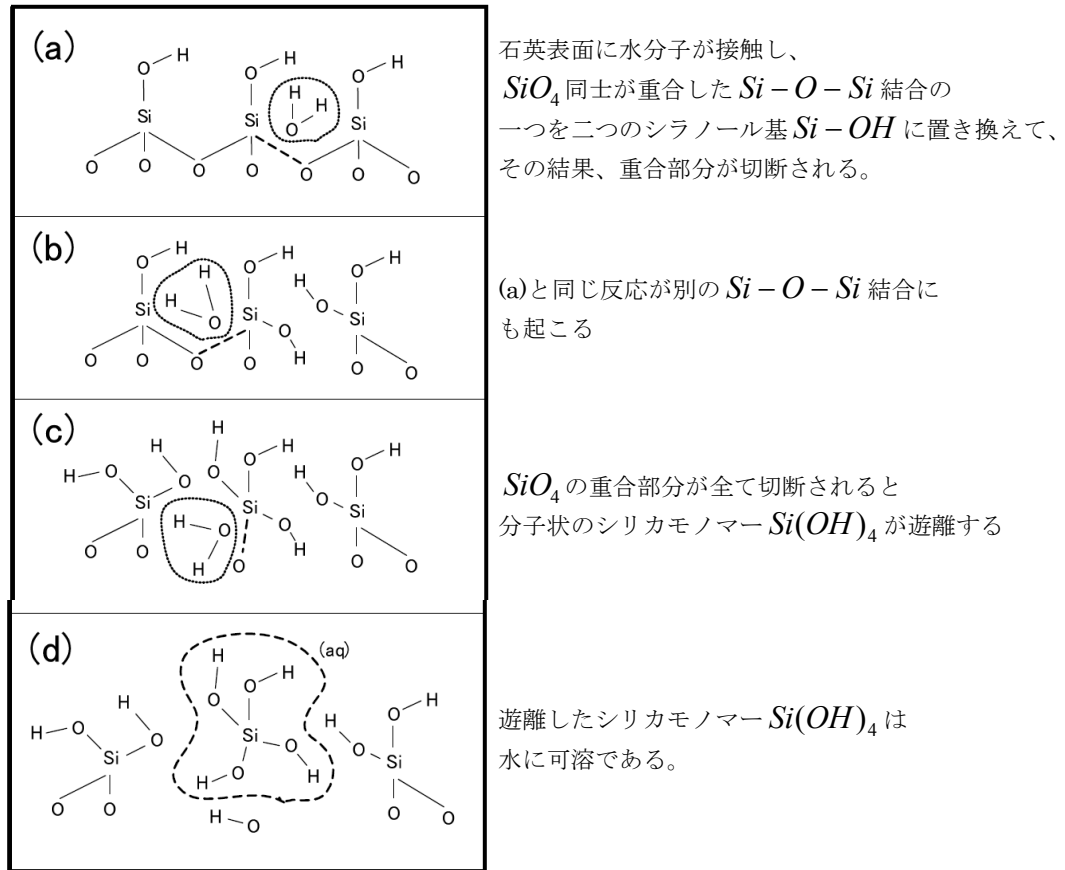


図 2.1 石英の溶解機構(Lasaga⁵⁾ Figure2.17 に加筆)

Dove⁴⁾の実験結果を基に $\theta_{>SiOH}$ を推定すると式(2.3)を得る。

$$\theta_{>SiOH} = -0.0114x^2 + 0.168x + 0.3648, \quad x = \ln(a_{OH^-}) \quad (2.3)$$

2.2 微視的スケールの拡散方程式

古典的な拡散解析では吸着現象は線形吸着等温式を介して固体相の濃度に変換され、分配係数 K_d で評価されて貯留係数に組み込まれる。実際の物理化学現象としての吸着は、このような「貯留」(mass storage)の形式で引き起こされているのではなく、「吸収源」(source)として働くと考えられるが、このような立場は、微視的現象と巨視的挙動を結びつける理論が一体となって初めて意味を持つ。なぜならば、従来の巨視的現象論に依る限り、実験的に吸着項を評価する手段が分配係数以外では困難であるからである。ここでは、非均質で多孔質な層状構造を有する粘土鉱物を具体例とし、分子動力学シミュレーションと結びつけた均質化法を論じ、新しい吸着現象理論について考えることにする。

多成分混合溶液の多孔質体中における拡散問題を考える。ただし、骨格系の変形についてはここでは考えないことにする。この場合は、流れの領域のみ取り扱えばよい。したがって、質量保存則が式(2.4)のように書ける(物体外からの質量流速による質量供給 q^m は無いものとした)。

$$\int_{\Omega_f} \left[\frac{\partial(\rho c_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho c_\alpha v_i^\alpha) - \dot{\gamma}_\alpha^* \right] dv - \int_{\Omega_{ad}} \dot{\gamma}_\alpha^{ad} dv = 0 \quad (2.4)$$

ここで、 c_α は α - 成分の質量パーセント濃度であり、 ρ は平均質量密度、 v^α は α - 成分の粒子速度、 $\dot{\gamma}_\alpha^*$ は化学反応等による α - 成分の湧出し、 Ω_f は液相領域、 Ω_{ad} はイオンが吸脱着される微視的領域、 $\dot{\gamma}_\alpha^{ad}$ は領域 Ω_{ad} における吸脱着に起因した α - 成分の湧出し(吸着は正、脱着は負)である。

溶液の平均流速 v 、 α - 成分の拡散質量流束(diffusing mass flux) j_α は式(2.5)および式(2.6)のように定義される。

$$v = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=1}^{n^*} \rho_\alpha v_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{n^*} c_\alpha v_\alpha \quad (2.5)$$

$$j_\alpha = \rho_\alpha v_\alpha - \rho v \quad (2.6)$$

さらに、式(2.4)の左辺第 2 項に、拡散に関する Fick の第一法則を適用すると、式(2.7)を得る。

$$\int_{\Omega_f} \left[\frac{\partial(\rho c_\alpha)}{\partial t} + v_i \frac{\partial(\rho c_\alpha)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{\beta=1}^{n^*} \rho D_{ij}^{\alpha\beta} \frac{\partial c_\beta}{\partial x_j} \right) - \dot{\gamma}_\alpha^* \right] dv - \int_{\Omega_{ad}} \dot{\gamma}_\alpha^{ad} dv = 0 \quad (2.7)$$

このようにして、領域 Ω_f では式(2.8)のような拡散方程式が得られる。

$$\frac{\partial(\rho c_\alpha)}{\partial t} + v_i \frac{\partial(\rho c_\alpha)}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{\beta=1}^{n^*} \rho D_{ij}^{\alpha\beta} \frac{\partial c_\beta}{\partial x_j} \right) - \dot{\gamma}_\alpha = 0 \quad \text{in } \Omega_f \quad (2.8)$$

ここで、

$$\dot{\gamma}_\alpha = \dot{\gamma}_\alpha^* + \dot{\gamma}_\alpha^{ad} \chi_{ad} \quad (2.9)$$

$$\chi_{ad} = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x} \in \Omega_{ad} \\ 0 & \text{if } \mathbf{x} \notin \Omega_{ad} \end{cases} \quad (2.10)$$

であるとした。

図 2.2 に模式化して示したような飽和粘土鉱物周辺の吸着・拡散機構について考える。2 層の四面体シートの中に八面体シートを挟み込んだ 2:1 型鉱物であるスメクタイト鉱物では、端面で陽イオンを吸着し、層間では陽イオンはイオン種によって異なった水和構造を作りながら拡散することが、分子動力学シミュレーションの結果などから明らかにされてきた⁶⁾。

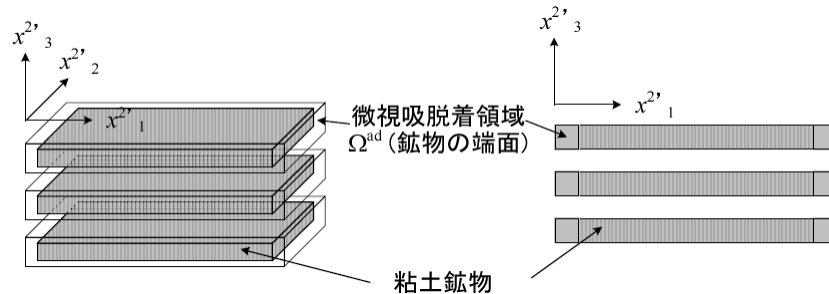


図 2.2 粘土鉱物の微視的な吸脱着領域の構造

n^* - 種類の化学種を含む溶液中での α - 番目の化学種に対する粘土鉱物端面領域 Ω_{ad} における(化学)吸着の条件は式(2.11)のように書ける。

$$\dot{\gamma}_\alpha^{ad} = \begin{cases} \sum_{\beta=1}^{n^*} s_{\alpha\beta}(c_\beta^l - c_\beta), & \text{if } c_\beta < c_\beta^l \\ 0, & \text{if } c_\beta \geq c_\beta^l \end{cases} \quad \text{in } \Omega_{ad} \quad (2.11)$$

$S_{\alpha\beta}$ は α -化学種に対する β -化学種の吸着係数であり、水素イオン濃度 pH 等の関数となる。また、 c_β^l は吸着限界濃度を表し、これも水素イオン濃度 pH 等の関数となる。

層間表面 Γ_i では吸着(主に、物理吸着)が起こる場合と、吸着が起こらずに単に拡散が遅延される場合がある。吸着が起こる場合は、上記の端面領域 Ω_{ad} と同様の吸着条件式を導入すればよい。吸着が起こらない場合は、 $\dot{\gamma}_\alpha^{ad}=0$ である。また、この層間表面近傍の 1 分子層程度の領域 Ω_{sd} では表面拡散が起きていると考えられるので、図 2.2 の局所座標系 $\mathbf{x}^{2'}$ に対して拡散行列が式 (2.12) のように書ける。

$$(D_{ij}^{\alpha\beta})_{\text{local}} = \begin{pmatrix} D_s^{\alpha\beta} & 0 & 0 \\ 0 & D_s^{\alpha\beta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{in } \Omega_{sd} \quad (2.12)$$

ここで、 $D_s^{\alpha\beta}$ は局所座標系 $\mathbf{x}^{2'}$ における表面拡散係数であり、分子動力学シミュレーションの結果などから決められる。層間では拡散層 Ω_{sd} 以外の領域については拡散係数を 0 とする。

以下では簡単のために、 α -成分と β -成分間の相互作用効果が等しい($D_{ij}^{\alpha\beta} = D_{ij}\delta_{\alpha\beta}$)とした上で 1 種類の化学種のみを取り扱うことにし($\alpha=1$)、濃度を $c^\varepsilon = c_\alpha$ 、湧出しを $\rho f^\varepsilon = \dot{\gamma}_\alpha$ とする。ここで、上添字 ε は当該関数がユニットセルのスケールで変化することを意味している。この場合、溶液の非圧縮性条件($\rho=\text{constant}, \partial v_i^\varepsilon / \partial x_i = 0$)の下、式(2.13)から(2.17)までの微分方程式系が得られる。

支配方程式

$$\frac{\partial c^\varepsilon}{\partial t} + v_j^\varepsilon \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x_j} \right) - f^\varepsilon = 0 \quad \text{in } \Omega \quad (2.13)$$

境界条件

$$\text{第 1 種 (Dirichlet) 境界: } c^\varepsilon(\mathbf{x}, t) = \bar{c}^\varepsilon(t) \quad \text{on } \partial\Omega_c \quad (2.14)$$

$$\text{第 2 種 (Neumann) 境界: } -D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x_j} n_i = \bar{q}(t) \quad \text{on } \partial\Omega_q \quad (2.15)$$

微視的な吸脱着条件

$$\dot{\gamma}_\alpha^{ad} = \begin{cases} s(c^l - c^\varepsilon), & \text{if } c^\varepsilon < c^l \\ 0, & \text{if } c^\varepsilon \geq c^l \end{cases} \quad \text{in } \Omega_{ad} \quad (2.16)$$

初期条件

$$c^\varepsilon(\mathbf{x}, t=t_0) = c_0^\varepsilon(\mathbf{x}) \quad (2.17)$$

2.3 微視的・巨視的スケールの拡散理論

入れ子構造を有する多孔質体の巨視的問題と微視的問題を考える(図 2.3)。この多孔質媒体では液体相 Ω_f 、固体相 Ω_s 、固液境界 Γ および微視的問題における流体部分の周期境界 Γ_f が定義されている。

均質化法の理論に従って、元の座標系 $\mathbf{x}$ に対し巨視的場の座標系 $\mathbf{x}^0$ と微視的場の座標系 $\mathbf{x}^1$ を式(2.18)のように導入する。

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) \quad (2.18)$$

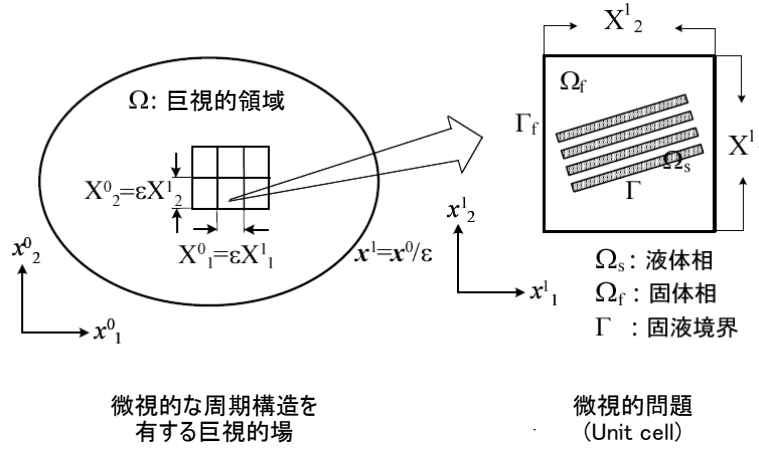


図 2.3 入れ子構造を有する多孔質体

両座標系は、式(2.19)の関係で結ばれているとする。

$$\mathbf{x}^1 = \frac{\mathbf{x}^0}{\varepsilon} \quad (2.19)$$

ε は微小パラメータである。 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限を考えると、微分は式(2.20)のように変更される。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i^0} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x_i^1} \quad (2.20)$$

いま、濃度関数 $c^\varepsilon(\mathbf{x}, t)$ を式(2.21)のように摂動展開する。

$$c^\varepsilon(\mathbf{x}, t) = c^0(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, t) + \varepsilon c^1(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, t) + \varepsilon^2 c^2(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, t) + \dots \quad (2.21)$$

ここで、 c^i は $\mathbf{x}^1$ に関して “ X^1 -periodic” な関数である。すなわち、 $\mathbf{x}_i^1$ 方向のユニットセルの大きさを X_i^1 として、式(2.22)が成り立つ。

$$c^i(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1 + \mathbf{X}^1, t) = c^i(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, t) \quad (2.22)$$

微視的領域 Ω_{ad} における微視的な吸脱着現象を表現するために、通常ソース項 $f^0(\mathbf{x}^0)$ の他に微視的吸脱着項(micro-sorption term) $\Gamma_i(\mathbf{x}^1)$ を、式(2.23)のように導入する。

$$f^\varepsilon = f^0(\mathbf{x}^0) + \varepsilon^{-1} \dot{\gamma}^{ad}(\mathbf{x}^1, t), \quad \dot{\gamma}^{ad}(\mathbf{x}^1, t) = \Gamma_i(\mathbf{x}^1) \frac{\partial c^0}{\partial x_i^0} \quad (2.23)$$

式(2.20)と(2.21)から濃度関数の微分が

$$\begin{aligned}\frac{\partial c^\varepsilon}{\partial x_j^0} &= \left(\frac{\partial}{\partial x_j^0} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x_j^1} \right) (c^0 + \varepsilon c^1 + \varepsilon^2 c^2 + \dots) \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial c^0}{\partial x_j^1} + \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) + \varepsilon \left(\frac{\partial c^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^2}{\partial x_j^1} \right) + \dots\end{aligned}$$

となることに留意して支配方程式(2.13)を摂動展開し、 ε の各項について整理すると式(2.24)が得られる。

$$\begin{aligned}& \left(\frac{\partial c^0}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial c^1}{\partial t} + \varepsilon^2 \frac{\partial c^2}{\partial t} + \dots \right) \\ & + \left[\frac{1}{\varepsilon} v_j^\varepsilon \frac{\partial c^0}{\partial x_j^1} + v_j^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) + \varepsilon v_j^\varepsilon \left(\frac{\partial c^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^2}{\partial x_j^1} \right) + \dots \right] \\ & - \left[\frac{1}{\varepsilon^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_j^1} \left(D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial c^0}{\partial x_j^1} \right) \right\} + \frac{1}{\varepsilon} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i^0} \left(D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial c^0}{\partial x_j^1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i^1} \left(D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) \right) \right\} \right. \\ & \left. + \left\{ \frac{\partial}{\partial x_i^0} \left(D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_i^1} \left(D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^2}{\partial x_j^1} \right) \right) \right\} + \varepsilon \{ \dots \} + \dots \right] \\ & - \left[f^0(\mathbf{x}^0) - \frac{1}{\varepsilon} \Gamma_i(\mathbf{x}^1) \frac{\partial c^0}{\partial x_i^0} \right] = 0\end{aligned} \tag{2.24}$$

$\boxed{} O(\varepsilon^{-2})$ 項
 $\boxed{} O(\varepsilon^{-1})$ 項
 $\boxed{} O(\varepsilon^0)$ 項

$\varepsilon \rightarrow 0$ の極限において上記の ε の各項は 0 に収束する必要があるので、以下に示す(1)から(3)の各項が求まる。

(1) $O(\varepsilon^{-2})$ 項:

$$\frac{\partial}{\partial x_i^1} \left(D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial c^0}{\partial x_j^1} \right) = 0 \tag{2.25}$$

これは結局、式(2.26)であることを示す。

$$c^0(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, t) = c^0(\mathbf{x}^0, t) \tag{2.26}$$

すなわち、摂動展開した第 1 項 c^0 は微視的座標 $\mathbf{x}^1$ には影響されず、巨視的座標 $\mathbf{x}^0$ のみの関数となることを意味する。

(2) $O(\varepsilon^{-1})$ 項: 微視方程式の導出

$$v_j^\varepsilon \frac{\partial c^0}{\partial x_j^1} - \frac{\partial}{\partial x_i^0} \left(D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial c^0}{\partial x_j^1} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i^1} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) \right\} - \Gamma_i(\mathbf{x}^1) \frac{\partial c^0}{\partial x_i^0} = 0 \tag{2.27}$$

となるが、式(2.26)の条件を代入すると式(2.28)となる。

$$\frac{\partial}{\partial x_i^1} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) \right\} + \Gamma_i(\mathbf{x}^1) \frac{\partial c^0}{\partial x_i^0} = 0 \tag{2.28}$$

ユニットセル内においては $c^0(\mathbf{x}^0, t)$ は一定であるので、上式を $\partial c^0 / \partial x_i^0$ で正規化(normalize)するために式(2.29)を考える。

$$c^1(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1, t) = -N_1^k(\mathbf{x}^1) \frac{\partial c^0(\mathbf{x}^0, t)}{\partial x_k^0} + C_1(\mathbf{x}^0, t) \quad (2.29)$$

ここで、 N_1^k は特性関数(characteristic function)と呼ばれる。式(2.29)を式(2.28)に代入して式(2.30)を得る。

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_i^1} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\delta_{kj} - \frac{\partial N_1^k}{\partial x_j^1} \right) \right\} + \Gamma_k \right] \frac{\partial c^0}{\partial x_k^0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial x_i^1} \left[D_{ij}^\varepsilon \left(\delta_{kj} - \frac{\partial N_1^k}{\partial x_j^1} \right) \right] + \Gamma_k = 0 \quad (2.30)$$

式(2.30)が N_1^k を未知関数とするユニットセル問題の微視的スケール方程式(micro scale equation)である。境界条件は式(2.22)で示した周期条件である。なお、式(2.30)を周期条件に留意して弱形式化、発散定理を適用すると式(2.31)が得られる。

$$\int_{\Omega_1} D_{ij}^\varepsilon \frac{\partial N_1^k}{\partial x_j^1} \frac{\partial V_k}{\partial x_i^1} d\mathbf{x}^1 - \int_{\Omega_1} \left(D_{ik}^\varepsilon \frac{\partial V_k}{\partial x_i^1} + \Gamma_k V_k \right) d\mathbf{x}^1 = 0 \quad (2.31)$$

ここで、 $V_k(\mathbf{x}^1)$ は“ $\mathbf{X}^1$ -periodic” な任意ベクトル関数である。したがって、ユニットセルにおける微視的問題は式(2.22)で示した周期条件の下で、式(2.31)で示した弱形式の微視的スケール方程式を解いて N_1^k を求めることに帰着される。なお、式(2.16)で示した微視的吸脱着条件を考慮する場合は、微視的場を巨視的場から完全に独立させることができないので、非線形の繰返し計算が必要になる。これについては後で述べる。

(3) $O(\varepsilon^0)$ 項: 大域方程式の導出

$$\frac{\partial c^0}{\partial t} + v_j^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i^0} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) \right\} - \frac{\partial}{\partial x_i^1} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^2}{\partial x_j^1} \right) \right\} - f^0 = 0 \quad (2.32)$$

が成り立つ。式(2.32)に平均化を施すと左辺第4項は発散定理により式(2.33)のようになる。

$$\frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} \frac{\partial}{\partial x_i^1} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^2}{\partial x_j^1} \right) \right\} d\mathbf{x}^1 = \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\partial\Omega_1} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^2}{\partial x_j^1} \right) \right\} n_i ds^1 = 0 \quad (2.33)$$

ここで、 c^1 および c^2 が“ $\mathbf{X}^1$ -periodic” な関数であり、 n_i はユニットセルの両側で反対の符号となるので、積分の値は零となった。なお、 $|\Omega_1|$ はユニットセルの体積を表す。式(2.32)に関してユニットセルの平均化を行うと式(2.34)のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} \frac{\partial c^0}{\partial t} d\mathbf{x}^1 + \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} v_j^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) d\mathbf{x}^1 \\ & - \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} \frac{\partial}{\partial x_i^0} \left\{ D_{ij}^\varepsilon \left(\frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial c^1}{\partial x_j^1} \right) \right\} d\mathbf{x}^1 - \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} f^0 d\mathbf{x}^1 = 0 \end{aligned} \quad (2.34)$$

これに特性関数を与える式(2.29)を代入すると式(2.35)を得る。ここでパラメータは式(2.36)と(2.37)で示される。

$$\frac{\partial c^0}{\partial t} + v_j^H \frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} - \frac{\partial}{\partial x_i^0} \left(D_{ij}^H \frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} \right) - f^H = 0 \quad (2.35)$$

$$D_{ij}^H \equiv \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} D_{ik}^e \left(\delta_{kj} - \frac{\partial N_1^j}{\partial x_k^1} \right) dx^1 \quad (2.36)$$

$$v_j^H \equiv \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} v_k^e \left(\delta_{kj} - \frac{\partial N_1^j}{\partial x_k^1} \right) dx^1, \quad f^H \equiv \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} f^0 dx^1 \quad (2.37)$$

式(2.35)が大域座標系 x^0 で表された全体構造物の大域方程式(macro scale equation)であり、 D_{ij}^H は均質化拡散係数である。なお、式(2.14)、(2.15)の境界条件を適用して式(2.35)を弱形式化すると式(2.38)のようになる。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_0} \frac{\partial c^0}{\partial t} w dx^0 + \int_{\Omega_0} v_j^H \frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} w dx^0 + \int_{\Omega_0} D_{ij}^H \frac{\partial c^0}{\partial x_j^0} \frac{\partial w}{\partial x_i^0} dx^0 - \int_{\Omega_0} f^H w dx^0 \\ = \int_{\partial\Omega_q} \bar{q} w ds^0 \quad \forall w(x^0, t) \quad (w = 0 \text{ on } \partial\Omega_c) \end{aligned} \quad (2.38)$$

したがって全体構造物における巨視的問題は、式(2.36)、(2.37)で与えられる均質化された拡散係数 D_{ij}^H 、流速 v_j^H 、湧出し f^H を用いて式(2.38)を解き、 c^0 を求めることに帰着される。局所濃度分布は、式(2.39)として近似的に決定することができる。

$$c^e(x, t) \simeq c^0(x^0, t) + \varepsilon c^1(x^0, x^1, t) = c^0(x^0, t) - \varepsilon N_1^k(x^1) \frac{\partial c^0(x^0, t)}{\partial x_k^0} \quad (2.39)$$

2.4 ベントナイト中の石英溶解の均質化解析

ここでは、2.3 で示した入れ子構造を有する多孔質体の例として、人工遮水材料として一般によく使用されるベントナイトを考える。高 pH 環境下における石英の溶解量を溶解速度式および均質化解析により求める。すなわち、ベントナイト内を拡散支配によって移行する水酸基(OH^-)とヨウ素イオン(I^-)の時間的変化を均質化解析(Homogenization Analysis: HA)によって求め、得られた水酸基の活量(a_{OH^-})と溶解速度式(2.2)から溶解量を時間ステップごとに求める(図 2.4)。これにより、石英溶解量の時間的変化を知ることができる。石英溶解量は式(2.2)から得られる溶解速度に石英の反応表面積をかけることによって求められる。

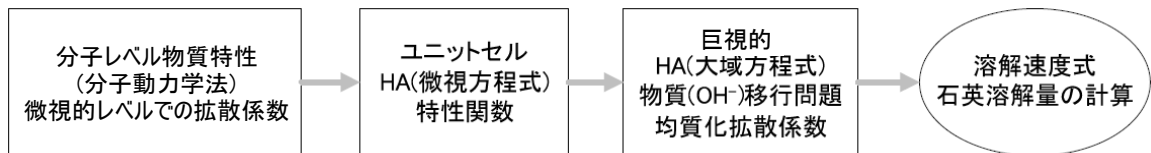


図 2.4 石英溶解量の均質化解析(HA)の概念図

ベントナイト粘土(質量比でスメクタイト粘土鉱物 50%、石英粒 50%)の供試体として図 2.5 に示した一次元モデルを考える。この粘土中を水酸基が拡散して石英溶解が起こる問題に対する数値解析を実施した。ここで水酸基の拡散係数は分子動力学シミュレーションの結果より表 2.1 のように得られている。解析条件を表 2.2 に示す。

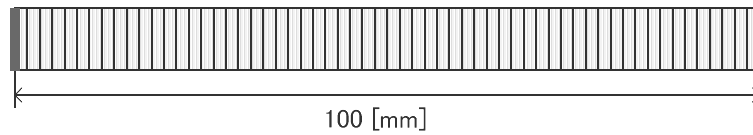


図 2.5 ベントナイト粘土の一次元モデル

表 2.1 水酸基の拡散係数(単位 : $\times 10^{-5}[\text{cm}^2/\text{s}]$)⁷⁾

	$T = 20 [^{\circ}\text{C}]$	$T = 70 [^{\circ}\text{C}]$
層間水 (2 層水和)	0.479	2.28
層間水 (3 層水和)	0.678	3.04
外部水	2.14	5.83

表 2.2 解析条件

試料	ベントナイト (スメクタイト含有率 100%)
乾燥密度 [Mg/m^3]	1.2, 1.6, 2.0
間隙率 (乾燥密度)	0.556(1.2), 0.407(1.6), 0.259(2.0)
飽和度 [%]	100
温度 [$^{\circ}\text{C}$]	20, 70
反応表面積 (乾燥密度)[m^2/mm^3]	6.47×10^{-3} (1.2), 8.63×10^{-3} (1.6), 1.08×10^{-2} (2.0)

供試体モデル(図 2.5)では、左端面において高 pH 環境と接触して、その接触面から水酸基 (OH^-) が間隙水中に浸入するとし、境界条件として水酸基濃度を $1.0 \times 10^{-1} [\text{mol/l}]$ (pH=13) に固定した。右端については、無流束条件を採用している。

均質化法では微視的な周期構造を有すると仮定し、微視的・巨視的の挙動を統一的に表現する。これにより、材料が有する微視的特性(ユニットセルの特性)を巨視的挙動に反映させることができる。図 2.6 に本解析で用いたユニットセルモデルを示す。図中、Quartz は石英、Smectite は粘土積層体を表す。ユニットセル内には水、粘土鉱物、石英の三種類の物質があり、外部水は石英と粘土鉱物の間に存在している。なお、 d_{iw} は粘土積層体の層間距離(層間水の厚さ)、 d_c は粘土結晶の厚さ、 d_{ow} は外部間隙水の厚さ、 d_q はユニットセルの幅 w を 1 とした場合の石英部分の平均的厚さを表している。表 2.3 にベントナイト粘土の乾燥質量 ρ_d が 1.6 および 1.8 の場合の各パラメータを示した。外部水の厚さは乾燥密度、粘土鉱物の層の数、間隙率によって決められ、石英の厚さは 3nm に固定した(石英とスメクタイト積層体の質量比が約 50:50 となるように定めている)。層間水の厚さは乾燥密度に依存する。 $\rho_d=1.6$ の場合は 0.57nm、 $\rho_d=1.8$ の場合は 0.47nm とした。なお、粘土鉱物 1 層の厚さは 0.988nm で一定にした。

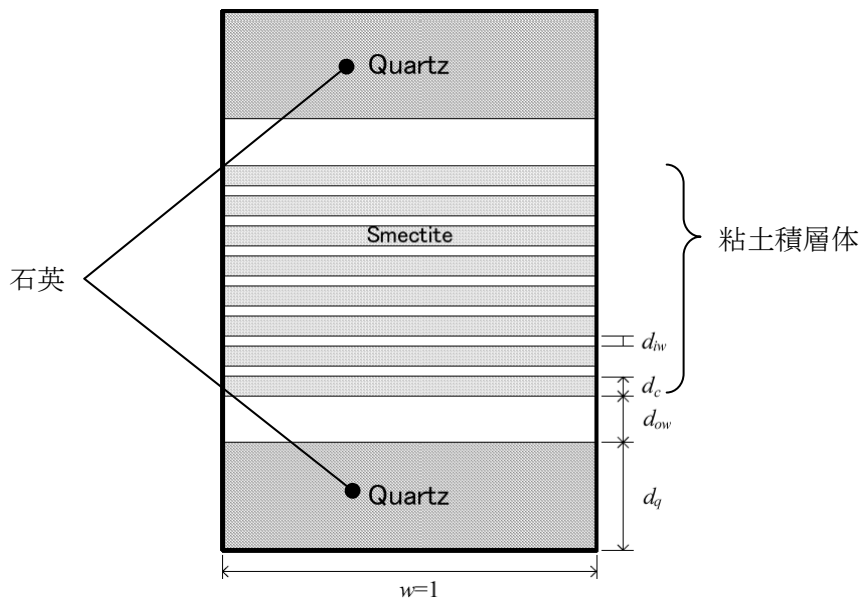


図 2.6 ユニットセルモデル

表 2.3 ユニットセル:入力パラメータ

	d_q [nm]	d_{ow} [nm]	d_c [nm]	d_{iw} [nm]	$total$ [nm]
$\rho_d = 1.6$	3.0	2.78	0.988	0.57	23.44
$\rho_d = 1.8$	3.0	1.84	0.988	0.47	20.87

均質化解析により得られた水酸基濃度の変化を図 2.7 と図 2.8、石英の溶解速度を図 2.9 と図 2.10、石英の溶解量を図 2.11 と図 2.12 に示す。ここで、 L は高 pH 境界(左端)から材料右端までの距離である。

図 2.7、図 2.8 は左端境界からの距離と水酸基の拡散による pH の変化であるが、乾燥密度による水酸基濃度の差が観察され、乾燥密度が小さい方の水酸基の拡散が先に進んでいることが分かる。また、図 2.7 と図 2.8 の比較より、温度 20[°C] に比べ温度 70[°C] における方が先に進んでおり、温度の影響が大きいことが分かる。図 2.7、図 2.8 で示される曲線の傾きは、各点における濃度勾配を表しているが、時間の経過に伴って曲線は緩やかな挙動を示すようになる。このことから、水酸基の拡散は時間初期において急速に進み、時間が経過するに従い各点の濃度勾配が小さくなり、水酸基の拡散も緩やかになっていくことが分かる。

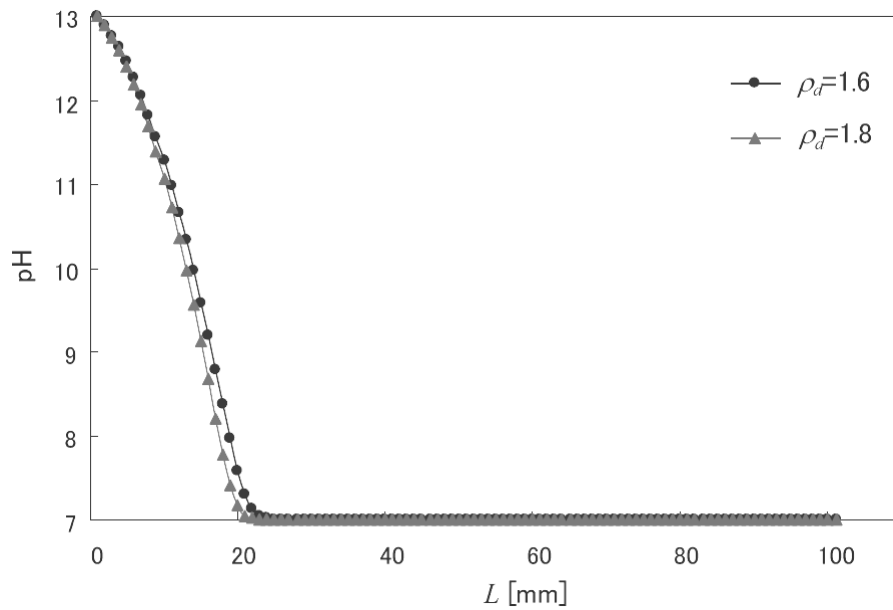


図 2.7 水酸基濃度(pH)の変化($t=20[\text{days}]$, $T=20[^\circ\text{C}]$)

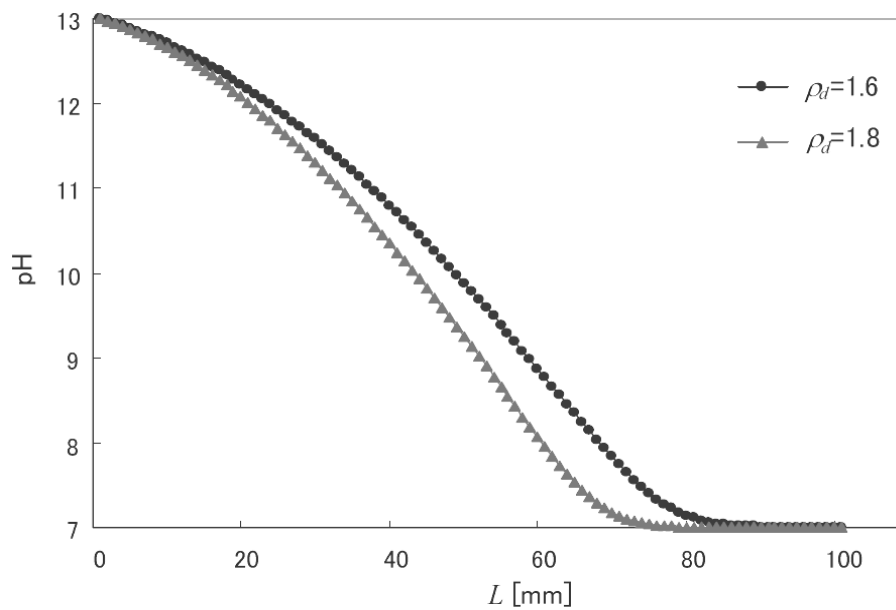


図 2.8 水酸基濃度(pH)の変化($t=20[\text{days}]$, $T=70[^\circ\text{C}]$)

図 2.9、図 2.10 は左端境界からの距離と各点における溶解速度を示している。溶解速度についても水酸基濃度の変化と同様に、乾燥密度が小さい方の溶解速度が大きい。温度 $20[^\circ\text{C}]$ おいて水酸基濃度と溶解速度のグラフと比べてみると、ほぼ同じ位置で水酸基濃度の曲線が緩やかになっている。温度 $70[^\circ\text{C}]$ においては、明らかに水酸基濃度のほうが先に進んでいるが、グラフの変化率(勾配)は溶解速度のグラフの方が大きいことがわかる。溶解速度もまた、温度 $20[^\circ\text{C}]$ に比べ温度 $70[^\circ\text{C}]$ における方が先に進んでおり、温度の影響が大きいことが分かる。

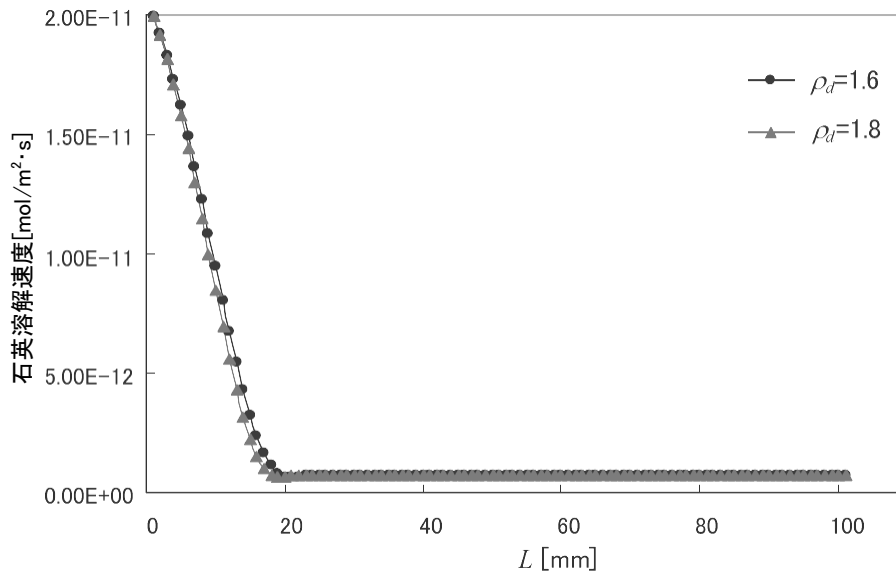


図 2.9 石英溶解速度(t=20[days],T=20[°C])

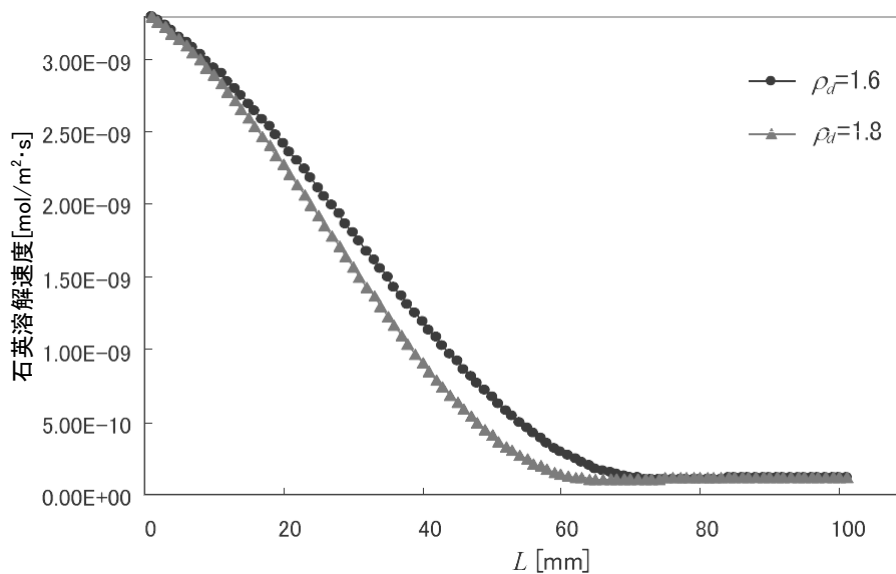


図 2.10 石英溶解速度(t=20[days],T=70[°C])

図 2.11、図 2.12 は左端境界からの距離と各点での石英の単位時間・単位表面積当りの溶解量 $[\text{mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}]$ の関係を示している。図 2.7、図 2.8 における pH の変化では乾燥密度が大きい方が各点での pH は低い値を示していたが、図 2.11、図 2.12 で判るように高アルカリ境界に近い点での単位時間・単位表面積当りの石英溶解量は pH に依存しているため同じ値をとる。ただし、密度が大きいとそれだけ反応表面積が大きくなり、総量としての石英溶解量 $[\text{mol}/\text{s}]$ は大きくなる。境界条件として、左端の pH は 13 に固定しているため、境界に近い点においては乾燥密度が大きくなることによる水酸基の拡散抑制の影響よりも反応表面積の影響が大きいと考えられる。境界からの距離が離れるほど、乾燥密度が大きいほうが水酸基の拡散が抑制され、石英溶解量が小さくなっている。これらのことから乾燥密度が増加することにより、石英の溶解が遅延されているのが分かる。

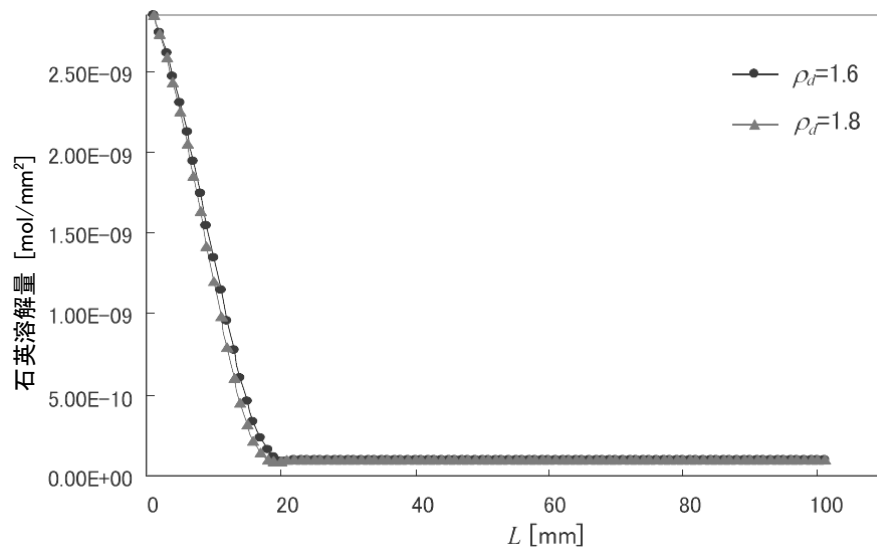


図 2.11 石英溶解量 ($t=20[\text{days}]$, $T=20[^\circ\text{C}]$)

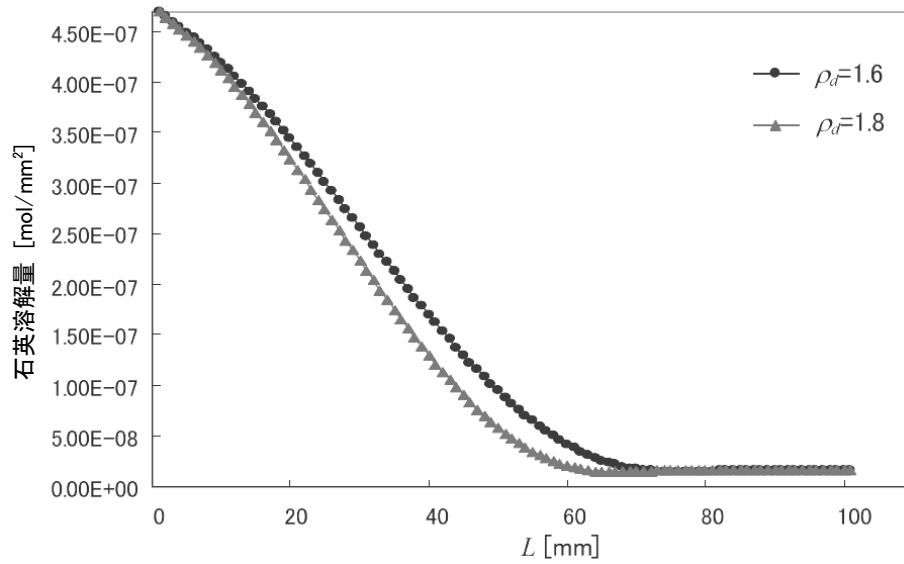


図 2.12 石英溶解量 ($t=20[\text{days}]$, $T=70[^\circ\text{C}]$)

3. 土岐花崗岩の一軸試験並びに応力緩和試験

一定変位条件の下で応力が緩和していく応力緩和実験は従来、岩石よりも金属材料に対して実施される場合が多かった。岩石に対しては、何例かの応力緩和実験が報告されているが、巨視的量としての変形・応力の時間変化が計測されているのみであった。

近年、光学顕微鏡観察下における変形・破壊実験が実用化され、デジタルカメラを備えた三次元映像顕微鏡を用いることで、平面形状のみならず三次元的に変形・破壊挙動を計測することができるようになっている。更には、レーザー光源を利用した共焦点光学系を利用した新しい可視化手法も開発されている。

ここでは、岩石の時間依存変形・破壊挙動を解明するため、応力緩和挙動と粒子の境界における微細構造の関係に注目し、走査型共焦点レーザー顕微鏡(Olympus OLS1100)を用いて、花崗岩の一軸応力緩和実験の観察を行うと同時に、画像処理によって結晶粒子内および粒子境界におけるひずみを算定した。

3.1 岩石試料と試験装置および試験方法

3.1.1 岩石試料

本研究では、超深地層研究用地内の深層ボーリング(MIZ-1 号孔)から採取した花崗岩試料を用いて試験を行った。図 3.1 に示すように、深層ボーリングによって掘り出した直径約 80mm 円柱状の花崗岩を $40 \times 20 \times 5\text{mm}$ の直方体に加工して試料とした。観察面である $40 \times 20\text{mm}$ の試料上部面は鏡面仕上げにし、端面の平行および直角の精度は $4/1000$ 程度で製作した(図 3.2)。地下 155.00m-155.12m から採取した試料を A1、地下 663.88m-664.00m から採取した試料を A2 とする。また、同じボーリングコアから複数個の試料を作成したので、順に A1-1, A1-2, …; A2-1, A2-2, … と呼ぶことにする。

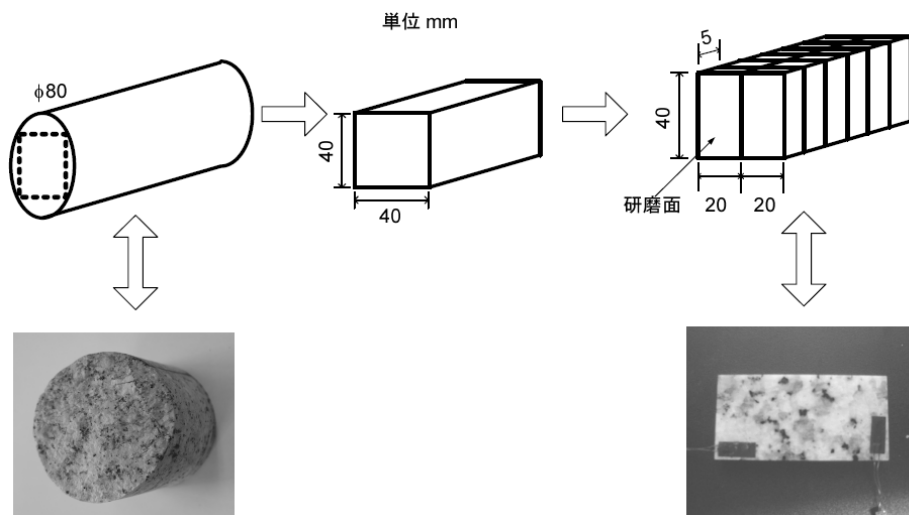


図 3.1 試料作成方法

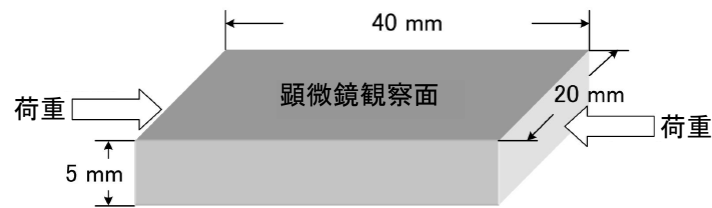


図 3.2 試料模式図

3.1.2 試験システム

試験システムは、計測装置、観察装置、載荷装置のサブシステムから構成されている(図 3.3、図 3.4)。

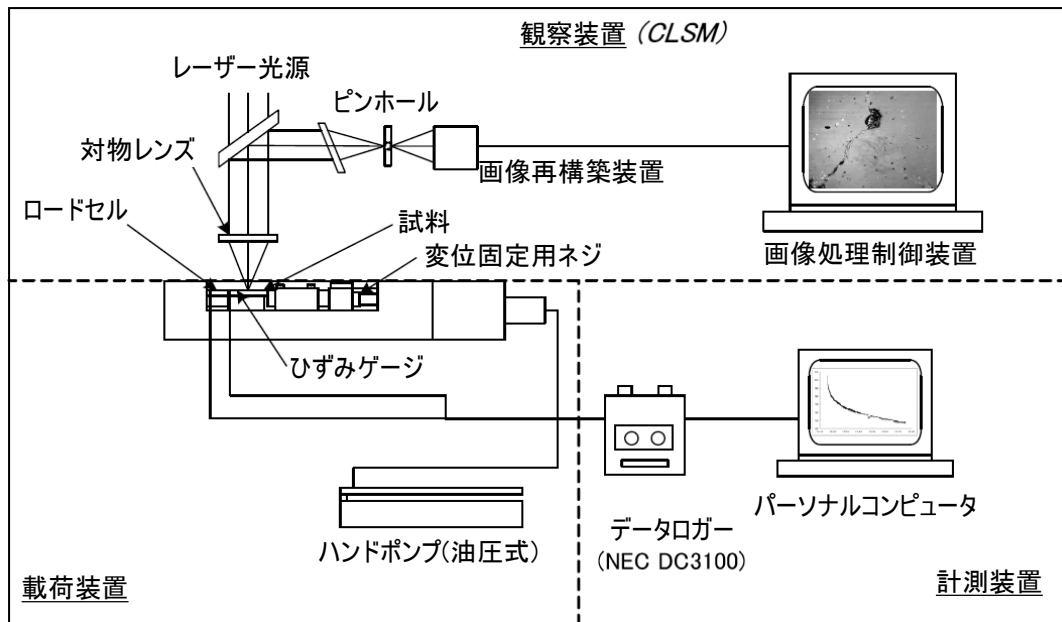


図 3.3 試験システムの構成

①観察装置

本研究で用いた OLS1100 は、波長 488nm の *Ar* レーザー共焦点光学系を用いて高解像度、高コントラストの観察像を得ることが可能である。また、光軸方向の解像度が飛躍的に向上しており、二次元画像や三次元画像の取り込み、さらには取り込んだ画像の画質改善、線幅、段差形状の計測など、様々な観察表示機能を持っている。

走査型レーザー共焦点顕微鏡は、レーザービームを対物レンズで微小なスポットに絞り、試料上を二次元的に走査して試料からの反射光を検出器で捉え、モニタ上に試料像を出力するレーザー顕微鏡である。通常の光学顕微鏡では合焦位置以外の光が合焦位置の結画像と重なり、全体的にぼやけた像になってしまうのに対し、共焦点(コンフォーカル)光学系では、図 3.5 のように合焦位置(共焦点面)にピンホールをおくことにより、合焦位置以外からの光を排除することができるので、合焦点以外からの光は画像中においては暗黒になり、特定の平面では極めて鮮明な像が得られる。一方、図 3.5 で示した光学系全体が上下方向に指定した間隔で移動可能であり、各位置で得られた鮮明な画像を重ね合わせると、三次元画像を得ることができる。さらに顕微鏡で取った画像のデータは設定した画像の範囲(例えば、1024×1024pixels など)で1つ1つの画像のピクセルが高さと強度の値を持っているので、得られた画像データを数値的に利用することが可能

である。

OLS1100 システムを構成するユニットおよびその仕様は表 3.1 に示すとおりである。

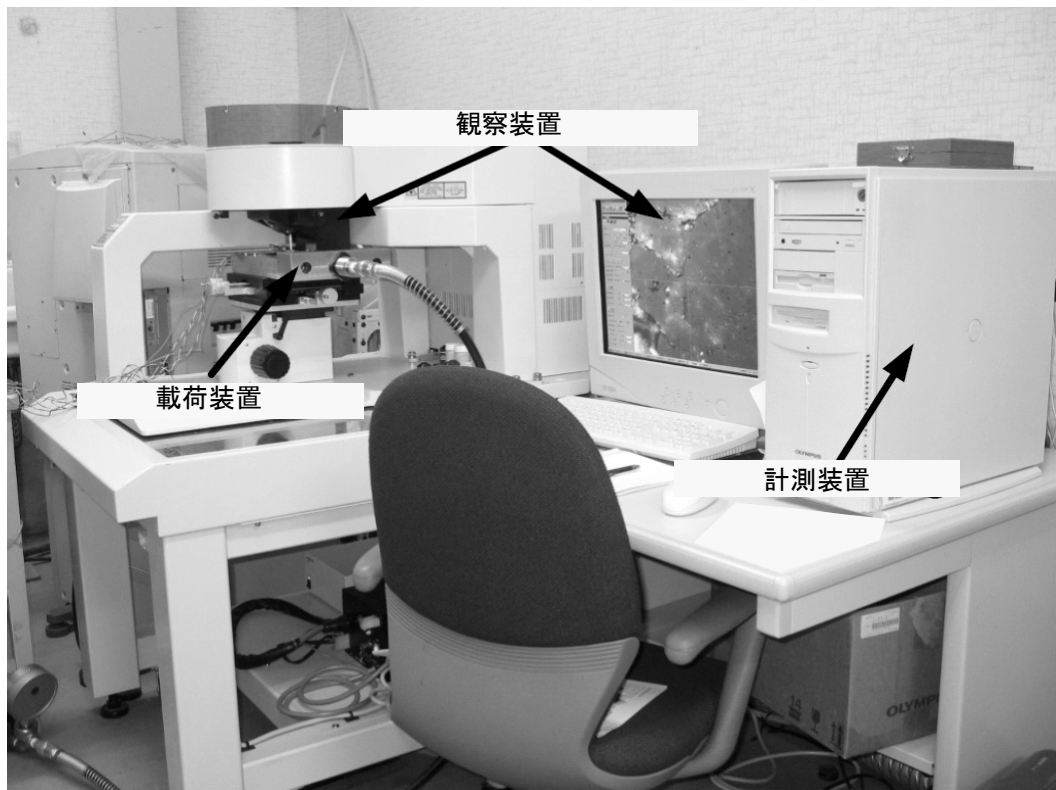


図 3.4 試験システムの外観

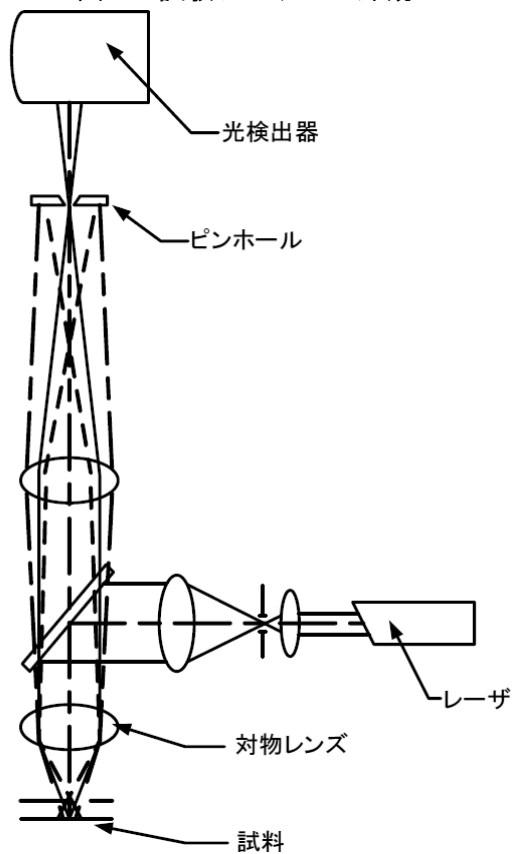


図 3.5 共焦点光学系

表 3.1 レーザー共焦点顕微鏡 OLS1100 システム

ユニット	仕様
Ar レーザー	5 mW 出力・直線偏光 強制空冷 Ar イオンレーザー (488 nm) 消費電力 100 V、10 A (max)
走査方式	ガルバノメータスキャナ 2 台による光偏向
シャッター	非走査時レーザー遮断
走査範囲	視野数 18 の円に内接する正方形領域、 または視野数 16 の円に内接する 4:3 の長方形領域 Dizital ZOOM: 1 倍から 6 倍まで
ピンホール	円形ピンホール
光検出器	フォトマルチプライヤ
Z レボルバ	レボルバ上下方式、電動対物切替 分解能 0.01 μm
AF	レーザー反射式
寸法 (mm)	860(幅)×1120(奥行)×1218(高さ)
質量	170 kg

② 計測装置

計測装置は、センサー(ロードセル:東京測器製 DM6820、ひずみゲージ:東京測器製 FLA-3-11)、デジタルひずみ測定器(NEC 三栄製:リモート Jr.DC3100)、パーソナルコンピュータ(Sony Vaio PCG-992N)から成る。試料に載荷された軸応力はロードセルにより検出される。一方、試料に生ずるひずみは、試料表面に添付されたひずみゲージによって検出される。計測データはこれらのセンサーからデジタルひずみ測定器を介して、パーソナルコンピュータに入力される。

③ 載荷装置とハンドルステージ

載荷装置は、油圧式ポンプ、載荷試験機から構成されている(図 3.6,図 3.7)。昨年度、新たに導入した載荷試験機は、応力緩和試験を実施するために載荷端の変位がねじで固定できるようになっている。この載荷試験機に手動の油圧式ポンプで圧力を加えると、軸応力が油圧シリンダーを介して金属載荷板に達する。載荷能力は最大 20kN であり、断面積 1cm²の試料に対して、最大 200MPa まで載荷することが可能である。

OLS1100 の観察台上にはオプションとしてハンドルステージを搭載し、最大 100×100mm の面積の試料を連続的に測定することを可能とした。このステージには、X 方向、Y 方向に二種のハンドルがついており、これを回すことによってステージをそれぞれの方向に移動させることが可能である。ハンドルには 0.1mm 単位の見盛がついており、1 回転につき 2mm だけ移動する。

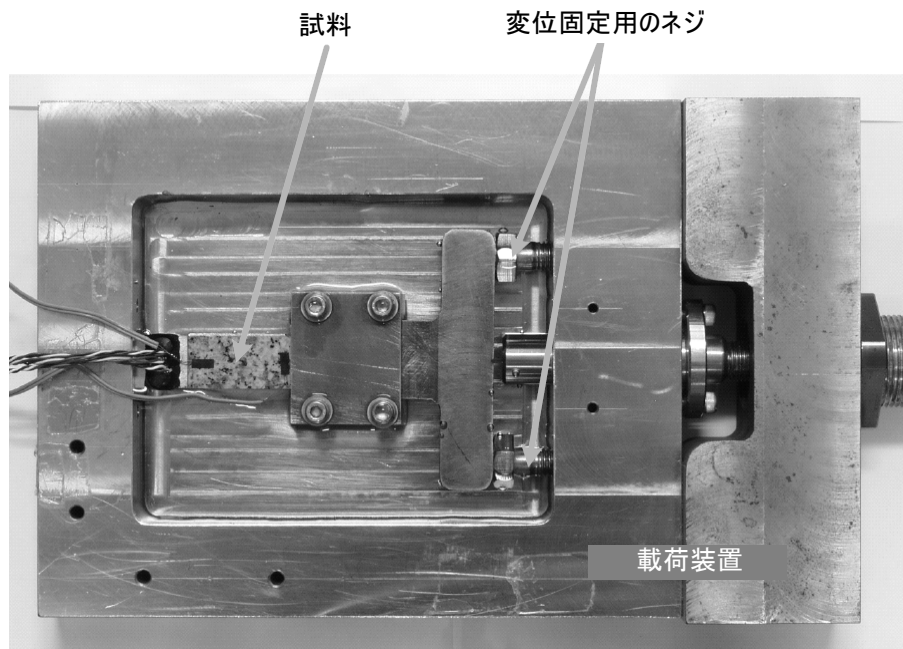


図 3.6 载荷装置と試料



図 3.7 OLS1100 の観察プラットフォームに設置された载荷装置

3.1.3 試験方法

平均強度を求めるための一軸試験用には、A1 と A2 それぞれ 2 個用意し、表面にひずみゲージを接着した。試料を完全に飽和するために、一週間、真空容器で蒸留水によって水浸した。一軸試験では、まず、飽和した試料とロードセルを凹形のスチールブロックの上に置いて、センターラインと一致するように容器の底の表面に保った。次に、試料に油圧ジャッキで 0.5MPa だけ荷重を与えて载荷システムに固定した。固定した状況を図 3.6 に示す。その後、载荷セル内で試料を再度、蒸留水で水浸・飽和した(図 3.7)。

载荷システムはレーザー共焦点顕微鏡の観察プラットフォームに置かれ、ねじで固定されている。次に、ハンドルステージで正確な観察ができる範囲を調節した。デジタル圧力レコーダーはコンピュータと接続されていて圧力・ひずみデータを記録するので、この時点でスイッチオンす

るが、圧力の初期値である 0.5MPa は 0MPa に修正した。

手動の油圧ポンプを用いて 1 秒あたり 0.2MPa の割合で試料に載荷する。100 倍の光学レンズは水で飽和状態の表面変形を観察するために用いた。

応力緩和実験では試料の端点を固定する必要があるため、油圧ポンプで所定の値まで応力を与えた後、二つのストッパーで固定した。載荷用の油圧ポンプはこの時点で外し、荷重はストッパーに移した。緩和実験における初期圧力は一軸圧縮強度の 40-60% に設定した。応力緩和実験は試験期間を 4 週間に設定し、観察は開始直後と終了直前に行った。なお、レーザー共焦点顕微鏡での観察は、レーザー共焦点顕微鏡本体と接続されているデスクトップのコンピュータで行った。デジタルデータは $128 \times 128 \mu\text{m}$ の範囲を $1024 \times 1024 \text{pixels}$ で採取し、鉱物粒子表面やその境界およびマイクロクラックに関する画像を得た。

3.2 試験結果および考察

3.2.1 一軸圧縮試験

応力緩和実験における初期応力は一軸圧縮強度の 40-60% に設定するため、応力緩和実験に先立って、A1 と A2 二種類の試料についてそれぞれ、一軸圧縮試験によってその強度を知る必要がある。本実験と同一コアより作成した試料を用いて 2006 年度に行った一軸圧縮試験の結果を図 3.8 に示す。この一軸圧縮試験は応力緩和実験と同じ装置を用い、試料が蒸留水で飽和されている水浸状態で行った。A1 と A2 の一軸圧縮強度は 160MPa と 140MPa 程度であると考えられる。

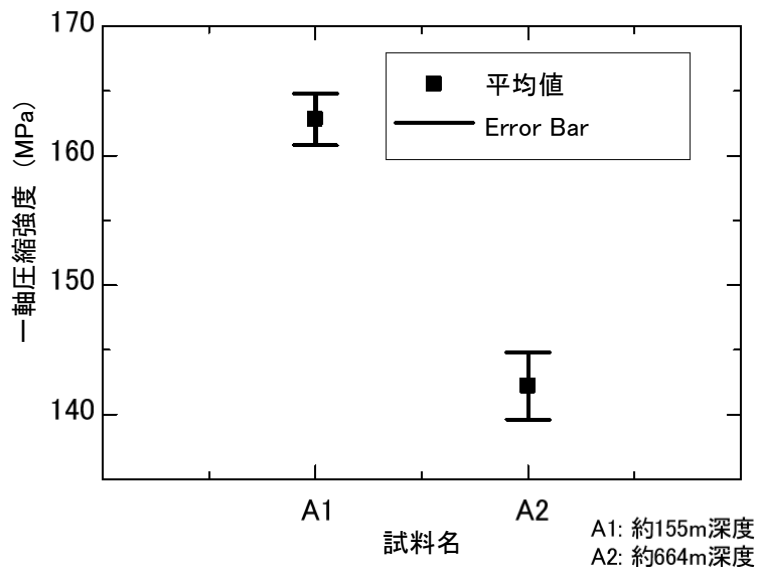


図 3.8 一軸圧縮試験結果

3.2.2 応力緩和試験

応力緩和実験では、試料の両端の変位を一定に保ち、時間経過に伴って緩和する応力を測定する。図 3.9(a)に今回の試料に対する応力緩和の状況を示した。

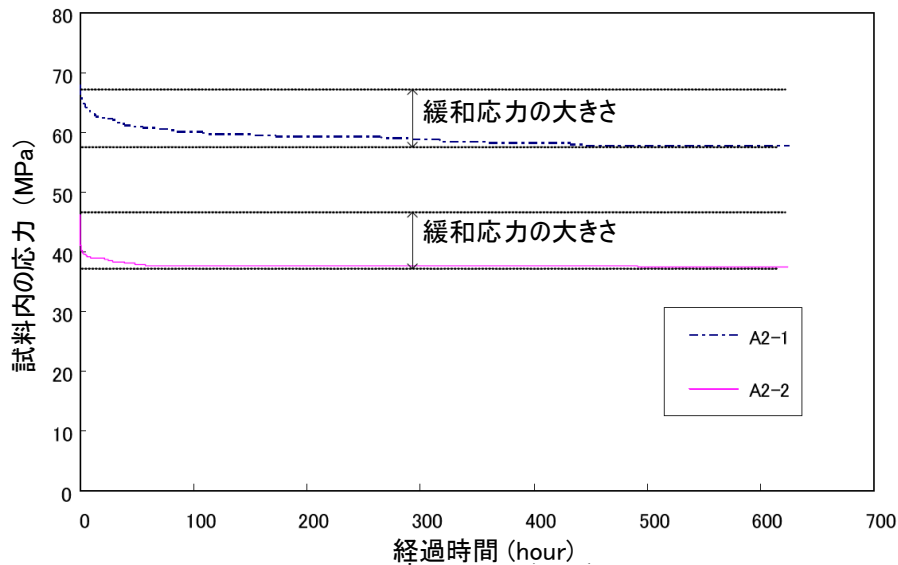


図 3.9(a) 緩和応力-時間関係

なお、試料 A2-1 は 67.9MPa、A2-2 は 46.2MPa、A1-3 は約 70MPa に設定して実験を行った。この最高応力は、一軸圧縮強度の 40-60% となるように設定したものである。ただし、試料 A1-3 のデータは計測装置の設定不備により失われた。したがって、本実験のみでは A1 と A2 の比較はできないが、2006 年度までの実験結果(図 3.9(b))から、一般には A2 の方が A1 よりも緩和応力量が大きいと予想される。これは、試料 A2 は試料 A1 よりも深層部分から採取したものであり、地中でより高い圧力を受けていた試料 A2 の方が力学的に微細組織を破壊されていて、変形しやすくなっていると考えられるからである。なお、図 3.9(a) の A2-1 と A2-2 のデータについても、1 日の停電が 2 回、半日の停電が 1 回あって約 55 時間のデータが得られなかった。ただし、载荷装置は電力を使用していないので、影響を受けていない。また、計測装置は電力再開後に再起動するので、その間のデータ欠損が生じるのみであり、図 3.9(a) を見る限りその影響は軽微であったと考えられる。

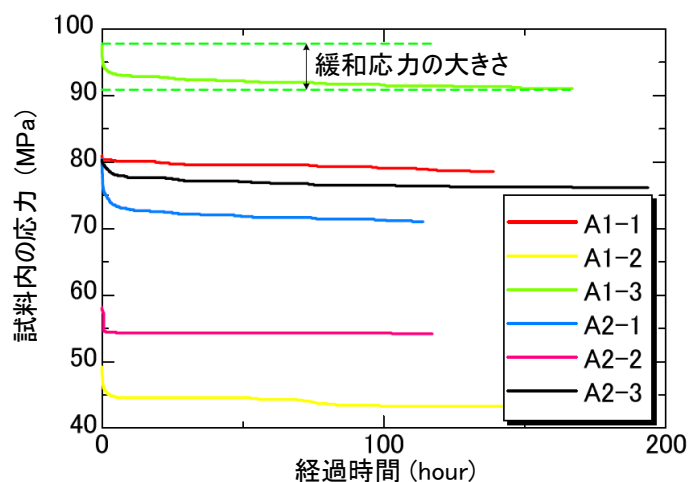


図 3.9(b) 緩和応力-時間関係

3.2.3 応力緩和現象における微視的構造の変化の観察

レーザー共焦点顕微鏡を用いると、花崗岩の造岩鉱物である石英(quartz: Q)、黒雲母(biotite: B)、長石(feldspar: F)、とりわけ、石英と黒雲母の表面と粒子の境界を鮮明に観察することができる。

本研究では、載荷直後(初期状態)の顕微鏡観察画像と応力緩和試験終了時の顕微鏡観察画像を用いて、応力緩和による局所的なひずみ分布を計算した。すなわち、載荷直後の画像に任意の標点を定めて四角形メッシュを構成し、変形後の画像においてその標点を探し出して特定し、各四角形頂点の変位を求め、有限要素近似を適用してひずみ分布を計算した。

図 3.10、図 3.11、図 3.12 に各供試体の初期状態と、設定した変位計測メッシュを示す。図から判るように、変位計測メッシュは石英(Q)の内部、黒雲母(B)の内部およびその粒界に配置している。なお、応力データの失われた A1-3 の供試体についても、顕微鏡観察画像が残っていたので、ひずみ分布を求めることができた。また、図 3.12 の周辺における鉱物配置が理解できるように、低倍率画像を図 3.13 に示した。

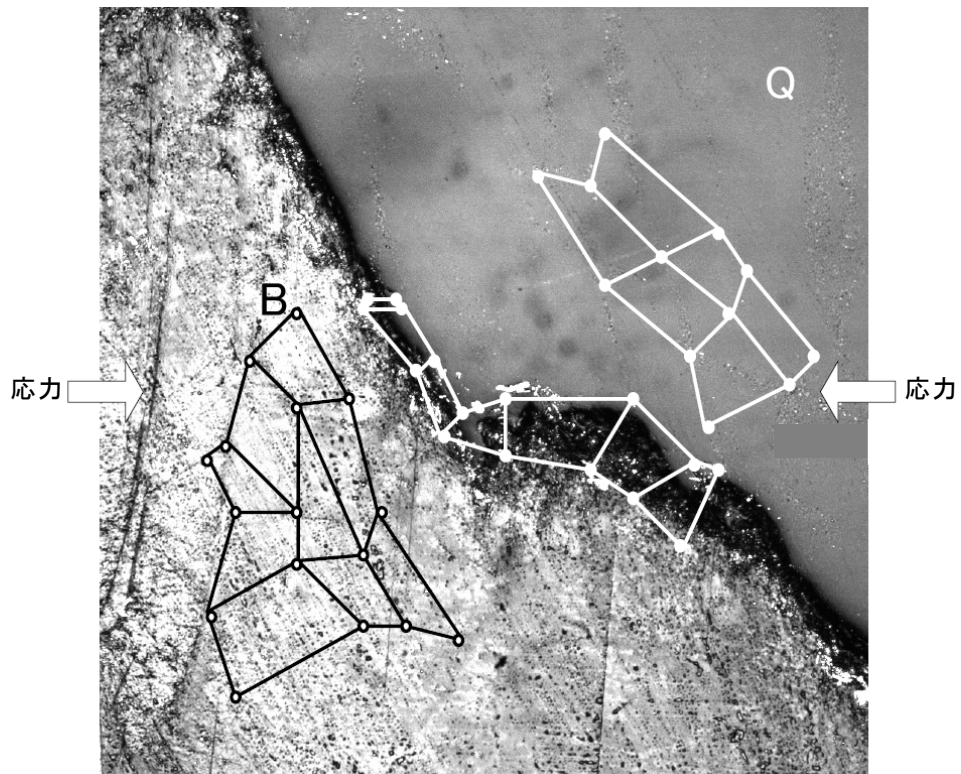


図 3.10 供試体 A2-1 の初期状態と変位計測メッシュ

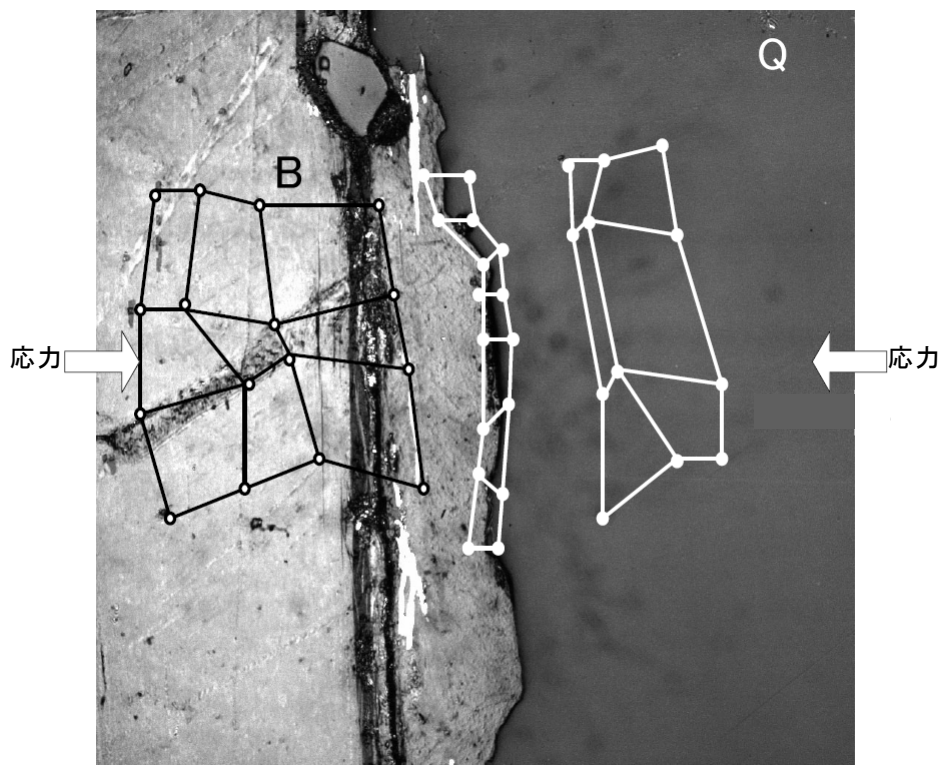


図 3.11 供試体 A2-2 の初期状態と変位計測メッシュ

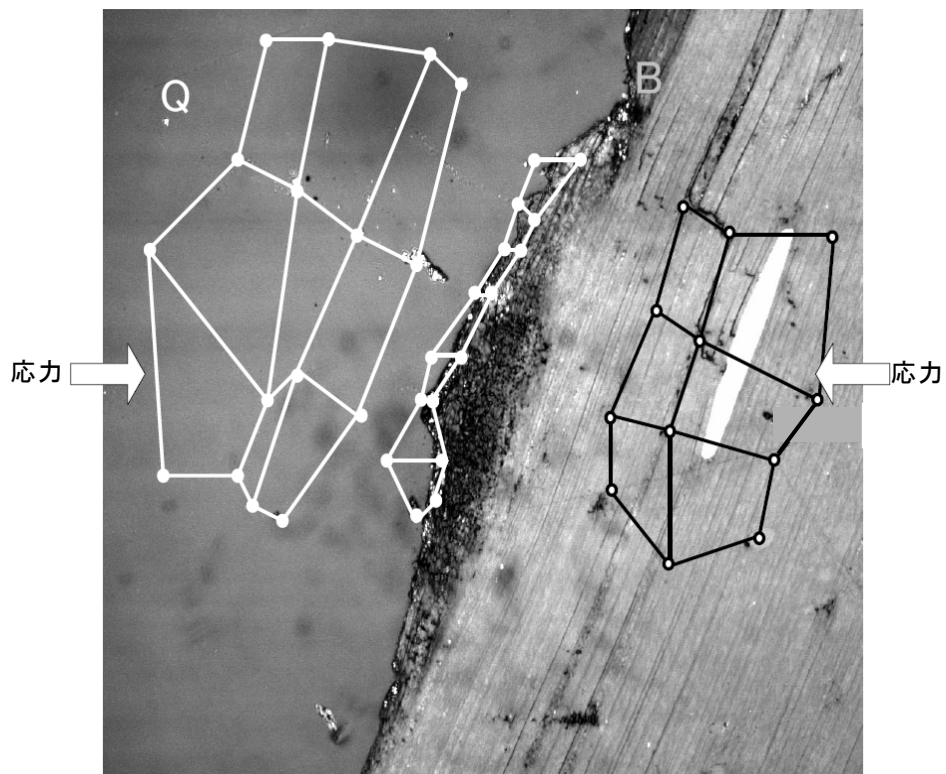


図 3.12 供試体 A1-3 の初期状態と変位計測メッシュ

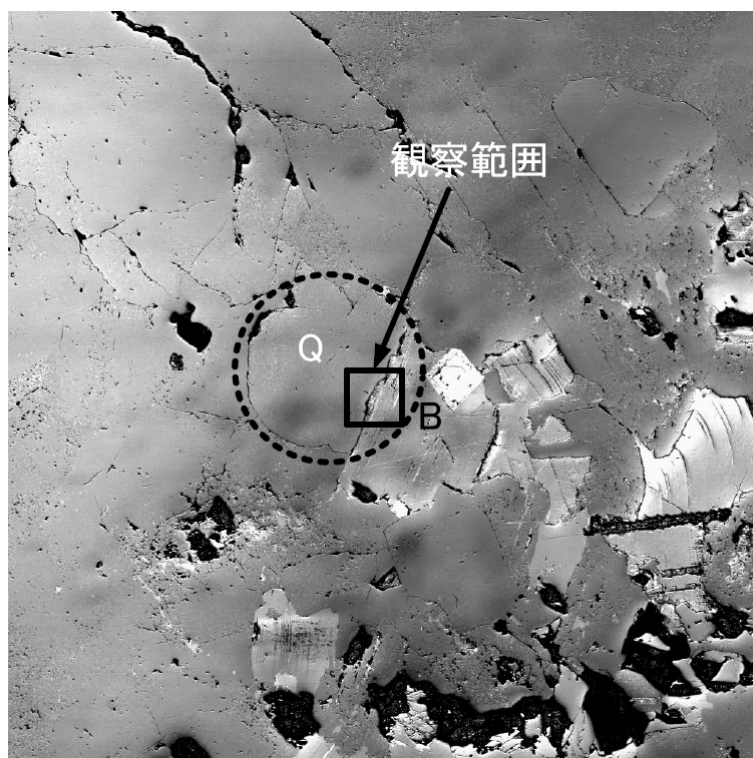


図 3.13 供試体 A1-3 の低倍率写真(倍率 10)

3.2.4 平均ひずみと偏差ひずみの算定

岩石や岩盤などの内部に空隙を有する材料の変形破壊挙動は、この材料が等方性を有すると仮定すると、平均ひずみ(体積ひずみとも呼ばれる) $\bar{\varepsilon}$ と偏差ひずみ ε' の変化によって記述される。平面ひずみ状態($\varepsilon_{33} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{23} = 0$ と仮定)における平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ と偏差ひずみ ε' は次式のように定義される：

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \bar{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\varepsilon} \end{pmatrix}; \quad \bar{\varepsilon}_{ij} = \bar{\varepsilon} \delta_{ij}, \quad \bar{\varepsilon} = \frac{1}{3}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) \quad (3.2)$$

$$\varepsilon' = \varepsilon - \bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}(2\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}) & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{21} & \frac{1}{3}(-\varepsilon_{11} + 2\varepsilon_{22}) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3}(-\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}) \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

また、平面ひずみ状態における平均ひずみの大きさ $\|\bar{\varepsilon}\|$ と偏差ひずみの大きさ $\|\varepsilon'\|$ は次式のように定義できる：

$$\bar{\varepsilon} = \|\bar{\varepsilon}\| = (\bar{\varepsilon}_{11}^2 + \bar{\varepsilon}_{22}^2 + \bar{\varepsilon}_{33}^2)^{1/2} = \left[\frac{1}{3}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22})^2 \right]^{1/2} \quad (3.4)$$

$$\varepsilon' = \|\varepsilon'\| = \left[6(\bar{\varepsilon})^2 - 2\varepsilon_{11}\varepsilon_{22} + 2\varepsilon_{12}^2 \right]^{1/2} \quad (3.5)$$

载荷前後における隣接した鉱物粒子と粒界のひずみ状態を調べるために、図 3.10、図 2.12、図 3.12 で設定したメッシュにおける平均ひずみ $\bar{\varepsilon} = \|\bar{\varepsilon}\|$ と偏差ひずみ $\varepsilon' = \|\varepsilon'\|$ の等高線を算定した。図 3.14～図 3.19 にその結果を示す。

供試体 A2-1 については、図 3.14 と図 3.15 を見ると、平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ に比して偏差ひずみ ε' が相対的に大きくなっている。すなわち、花崗岩のように緻密で多くの異なった性質の鉱物が集合した多結晶材料では、局所的な変形の主要因となるのはせん断であるということである。

つぎに、供試体 A2-2 について、図 3.16 と図 3.17 を見比べてみると、ここでもやはり、平均ひずみに比して偏差ひずみが相対的に大きくなっている。これらの図は、上記と同様にせん断が変形の主要因であるということを示している。また、石英(Q)において粒界や黒雲母(B)よりも大きな偏差ひずみが生じていることから、石英粒子が局所的な欠陥の存在や三次元的な結晶形状の影響を受けていることを窺わせる。

最後に、供試体 A1-3 について、図 3.18 と図 3.19 を見比べると、同様にせん断が変形の主要因となっており、粒界と黒雲母(B)において偏差ひずみが大きいということが判る。また、図 3.13 と比較しながら巨視的視点からこの結果を考えると、図 3.13 で観察されるように石英粒子 Q の左側に大きな亀裂があり、この亀裂に囲まれた石英粒子が载荷に伴って相対的な疑似剛体移動を起こし、その結果、粒界でせん断変形が起こったのではないかと推定される。

よく知られているように、多結晶材料における局所的なひずみは粒子の形状に大きく影響される。本実験においても粒子表面あるいは粒界においてひずみ量は様々な値を取ることが観察され、局所的な形状に影響を受けていることが確認できた。

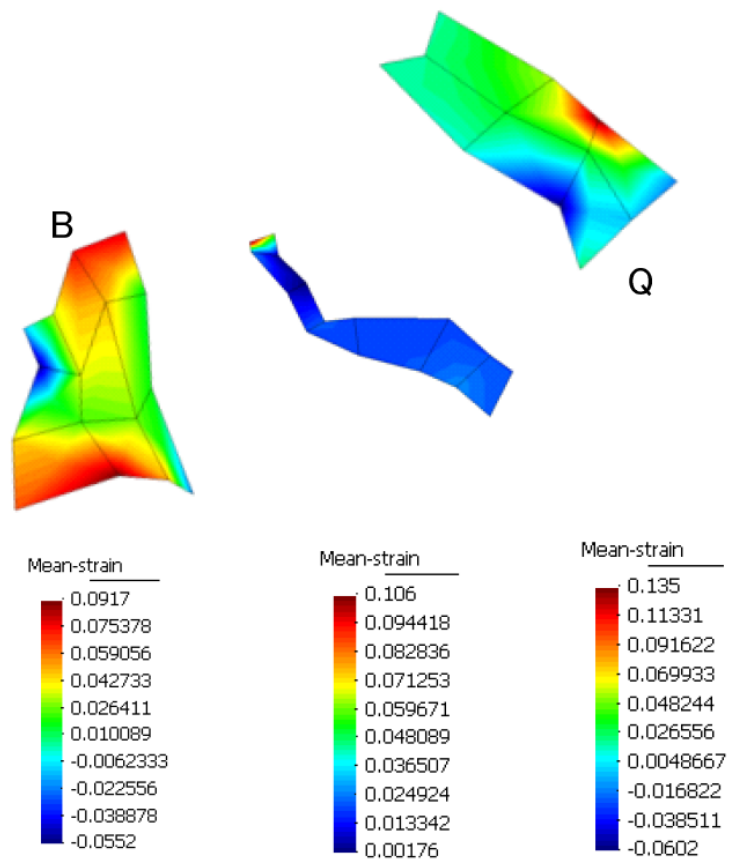


図 3.14 供試体 A2-1 の平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ の分布

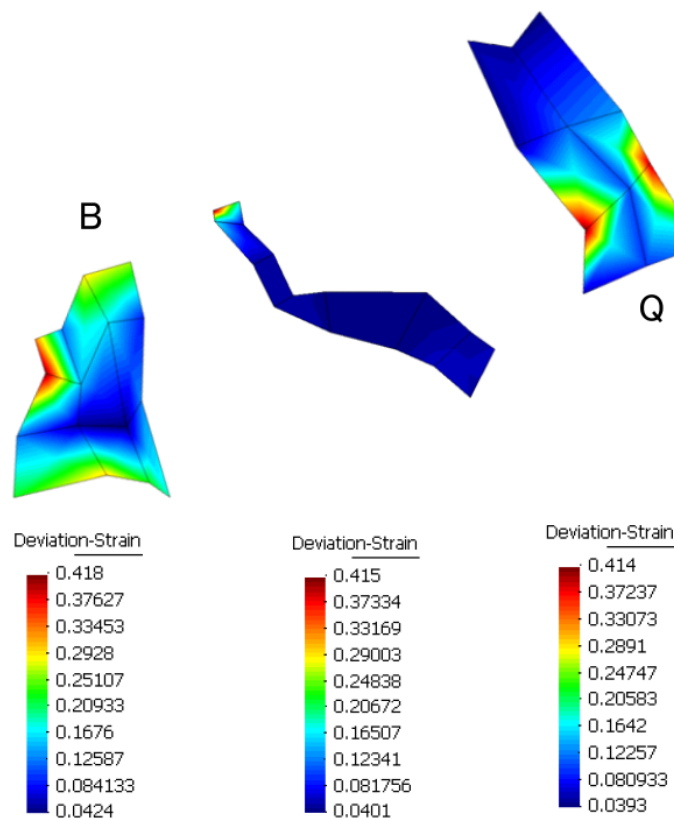


図 3.15 供試体 A2-1 の偏差ひずみ ε' の分布

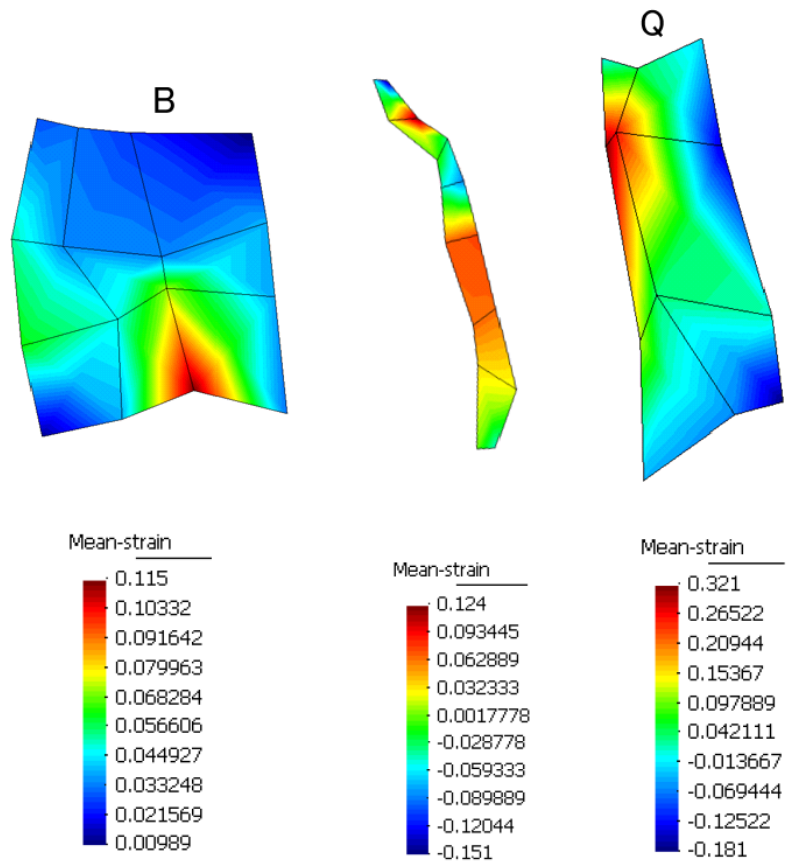


図 3.16 供試体 A2-2 の平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ の分布

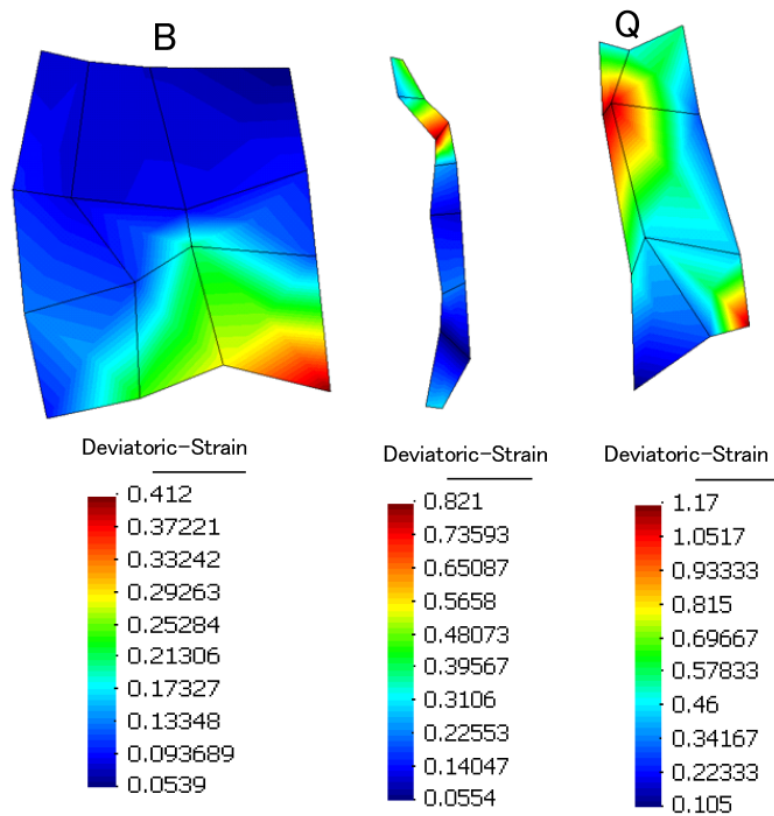


図 3.17 供試体 A2-2 の偏差ひずみ ε' の分布

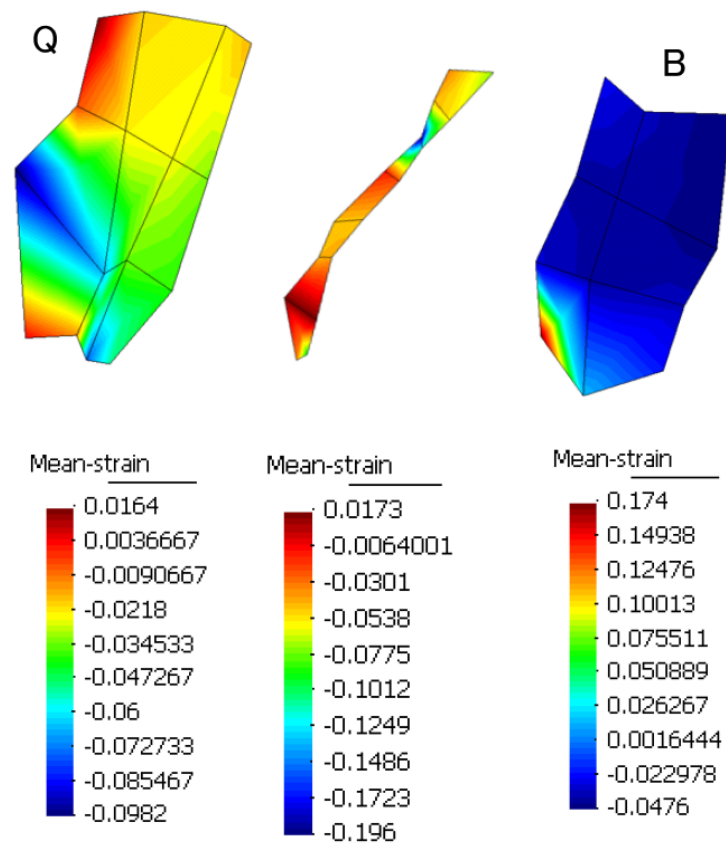


図 3.18 供試体 A1-3 の平均ひずみ $\bar{\varepsilon}$ の分布

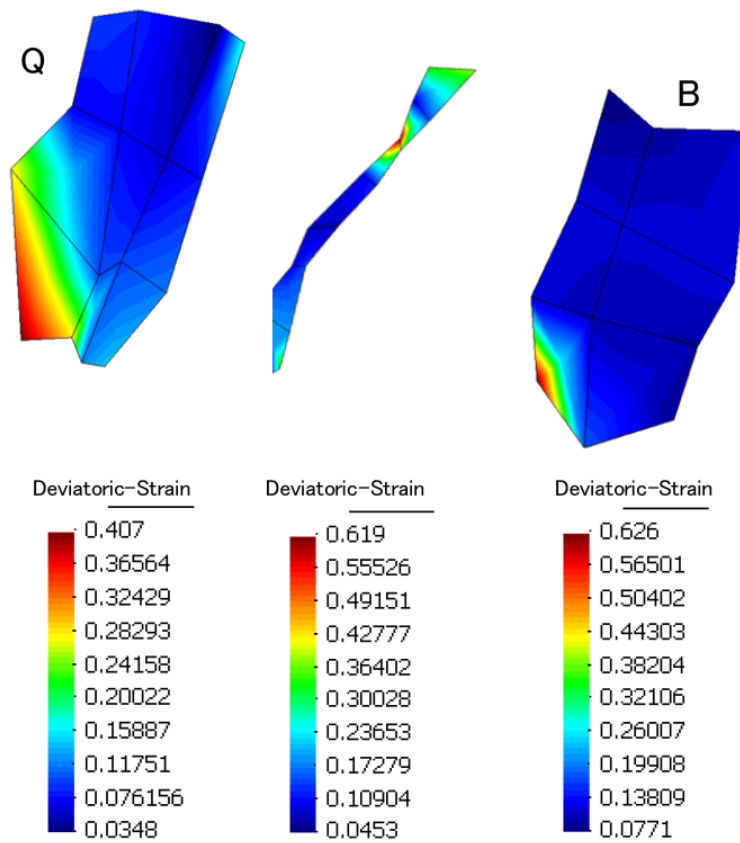


図 3.19 供試体 A1-3 の偏差ひずみ ε' の分布

4. 強不連続解析を導入した均質化法による土岐花崗岩のマイクロクラック進展解析

破壊力学やひずみ局所化・分岐解析の分野では、破壊のメカニズムを考慮した内在型有限要素 (finite elements with embedded discontinuities) 解析の手法が盛んに研究されている (Oliver¹⁾; Oliver²⁾; Larsson et al.⁸⁾; Celigoj⁹⁾; Jirasek¹⁰⁾; Belytschko et al.¹¹⁾; Oliver et al.¹²⁾)。これらの内、Oliver 等^{1),2)}によって開発された有限要素の内部に変位の不連続を許す「強不連続解析手法」は、工学的に実用的な解析手法として多くの利点を有している。本章では、亀裂群を内包する物体に対する均質化解析 (Sanchez-Palencia¹³⁾) にこの強不連続解析を導入し、花崗岩の亀裂進展を解析した。

4.1 強不連続解析

ここでは、Oliver^{1),2)}の提案する強不連続解析の概要について述べる。

4.1.1 強不連続解析

図 4.1 に示すように、内部に変位の不連続面を許した物体 Ω を考える。 Ω は不連続面 φ により領域 Ω^+ と Ω^- とに分けられている。 φ は物質曲面であるとし、その単位法線ベクトルを n とする。強不連続性を持つ変位 u は φ 上での Heaviside の単位関数 H_φ を用いて次式のように表される。

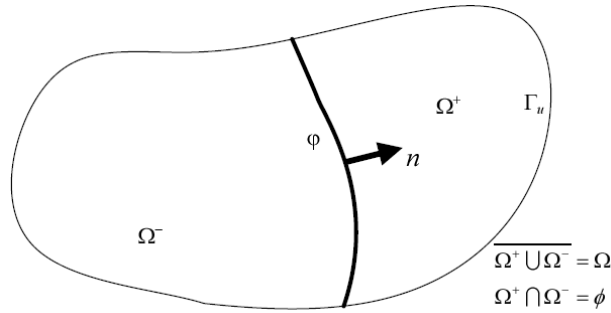


図 4.1 物体内部の変位の不連続面

$$u(x, t) = \bar{u}(x, t) + H_\varphi(x) \llbracket u \rrbracket(x, t) \quad (4.1)$$

ここで、

$$H_\varphi(x) = \begin{cases} 0, & \forall x \in \Omega^- \\ 1, & \forall x \in \Omega^+ \end{cases} \quad (4.2)$$

であり、また、 x は物質点、 t は時刻、 $\bar{u}$ は変位場の連続部分、 $\llbracket u \rrbracket$ は物体全体で定義される変位ジャンプ関数を表す。すなわち、変位場は連続部分と不連続部分の和で表されることになる。この時、ひずみテンソル ε は、上式の空間微分をとって次式のようにになる。

$$\begin{aligned} \varepsilon &= (\nabla u)^s = (\nabla \bar{u})^s + H_\varphi(\nabla \llbracket u \rrbracket)^s + \delta_\varphi(\llbracket u \rrbracket \otimes n)^s = \bar{\varepsilon} + \delta_\varphi(\llbracket u \rrbracket \otimes n)^s \\ \bar{\varepsilon} &= (\nabla \bar{u})^s + H_\varphi(\nabla \llbracket u \rrbracket)^s \end{aligned} \quad (4.3)$$

ここで、 $\llbracket u \rrbracket \otimes n$ はベクトル $\llbracket u \rrbracket$ と n のテンソル積を意味する。また、 $\bar{\varepsilon}$ はひずみ場の有界な部分

であり、右辺第2項が ϕ 上での非有界なひずみを表す(δ_ϕ は ϕ 上のデルタ関数である)。なお、 $(\cdot)^s$ は $(\cdot)$ の対称部分を意味する。

4.1.2 等方損傷モデルの導入

母材は脆性的に破壊・軟化する材料であるとする。このとき、等方損傷モデルを与えるHermholzの自由エネルギー Ψ は、

$$\Psi = \frac{1}{2} \sigma \cdot \varepsilon = (1-d)\Psi_0; \quad \Psi_0 = \frac{1}{2} \varepsilon \cdot (C\varepsilon) \quad (4.4)$$

と書けるので、これを微分して構成則が、

$$\sigma = \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon} = (1-d)C\varepsilon \quad (4.5)$$

と与えられる。ここで、 σ は応力テンソル、 ε はひずみテンソル、 C は線形弾性体の構成テンソルである。 d はスカラー損傷変数と呼ばれ、時刻 t における損傷 $d(t)$ は、ひずみノルム $\tau^\varepsilon(t)$ と弾性域を規定する履歴関数 $r(t)$ を用いて、

$$d(t) = G(r(t)) \quad (4.6)$$

$$r(t) = \max_{s \in (-\infty, t)} \{r_0, \tau^\varepsilon(s)\}$$

と表される。ここで、 r_0 は r の初期閾値であり、 $G(\cdot)$ は単調増加関数で $G(r_0)=0$, $G(\infty) \leq 1$ および、任意の関数 $\mu \in [r_0, \infty)$ に対して $G'(\mu) \geq 0$ を満たすものとする。なお、負荷時(loading)・除荷時(unloading)を問わず、ひずみ ε は下記の集合 E_ε 中に存在する。

$$E_\varepsilon = \{\varepsilon \mid \tau^\varepsilon \leq r(t)\} \quad (4.7)$$

また、 d, r は単調増加するので、

$$\dot{d} \geq 0, \quad \dot{r} \geq 0 \quad (4.8)$$

を満たす(除荷時および弾性載荷時に $\dot{d} = 0$ 、非弾性負荷時に $\dot{d} > 0$)。また、散逸 D は、

$$D = -\Psi + \sigma \cdot C\varepsilon = \dot{d}\Psi_0 \quad (4.9)$$

と表される。

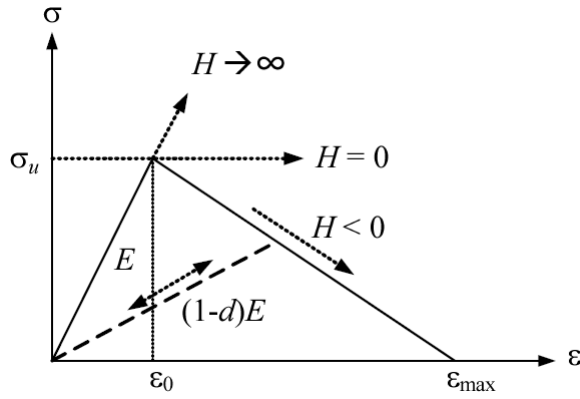
最も簡単にはひずみノルムは、

$$\tau^\varepsilon = \sqrt{\varepsilon \cdot C\varepsilon} \quad (4.10)$$

で定義される。ここで、図4.2を参照すると、損傷場は、

$$d = \begin{cases} 0, & r < r_0 = \sigma_u / \sqrt{E} \\ \frac{1}{1+H} \left(1 - \frac{r_0}{r}\right), & r_0 < r < r_{\max} = -\frac{1}{H}r_0 \\ 1, & r_{\max} < r \end{cases} \quad (4.11)$$

となる。 σ_u は一軸ピーク強度、

図 4.2 弾性・脆性材料に対する一次元の構成関係²⁾

$$H = -\frac{r_0}{r_{\max}} \quad (4.12)$$

は軟化パラメータの役割を果たす。式(4.5)と式(4.11)から応力ノルムが、

$$\tau^\sigma = \sqrt{\sigma \cdot C^{-1} \sigma} = (1-d) \sqrt{\varepsilon \cdot C \varepsilon} = (1-d) \tau^\varepsilon \quad (4.13)$$

と定義できることが判る。以上より、増分構成則は、

$$\dot{\sigma} = C^d \dot{\varepsilon} \quad (4.14)$$

$$C^d = \begin{cases} (1-d)C, & \text{for unloading: } \dot{d} = 0 \\ (1-d) \left[C - \frac{1}{1+H} \frac{\tau_0}{(\tau^\sigma)^3} \right] \sigma \otimes \sigma & \text{for loading: } \dot{d} > 0 \end{cases} \quad (4.15)$$

と書かれる。この時、式(4.9)と(4.13)より、散逸 D は、

$$D = \dot{d} \Psi_0 = \dot{d} \frac{1}{2} (\tau^\varepsilon)^2 = \dot{d} \frac{1}{2} \left(\frac{\tau^\sigma}{1-d} \right)^2 = \frac{1}{2} (\tau^\sigma)^2 \frac{d}{dt} \left(\frac{d}{1-d} \right) \geq 0 \quad (4.16)$$

と計算される。負荷時には、

$$\frac{d}{1-d} = \frac{1}{H} g(\sigma) \quad (4.17)$$

$$g(\sigma) = 1 - \frac{r_0}{\tau^\sigma} \quad (4.18)$$

である。

4.1.3 応力の有界性

式(4.5)を変形すると、

$$\left(1 + \frac{d}{1-d} \right) \sigma = C \varepsilon$$

であるので、式(4.3)を代入して次式を得る。

$$\underbrace{\sigma}_{\text{bounded}} + \frac{d}{1-d} \sigma = \underbrace{C\bar{\varepsilon}}_{\text{bounded}} + \underbrace{\delta_\varphi C([\![u]\!]_\varphi \otimes n)^s}_{\text{unbounded}} \quad (4.19)$$

これは、左辺第 2 項の $d/(1-d)$ が φ 上で無限となる(unbounded)ことを意味している。そのためには、項 $d/(1-d)$ は δ -関数を含んでいなければならない。式(4.17)、式(4.18)を参照すると、 $g(\sigma)$ は有界であり、したがって、 $1/H$ が δ -関数を含んでいなければならない。これは、

$$\frac{1}{H} = \delta_\varphi \frac{1}{\bar{H}} \quad (4.20)$$

であることを意味している。 $\bar{H}$ を本質軟化係数と呼ぶ。これを式(4.19)に代入・整理すると、

$$\underbrace{[\sigma - C\bar{\varepsilon}]}_{=0 \text{ in } \Omega \setminus \varphi} = \delta_\varphi \underbrace{\left[C([\![u]\!]_\varphi \otimes n)^s - \frac{1}{\bar{H}} g(\sigma) \right]}_{=0 \text{ on } \varphi} \quad (4.21)$$

を得る。これより、正則領域 Ω/φ および特異曲面 φ 上における構成則が、

$$\sigma = \begin{cases} C\bar{\varepsilon} & \text{in } \Omega \setminus \varphi \\ \frac{\bar{H}}{g(\sigma)} C([\![u]\!]_\varphi \otimes n)^s & \text{on } \varphi \end{cases} \quad (4.22)$$

と得られる。

4.1.4 連続関数近似による不連続変位場の修正

式(4.1)で定義された変位のジャンプを連続化して近似することを考える。いま、図 4.3 のように φ を含む微小領域 $\Omega_h = \Omega_h^+ \cup \Omega_h^-$ を考える。 Ω_h^+ の φ を含まない境界を φ_h^+ 、 Ω_h^- の φ を含まない境界を φ_h^- とする。ここで、 Ω_h は変位境界 Γ_u を含まないものと仮定し、 Ω_h の外側で次の条件を満たす任意の関数 ϕ^h を導入する。

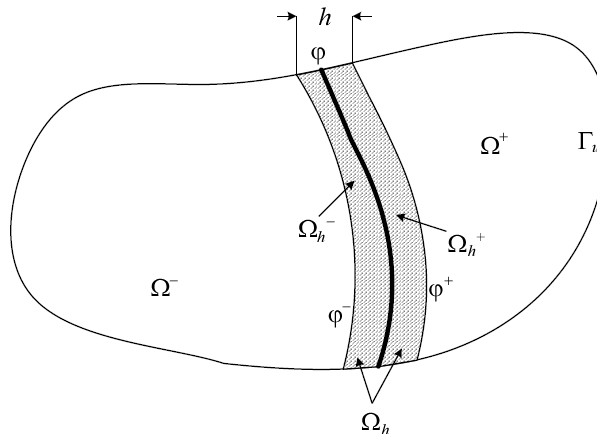


図 4.3 不連続面 φ を含む微小領域 Ω_h ³⁾

$$\begin{cases} \phi^h(x) = 0, & \forall x \in \Omega^- \setminus \Omega_h^- \\ \phi^h(x) = 1, & \forall x \in \Omega^+ \setminus \Omega_h^+ \end{cases} \quad (4.23)$$

式(4.2)の H_ϕ と ϕ^h より接続関数 M_ϕ^h を、

$$M_\phi^h(\mathbf{x}) = H_\phi(\mathbf{x}) - \phi^h(\mathbf{x}) \quad (4.24)$$

と定義する。これらの下で連続関数、

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + \phi^h(\mathbf{x})[[\mathbf{u}]](\mathbf{x}, t) \quad (4.25)$$

が導入され、したがって、式(4.1)の変位は、

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + (H_\phi(\mathbf{x}) - \phi^h(\mathbf{x}))[[\mathbf{u}]](\mathbf{x}, t) = \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t) + M_\phi^h(\mathbf{x})[[\mathbf{u}]](\mathbf{x}, t) \quad (4.26)$$

と書き直すことができる。以上より、変位場は連続部分 $\hat{\mathbf{u}}$ と領域 Ω_h を台とする不連続部分 $M_\phi^h[[\mathbf{u}]]$ に分解され、変位境界条件は連続部分にのみ作用させることができると理解される。

4.2 均質化理論による強不連続解析

微視的レベルで非均質性を有する材料に過大な荷重を载荷すると、局所的に不連続面が発生すると考えられる。このような状況に対して、局所的に強不連続性を導入した均質化解析が有効であると考えられる。

4.2.1 均質化理論の概念

図 4.4 に示すように、2 つの代表的スケールで表されるような微視的周期構造を有する材料を考える。ここで、材料全体の構造を記述するための座標を $\mathbf{x}^0$ とし、さらに微視的構造を記述するための座標として、 $\mathbf{x}^1 = \mathbf{x}^0/\varepsilon$ を導入する。 $\mathbf{x}^1$ は微視的変数、 $\mathbf{x}^0$ 巨視的変数である。また、スケールが εX^1 であるような基本構造をユニットセルと呼ぶ。均質化法では、対象構造物を十分小さい εX^1 の周期構造と仮定して、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限をとれば、微視的構造を考慮に入れた平均的な挙動が微視的な応力分布と併せて得られることになる。

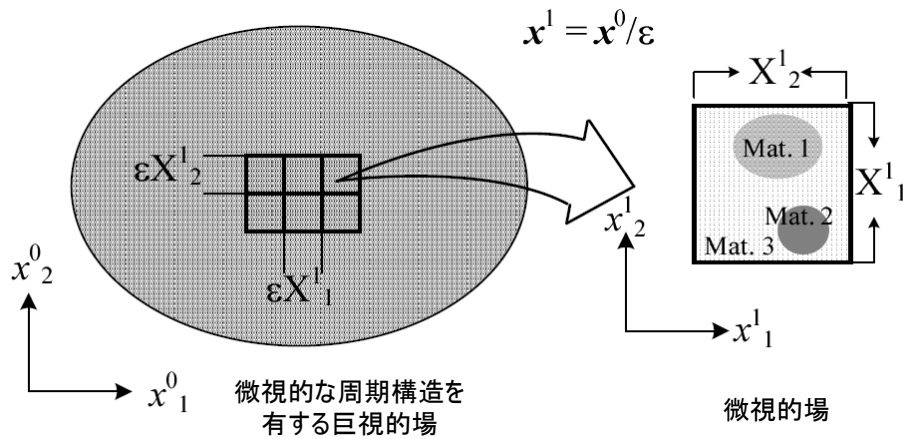


図 4.4 微視的な周期構造を有する材料とユニットセル

座標系 $\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1$ を導入すると、

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) \quad (4.27)$$

と書け、この巨視的・微視的の座標系を使って周期 X^1 の周期関数 $\phi(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1)$ を、つぎのように定義する。

$$\phi(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) = \phi(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1 + X^1) \quad (4.28)$$

また、微分は、

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i^0} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial x_i^1} \quad (4.29)$$

と変換される。

いま、 ϕ^ε を $\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1$ について漸近展開する。

$$\phi^\varepsilon(\mathbf{x}) = \phi^0(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) + \varepsilon \phi^1(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) + \varepsilon^2 \phi^2(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) + \cdots \quad (4.30)$$

この漸近展開を支配方程式に代入すると巨視的問題と微視的問題が得られる。

4.2.2 釣り合い問題

(支配方程式)

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^\varepsilon}{\partial x_j} + \dot{f}_i^\varepsilon = 0 \quad \text{in } \Omega^\varepsilon \setminus \varphi \quad (4.31)$$

ここで、 $\dot{\sigma}^\varepsilon$ は応力増分、 $\dot{f}^\varepsilon$ は物体力の増分を表す。

(境界条件)

$$\dot{u}_i^\varepsilon = \bar{\dot{u}}_i \quad \text{on } \Gamma_u \quad (4.32)$$

$$\dot{\sigma}_{ij}^\varepsilon n_j = \bar{\dot{t}}_i \quad \text{on } \Gamma_\sigma \quad (4.33)$$

$$(\dot{\sigma}_\varphi)_{ij}^\varepsilon n_j = \dot{\sigma}_{ij}^{\varepsilon+} n_j = \dot{\sigma}_{ij}^{\varepsilon-} n_j = (\dot{\sigma}_{\Omega^\varepsilon \setminus \varphi})_{ij}^\varepsilon n_j \quad \text{on } \varphi \quad (4.34)$$

ここで、 $\dot{\mathbf{u}}^\varepsilon$ は変位増分、 $\bar{\dot{\mathbf{t}}}$ は応力ベクトルの増分、 $\dot{\sigma}_\varphi^\varepsilon$ は微視的場で大きな変動を示す応力増分、 $\dot{\sigma}^{\varepsilon+}$ は領域 Ω^+ における応力増分、 $\dot{\sigma}^{\varepsilon-}$ は領域 Ω^- における応力増分である。

(初期条件)

$$\dot{u}_i = \bar{\dot{u}}_i^0(\mathbf{x}) \quad \text{in } \Omega^\varepsilon \setminus \varphi \quad (4.35)$$

(変位・ひずみ関係)

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^\varepsilon(\dot{\mathbf{u}}^\varepsilon) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i^\varepsilon}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{u}_j^\varepsilon}{\partial x_i} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i^\varepsilon}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{u}_j^\varepsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial M_{\varphi i}^\varepsilon}{\partial x_j} \llbracket \dot{u} \rrbracket_i^\varepsilon + \frac{\partial M_{\varphi j}^\varepsilon}{\partial x_i} \llbracket \dot{u} \rrbracket_j^\varepsilon \right) + \frac{1}{2} \left(M_{\varphi i}^\varepsilon \frac{\partial \llbracket \dot{u} \rrbracket_i^\varepsilon}{\partial x_j} + M_{\varphi j}^\varepsilon \frac{\partial \llbracket \dot{u} \rrbracket_j^\varepsilon}{\partial x_i} \right) \end{aligned} \quad (4.36)$$

(構成式)

$$\dot{\sigma}_{ij} = (1 - d)C_{ijkl}\dot{\epsilon}_{kl} \quad (4.37)$$

$$\begin{cases} \dot{d} = 0 \text{ (unloading)} : & C_{ijkl}^D = (1 - d)C_{ijkl} \\ \dot{d} \neq 0 \text{ (loading)} : & C_{ijkl}^D = (1 - d)\left(C_{ijkl} - \frac{1}{1 + H} \frac{\tau_0}{(\tau^\sigma)^3} \sigma_{ij} \sigma_{kl}\right) \end{cases} \quad (4.38)$$

ここで、 d はスカラー損傷変数、 C は線形等方弾性体の構成テンソルである。

4.2.3 釣り合い式の漸近展開

式(4.30)を使って $\dot{u}^\varepsilon$ に対する漸近展開を、

$$\dot{u}_i^\varepsilon(\mathbf{x}) = \dot{u}_i^0(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) + \varepsilon \dot{u}_i^1(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) + \varepsilon^2 \dot{u}_i^2(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) + \cdots, \quad (4.39)$$

$$\dot{u}_i^\alpha(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) = \dot{u}_i^\alpha(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1 + \mathbf{X}^1); \quad \alpha = 0, 1, 2, \dots \quad (4.40)$$

$$\dot{u}_i^\alpha(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) = \dot{u}_i^\alpha(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) + M_{\varphi i}^\alpha(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1)[[\dot{u}]]_i^\alpha(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1); \quad \alpha = 0, 1, 2, \dots \quad (4.41)$$

と導入する。式(4.29)を考慮してこれらを式(4.36)に代入すると、

$$\dot{\epsilon}_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \frac{1}{\varepsilon} \dot{\epsilon}_{ij}^{0x^1} + (\dot{\epsilon}_{ij}^{0x^0} + \dot{\epsilon}_{ij}^{1x^1}) + \varepsilon (\dot{\epsilon}_{ij}^{1x^0} + \dot{\epsilon}_{ij}^{2x^1}) + \cdots \quad (4.42)$$

を得る。ここで、

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}_{ij}^{0x^1} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i^0}{\partial x_j^1} + \frac{\partial \dot{u}_j^0}{\partial x_i^1} \right), & \dot{\epsilon}_{ij}^{0x^0} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial \dot{u}_j^0}{\partial x_i^0} \right), & \dot{\epsilon}_{ij}^{1x^1} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i^1}{\partial x_j^1} + \frac{\partial \dot{u}_j^1}{\partial x_i^1} \right), \\ \dot{\epsilon}_{ij}^{1x^0} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial \dot{u}_j^1}{\partial x_i^0} \right), & \dot{\epsilon}_{ij}^{2x^1} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \dot{u}_i^2}{\partial x_j^1} + \frac{\partial \dot{u}_j^2}{\partial x_i^1} \right), & \dots & \end{aligned}$$

である。

構成式(4.37)を用いると、 σ^ε はつぎのように書ける。

$$\dot{\sigma}_{ij}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \frac{1}{\varepsilon} \dot{\sigma}_{ij}^0 + \dot{\sigma}_{ij}^1 + \varepsilon \dot{\sigma}_{ij}^2 + \cdots \quad (4.43)$$

$$\dot{\sigma}_{ij}^0 = C_{ijkl}^D \dot{\epsilon}_{kl}^{0x^1}, \quad \dot{\sigma}_{ij}^1 = C_{ijkl}^D (\dot{\epsilon}_{kl}^{0x^0} + \dot{\epsilon}_{kl}^{1x^1}), \quad \dot{\sigma}_{ij}^2 = C_{ijkl}^D (\dot{\epsilon}_{kl}^{1x^0} + \dot{\epsilon}_{kl}^{2x^1})$$

これらを釣合方程式(4.31)に代入すると、

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^\varepsilon}{\partial x_j} = \frac{1}{\varepsilon^2} \boxed{\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^0}{\partial x_j^1}} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\boxed{\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^1}{\partial x_j^1}} \right) + \left(\boxed{\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^2}{\partial x_j^1}} \right) + \cdots = \boxed{-\dot{f}_i}. \quad (4.44)$$

$\boxed{} \quad O(\varepsilon^{-2})\text{項}$
 $\boxed{} \quad O(\varepsilon^{-1})\text{項}$
 $\boxed{} \quad O(\varepsilon^0)\text{項}$

である。

上式の ε^α ($\alpha = -2, -1, 0, 1, \dots$) のそれぞれの項から $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限において 0 となるように等式を立てると、以下の関係が導かれる。

$O(\varepsilon^{-2})$ 項について

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^0}{\partial x_j^1} = 0 \quad (4.45)$$

これより、 $\sigma_{ij}^0(x^0, x^1) = \sigma_{ij}^0(x^0)$ とすることができる。また $\varepsilon \rightarrow 0$ のとき ε^{-1} 項が有界であるためには $\sigma_{ij}^0 = 0$ でなければならない。

以上より、定数項を除き $u_i^0(x^0, x^1) = u_i^0(x^0)$ とできることが判る。すなわち、 u_i^0 は巨視的座標 x^0 のみに依存しており、微視的には独立な項となる。換言すると、変位は平均的巨視的変位 u_i^0 と摂動的微視的変位 $u_i^1, u_i^2 \dots$ に分解可能である。

ここで、式(4.42)のひずみを以下のように近似する。

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^\varepsilon \simeq \dot{\varepsilon}_{ij}^{0x^0} + \dot{\varepsilon}_{ij}^{1x^1} \quad (4.46)$$

$O(\varepsilon^{-1})$ 項について(微視的スケール問題)

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^0}{\partial x_j^0} + \frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^1}{\partial x_j^1} = 0 \quad (4.47)$$

式(4.45)より $\sigma_{ij}^0 = 0$ なので、

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^1}{\partial x_j^1} = 0 \quad (4.48)$$

となる。すなわち、

$$\frac{\partial}{\partial x_j^1} \{ C_{ijkl}^D (\dot{\varepsilon}_{kl}^{0x^0} + \dot{\varepsilon}_{kl}^{1x^1}) \} = 0 \quad (4.49)$$

であるが、周期条件より、

$$\dot{u}_i^1(x^0, x^1) = \dot{u}_i^1(x^0, x^1 + X^1) \quad (4.50)$$

であることに注意する。よって、式(4.49)は以下のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial x_j^1} \{ C_{ijrs}^D (\dot{\varepsilon}_{rs}^{0x^0}(x^0) + \dot{\varepsilon}_{rs}^{1x^1}(x^0, x^1)) \} = 0 \quad (4.51)$$

ここで、特性変位関数 $x_i^{kl}(x^1)$ をつぎのように定義する。

$$\begin{aligned} \dot{u}_i^1(x^0, x^1) &= -\chi_i^{kl}(x^1) \frac{\partial \dot{u}_k^0}{\partial x_l^0} + C_i(x^0), \quad \dot{u}_i^1(x^0, x^1) = -\hat{\chi}_i^{kl}(x^1) \frac{\partial \dot{u}_k^0}{\partial x_l^0} + C_i(x^0) \\ \llbracket \dot{u}_i \rrbracket^1(x^0, x^1) &= -\llbracket \chi_i \rrbracket^{kl}(x^1) \frac{\partial \dot{u}_k^0}{\partial x_l^0} + C_i(x^0) \end{aligned} \quad (4.52)$$

ここで、ユニットセルの領域で $\|u\|$ は一定値である、すなわち、 $\partial \|u\|_i^0 / \partial x_l^0 = 0$ と仮定して、式(4.52)

に代入すると、

$$\frac{\partial \dot{u}_k^1}{\partial x_j^1}(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) = -\frac{\partial \dot{u}_k^0}{\partial x_j^0} \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_j^1} + \frac{\partial (M_{\varphi k} \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs})}{\partial x_j^1} \right) = -\frac{\partial \dot{u}_k^0}{\partial x_j^0} \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_j^1} + \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_j^1} \right) \quad (4.53)$$

となる。

式(4.53)を式(4.51)に代入し、 $\partial \dot{u}_k^0 / \partial x_l^0$ は $\mathbf{x}^0$ のみの関数であることに注意して正規化すると、

$$\frac{\partial}{\partial x_j^1} \left\{ C_{ijrs}^D \left(\delta_{rk} \delta_{sl} - \frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_l^1} - \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_l^1} \right) \right\} = 0 \quad (4.54)$$

となる。この式が x_l^{rs} を未知関数とする微視的問題を与える微分方程式である(境界条件は周期条件)。なお、式(4.54)を弱形式でつぎのように表すことができる。

$$\int_{\Omega_1} (1-d) C_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{rs}}{\partial x_l^1} \frac{\partial v_i}{\partial x_j^1} d\mathbf{x}^1 = \int_{\Omega_1} (1-d) C_{ijrs} \frac{\partial v_i}{\partial x_j^1} d\mathbf{x}^1 \quad (4.55)$$

ここで v_i は $\mathbf{x}^1$ に関する任意の関数(仮想変位)である。

式(4.34)は応力連続の下で与えられているので、積分して、

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle \dot{\sigma}_{ij}^1 n_j \rangle}_{\text{in } \varphi} - \underbrace{\langle \dot{\sigma}_{ij}^1 n_j \rangle}_{\text{in } \Omega_1 \setminus \varphi} &= \frac{1}{|l_1|} \int_{\varphi} \dot{\sigma}_{ij}^1 n_j d\mathbf{x}^1 - \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1 \setminus \varphi} \dot{\sigma}_{ij}^1 n_j d\mathbf{x}^1 \\ &= \int_{\Omega_1} \left[\left(\delta_{\varphi} - \frac{|l_1|}{|\Omega_1|} \right) n_j \right] \dot{\sigma}_{ij}^1 d\mathbf{x}^1 \\ &= \int_{\Omega_1} \left[\left(\delta_{\varphi} - \frac{|l_1|}{|\Omega_1|} \right) n_j \right] C_{ijrs}^D \frac{\partial \dot{u}_k^1}{\partial x_l^0} d\mathbf{x}^1 \\ &= C_{ijrs}^D \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_l^1} + \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_l^1} \right) G_j^* = 0 \end{aligned} \quad (4.56)$$

である。ここで、

$$G_j^* = \left(\delta_{\varphi} - \frac{|l_1|}{|\Omega_1|} \right) n_j \quad (4.57)$$

とした。なお、式(4.56)の弱形式は、

$$\int_{\Omega} C_{ijrs}^D \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_l^1} + \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_l^1} \right) G_j^* w_i d\mathbf{x}^1 = 0 \quad (4.58)$$

と与えられる。ここで、 w_i は巨視的座標系 $\mathbf{x}^0$ における任意関数である。

$O(\varepsilon^0)$ 項について(巨視的スケール問題)

式(4.44)から、

$$\frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^1}{\partial x_j^0} + \frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^2}{\partial x_j^1} = -\dot{f}_i^\varepsilon \quad (4.59)$$

である。いま、任意関数 ϕ のユニットセルにおける平均化演算子をつぎのように定義する。

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} \phi \, d\mathbf{x}^1 \quad (4.60)$$

ここで、 $|\Omega_1|$ はユニットセルの体積である。式(4.59)の左辺第2項について平均化を行うと、 σ_{ij}^2 の周期性から、

$$\left\langle \frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^2}{\partial x_j^1} \right\rangle = \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} \frac{\partial \dot{\sigma}_{ij}^2}{\partial x_j^1} d\mathbf{x}^1 = \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\partial\Omega^1} \dot{\sigma}_{ij}^2 n_j \, d\Gamma = 0 \quad (4.61)$$

であるので、式(4.59)全体をユニットセル Ω_1 について平均化した結果、

$$\frac{\partial \langle \dot{\sigma}_{ij}^1 \rangle}{\partial x_j^0} + \langle \dot{f}_i \rangle = 0 \quad (4.62)$$

となる。変位境界条件も同様に平均化を施すと、

$$\langle \dot{u}_i^0 \rangle = \bar{\langle u_i \rangle} \quad \text{on } \Gamma_u \quad (4.63)$$

である。平均化構成式は以下ようになる。

$$\begin{aligned} \langle \dot{\sigma}_{ij}^1 \rangle &= \langle C_{ijkl}^D \{ \dot{\varepsilon}_{kl}^{0x^0}(\mathbf{x}^0) + \dot{\varepsilon}_{kl}^{1x^1}(\mathbf{x}^0, \mathbf{x}^1) \} \rangle \\ &= \left\langle C_{ijkl}^D \left\{ \dot{\varepsilon}_{kl}^{0x^0}(\mathbf{x}^0) - \frac{\partial \chi_k^{rs}(\mathbf{x}^1)}{\partial x_j^1} \dot{\varepsilon}_{kl}^{0x^0}(\mathbf{x}^0) \right\} \right\rangle \\ &= \left\langle C_{ijkl}^D (\delta_{rk} \delta_{ls} - \frac{\partial \chi_k^{rs}(\mathbf{x}^1)}{\partial x_j^1}) \right\rangle \dot{\varepsilon}_{rs}^{0x^0}(\mathbf{x}^0) \\ &= C_{ijrs}^H \frac{\partial \dot{u}_r^0}{\partial x_s^0} \end{aligned} \quad (4.64)$$

ここで、

$$C_{ijkl}^H = \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} \left[C_{ijrs}^D \left(\delta_{rk} \delta_{ls} - \frac{\partial \chi_k^{rs}}{\partial x_j^1} \right) \right] d\mathbf{x}^1 \quad (4.65)$$

と置いた。なお、式(4.55)は、

$$\int_{\Omega_1} C_{qnp m}^D \left(\delta_{qi} \delta_{nj} - \frac{\partial \chi_q^{ij}}{\partial x_n^1} \right) \frac{\partial v_p(\mathbf{x}^1)}{\partial x_m^1} d\mathbf{x}^1 = 0 \quad (4.66)$$

と書けるので $\nu_p(\mathbf{x}^1) = \chi_p^{kl}(\mathbf{x}^1)$ と置くと、

$$\int_{\Omega_1} C_{qnp m}^D \left(\delta_{qi} \delta_{nj} - \frac{\partial \chi_q^{ij}}{\partial x_n^1} \right) \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial x_m^1} d\mathbf{x}^1 = 0 \quad (4.67)$$

となる。式(4.65)に平均化演算を施し式(4.67)に加えると、 C^H が対称化された形として以下のようになることが判る。

$$C_{ijkl}^H = \frac{1}{|\Omega_1|} \int_{\Omega_1} C_{qnp m}^D(\mathbf{x}^1) \left(\delta_{qi} \delta_{nj} - \frac{\partial \chi_q^{ij}}{\partial x_n^1} \right) \left(\delta_{pk} \delta_{ml} - \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial x_m^1} \right) d\mathbf{x}^1 \quad (4.68)$$

なお、式(4.62)は、

$$\frac{\partial}{\partial x_j^0} \left(C_{ijrs}^H \frac{\partial i_r^0}{\partial x_s^0} \right) + f_i^H = 0; \quad f_i^H = \langle \dot{f}_i \rangle \quad (4.69)$$

となる。この式が巨視的座標系 $\mathbf{x}^0$ で表された全体構造物的巨視的方程式である。

式(4.69)を弱形式化すると、

$$\int_{\Omega} C_{ijrs}^H \frac{\partial i_r^0}{\partial x_s^0} \frac{\partial w_i}{\partial x_j^0} d\mathbf{x}^0 = \int_{\Omega} f_i^H w_i d\mathbf{x}^0 + \int_{\partial\Omega} \bar{t}_i w_i d\mathbf{x}^0 \quad \forall w_i (w_i = 0 \text{ on } \Gamma_u) \quad (4.70)$$

となる。

4.3 有限要素法の適用

弱形式化した微視的スケールの方程式と巨視的スケールの方程式は、有限要素法による数値解析によってその解を求めることができる。

4.3.1 微視的スケールの方程式の有限要素近似

弱形式化した微視的スケールの方程式を再掲する。

$$\int_{\Omega_1} C_{ijkl}^D \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_l^1} + \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_l^1} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j^1} d\mathbf{x}^1 = \int_{\Omega_1} C_{ijrs}^D \frac{\partial v_i}{\partial x_j^1} d\mathbf{x}^1 \quad (4.71)$$

不連続面 $(M_{\varphi})_{r\alpha}$ を含む α - 有限要素に対して、要素形状関数 N_{α}^e を使って、

$$(M_{\varphi})_{r\alpha}(\mathbf{x}^1) = (H_{\varphi})_{r\alpha}(\mathbf{x}^1) - \phi_{r\alpha}^h(\mathbf{x}^1) = (H_{\varphi})_{r\alpha}(\mathbf{x}^1) - N_{r\alpha}^e(\mathbf{x}^1) \quad (4.72)$$

$$\frac{\partial (M_{\varphi})_{r\alpha}}{\partial x_s^1} = (\delta_{\varphi})_{r\alpha} n_s - \frac{\partial N_{r\alpha}^e}{\partial x_s^1} \quad (4.73)$$

と書く。要素形状関数 N_{α}^e によって生成された大域形状関数 N_{α} を適用すると、形状関数の連続部分 $\hat{\chi}_r^1$ と不連続部分 $\|\chi_r\|^1$ 、および任意関数 ν_i は以下のように有限要素近似される。

$$\hat{\chi}_k^{rs} \simeq \sum_{\alpha=1}^m N_{\alpha} \hat{\chi}_{k\alpha}^{rs} \quad (4.74)$$

$$\llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \simeq \sum_{\alpha=1}^m \llbracket \chi_k \rrbracket_{\alpha}^{rs} \quad (4.75)$$

$$v_i \simeq \sum_{\alpha=1}^m N_{\alpha} v_{i\alpha} \quad (4.76)$$

これらの形状関数を適用すると、式(4.71)は、

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_1} C_{ijkl}^D \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_j^1} + \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_j^1} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j^1} d\mathbf{x}^1 - \int_{\Omega_1} C_{ijrs}^D \frac{\partial v_i}{\partial x_j^1} d\mathbf{x}^1 \\ & \simeq \int_{\Omega_1} C_{ijkl}^D \sum_{\beta=1}^m \frac{\partial N_{\beta}}{\partial x_l^1} \hat{\chi}_{k\beta}^{rs} \sum_{\alpha=1}^m \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial x_j^1} v_{i\alpha} d\mathbf{x}^1 + \int_{\Omega_1} C_{ijkl}^D \sum_{\beta=1}^m \llbracket \chi_k \rrbracket_{\beta}^{rs} \left((\delta_{\varphi})_{k\beta} n_l - \frac{\partial N_{k\beta}}{\partial x_l^1} \right) \sum_{\alpha=1}^m \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial x_j^1} v_{i\alpha} d\mathbf{x}^1 \\ & \quad - \int_{\Omega_1} C_{ijrs}^D \sum_{\alpha=1}^m \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial x_j^1} v_{i\alpha} d\mathbf{x}^1 = 0 \end{aligned} \quad (4.77)$$

と離散化される。したがって、

$$\sum_{\beta=1}^m \left(\mathbf{K}_{\alpha\beta}^D \hat{\chi}_{\beta} + \mathbf{G}_{\alpha\beta} \llbracket \chi_{\beta} \rrbracket \right) = \mathbf{F}_{\alpha} \quad (4.78)$$

である。ここで、

$$\mathbf{K}_{\beta\alpha}^D = \int_{\Omega_1} \mathbf{C}^D \frac{\partial N_{\beta}}{\partial \mathbf{x}^1} \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial \mathbf{x}^1} d\mathbf{x}^1, \quad \mathbf{F}_{\alpha} = \int_{\Omega_1} \mathbf{C}^D \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial \mathbf{x}^1} d\mathbf{x}^1 \quad (4.79)$$

$$\mathbf{G}_{\beta\alpha} = \int_{\Omega_1} \mathbf{C}^D \left(\delta_{\varphi\beta} \mathbf{n} - \frac{\partial N_{\beta}}{\partial \mathbf{x}^1} \right) \frac{\partial N_{\alpha}}{\partial \mathbf{x}^1} d\mathbf{x}^1 \quad (4.80)$$

とした。

$\delta v_{i\alpha}$ は微視的領域 Ω_1 における任意関数であるので、式(4.78)の両辺を $\delta v_{i\alpha}$ で割ると、

$$[\mathbf{K}^D] \{\hat{\chi}\} + [\mathbf{G}] \{\llbracket \chi \rrbracket\} = \{\mathbf{F}\} \quad (4.81)$$

を得る。ここで、 $[\cdot]$ は行列、 $\{\cdot\}$ はベクトルを表す。

つぎに、応力ベクトルの連続式は、

$$\int_{\Omega_1} C_{ijrs}^D \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_j^1} + \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_j^1} \right) G_j^{\star} v_i d\mathbf{x}^1 = 0. \quad (4.82)$$

であるので、同じ形状関数を用いると、式(4.82)は、

$$\int_{\Omega_1} C_{ijrs}^D \left\{ \sum_{\beta=1}^m \frac{\partial N_{\beta}}{\partial x_j^1} \hat{\chi}_{k\beta}^{rs} + \sum_{\beta=1}^m \llbracket \chi_k \rrbracket_{\beta}^{rs} \left((\delta_{\varphi})_{k\beta} n_s - \frac{\partial N_{\beta}}{\partial x_j^1} \right) \right\} G_j^{\star} \sum_{\alpha=1}^m N_{\alpha} v_{i\alpha} d\mathbf{x}^1 = 0 \quad (4.83)$$

と計算される。すなわち、

$$\sum_{\beta=1}^m \left(\mathbf{K}_{\alpha\beta}^C \hat{\chi}_{\beta} + \mathbf{G}_{\alpha\beta}^C \llbracket \chi_{\beta} \rrbracket \right) = 0 \quad (4.84)$$

である。ここで、

$$\mathbf{K}_{\beta\alpha}^C = \int_{\Omega_1} \mathbf{C}^D \frac{\partial N_\beta}{\partial \mathbf{x}^1} N_\alpha d\mathbf{x}^1 \quad (4.85)$$

$$\mathbf{G}_{\beta\alpha}^C = \int_{\Omega_1} \mathbf{C}^D \left(\delta_{\varphi\beta} \mathbf{n} - \frac{\partial N_\beta}{\partial \mathbf{x}^1} \right) N_\alpha d\mathbf{x}^1 \quad (4.86)$$

と置いた。行列式で書き直すと、

$$[\mathbf{K}^C] \{\hat{\chi}\} + [\mathbf{G}^C] \{\llbracket \chi \rrbracket\} = \{\mathbf{0}\} \quad (4.87)$$

である。

結論として、ユニットセルにおける微分方程式は、有限要素離散化により以下のような連立一次方程式に書けることになる。

$$\left[\begin{array}{c} \mathbf{K} \end{array} \right] \left\{ \begin{array}{c} \hat{\chi} \\ \llbracket \chi \rrbracket \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{F} \\ \mathbf{0} \end{array} \right\}; \quad \left[\begin{array}{c} \mathbf{K} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} \mathbf{K}^D & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^C & \mathbf{K}^C \end{array} \right] \quad (4.88)$$

4.3.2 巨視的スケールの方程式の有限要素近似

弱形式化した巨視的スケールの方程式を再掲する。

$$\int_{\Omega_1} C_{ijrs}^D \left(\frac{\partial \hat{\chi}_k^{rs}}{\partial x_j^1} + \llbracket \chi_k \rrbracket^{rs} \frac{\partial M_{\varphi k}}{\partial x_j^1} \right) G_j^* v_i d\mathbf{x}^1 = 0 \quad (4.89)$$

微視的問題と同様に、通常の形状関数 N_α と不連続面を含む要素における通常の線形形状関数 N_α^e を用いて、変位場の連続部分 $\hat{u}_r^0$ とジャンプ関数 $\llbracket u \rrbracket_r^0$ と任意のベクトル関数 w_i を次のように有限要素近似する。

$$\hat{u}_r^0 \simeq \sum_{\alpha=1}^m N_\alpha \hat{u}_{r\alpha}^0 \quad (4.90)$$

$$w_i \simeq \sum_{\alpha=1}^m N_\alpha w_{i\alpha} \quad (4.91)$$

式(4.90)、(4.91)を、式(4.89)に代入すると次式を得る。

$$\int_{\Omega} C_{ijrs}^H \left(\sum_{\beta=1}^m \frac{\partial N_\beta}{\partial x_s^0} \hat{u}_{r\beta}^0 \right) \sum_{\alpha=1}^m \frac{\partial N_\alpha}{\partial x_j^0} w_{i\alpha} d\mathbf{x}^0 = \int_{\Omega} \sum_{\alpha=1}^m \hat{f}_i^H N_\alpha w_{i\alpha} d\mathbf{x}^0 + \int_{\partial\Omega} \sum_{\alpha=1}^m \bar{t}_i N_\alpha w_{i\alpha} d\mathbf{x}^0 \quad (4.92)$$

これは、結局、

$$\sum_{\beta=1}^m \mathbf{K}_{\alpha\beta} \hat{u}_\beta^0 = \hat{f}_\alpha \quad (4.93)$$

を意味している。ここで、

$$\mathbf{K}_{\alpha\beta} = \int_{\Omega_1} \mathbf{C}^H \frac{\partial N_\alpha}{\partial \mathbf{x}^1} \frac{\partial N_\beta}{\partial \mathbf{x}^1} d\mathbf{x}^0, \quad \hat{f}_\alpha = \int_{\Omega} \hat{f}^H N_\alpha d\mathbf{x}^0 + \int_{\partial\Omega} \bar{t} N_\alpha d\mathbf{x}^0 \quad (4.94)$$

である。行列形式で書くと、

$$[K]\{\dot{u}^0\} = \{\dot{f}\} \quad (4.95)$$

となる。

4.3.3 デルタ関数の近似と積分規則

式(4.88)の要素接線剛性マトリックスに用いられる $G^\star$ はデルタ関数を含んでおり、数値解析で直接扱うことは困難であるため、デルタ関数の近似を行う。要素内を横切る不連続面 φ_e を含む十分小さな幅 k の帯 Ω_e^k を考え、不連続面で非有界なデルタ関数を以下のように近似する。

$$\delta_{\varphi_e}^k = \begin{cases} \frac{1}{k}, & \mathbf{x} \in \Omega_e^k \\ 0, & \mathbf{x} \notin \Omega_e^k \end{cases} \quad (4.96)$$

すなわち、 φ_e は十分小さな幅 k の帯 Ω_e^k で近似され、デルタ関数は k の逆数で近似される。

式(4.82)の面積積分は、図 4.5 のように、通常の三角形定ひずみ要素と異なり、被積分項が要素内一定でなく、 Ω_e^k とそれ以外の部分で C^H 、 G 、 $G^\star$ の値が異なるので、それぞれの領域で積分点を設け、表 4.1 のようにそれぞれの面積で重みづけした区分的な面積積分を行う。

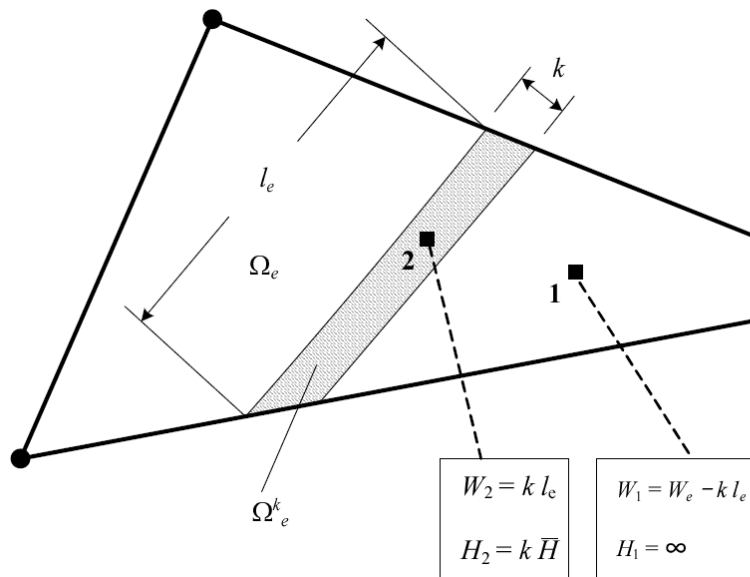


図 4.5 不連続面積積分規則³⁾

表 4.1 積分規則

積分点	領域	重み	軟化パラメータ
1	$\Omega_e \setminus \Omega_e^k$	$\Omega_e - k l_e$	∞
2	Ω_e^k	$k l_e$	$k \bar{H}$

4.3.4 不連続面の傾角 θ_e と単位法線ベクトル n_e

等方損傷モデルを考える。三角形要素 Ω_e の第二積分点におけるひずみを $\varepsilon_2^0 = \{\varepsilon_{xx}^0, \varepsilon_{yy}^0, 2\varepsilon_{cy}^0\}_2$ とすると、第二積分点を通る不連続面の傾角 θ_e は、

$$\theta_e = \tan^{-1} \left[\frac{\varepsilon_{xy}^0 \pm \sqrt{(\varepsilon_{xy}^0)^2 - \varepsilon_{xx}^0 \varepsilon_{yy}^0}}{\varepsilon_{xx}^0} \right]_2 \quad (4.97)$$

で定義できる。ここで、 $(\cdot)^0$ は不連続面発生時の各ひずみの値、 $(\cdot)_2$ は要素の第二積分点の値であることを表す。一方、不連続面の単位法線ベクトル $n_e = \{n_x, n_y\}$ は、

$$n_x = \cos \theta_e, \quad n_y = \sin \theta_e \quad (4.98)$$

となる。

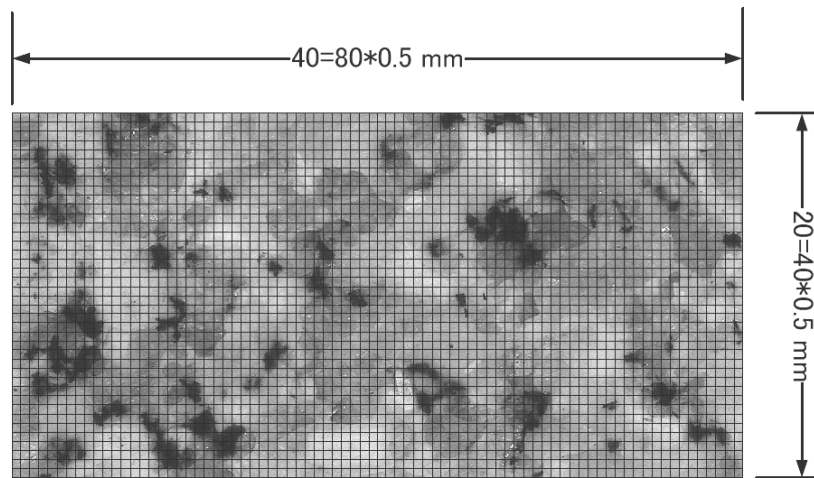
4.4 土岐花崗岩を対象とした一軸圧縮実験の数値解析による再現

均質化強不連続解析を適用して土岐花崗岩の変形破壊解析を実施する。

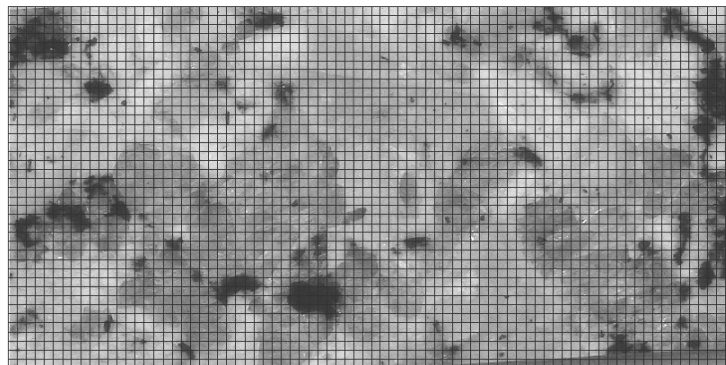
4.4.1 解析モデルの作成

a) 花崗岩供試体の観察

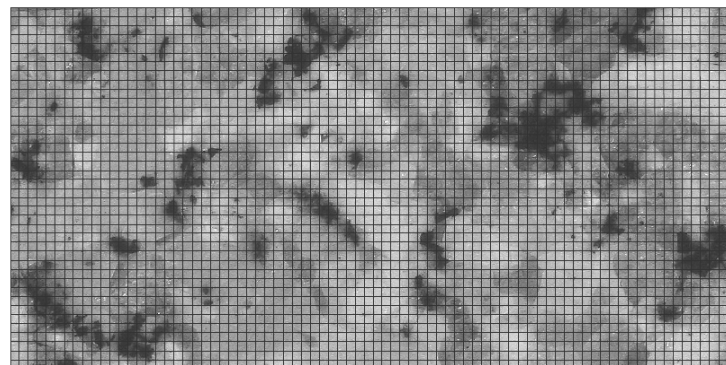
超深地層研究所用地内の深層ボーリング(MIZ-1 号孔)の区間深度 663.88～664.00m から採取したボーリングコアより、図 3.1、図 3.2 のように切り出した花崗岩供試体を用いて、顕微鏡写真を撮影し、その写真上に 0.5mm 間隔でメッシュを被せてポイントカウンター法で鉱物組成を決定した(図 4.6)。得られた鉱物組成を表 4.2 に示す。



(a) Sample GR-1



(b) Sample GR-2



(3) Sample GR-3

図 4.6 土岐花崗岩サンプルとポイントカウンター用メッシュ

表 4.2 土岐花崗岩の鉱物組成

	石英 (Q)	長石 (F)	黒雲母 (B)
GR-1	36.30	54.89	8.81
GR-2	36.77	54.86	8.38
GR-3	30.27	59.00	10.73
平均	34.44	56.25	9.31

b) ユニットセルモデルと材料定数

図 4.6 を参照に、3 種のユニットセルのモデルを作成した(図 4.7)。このユニットセルに適用する材料定数は、各鉱物結晶の分子動力学シミュレーション¹⁴⁾を参考に、表 4.3 のように定めた。また、表 4.3 中の r_0 , $r_{\max}$ は、式(4.11)中の損傷場パラメータで、計算結果が 3.2.1 で述べた一軸圧縮試験の結果等にフィットするよう試行錯誤で定めている。なお、深度 100m 地点(表中 D100 と記載)と同 600m 地点(D600 と記載)を想定して、計算では 2 種類の損傷場パラメータを用意した。

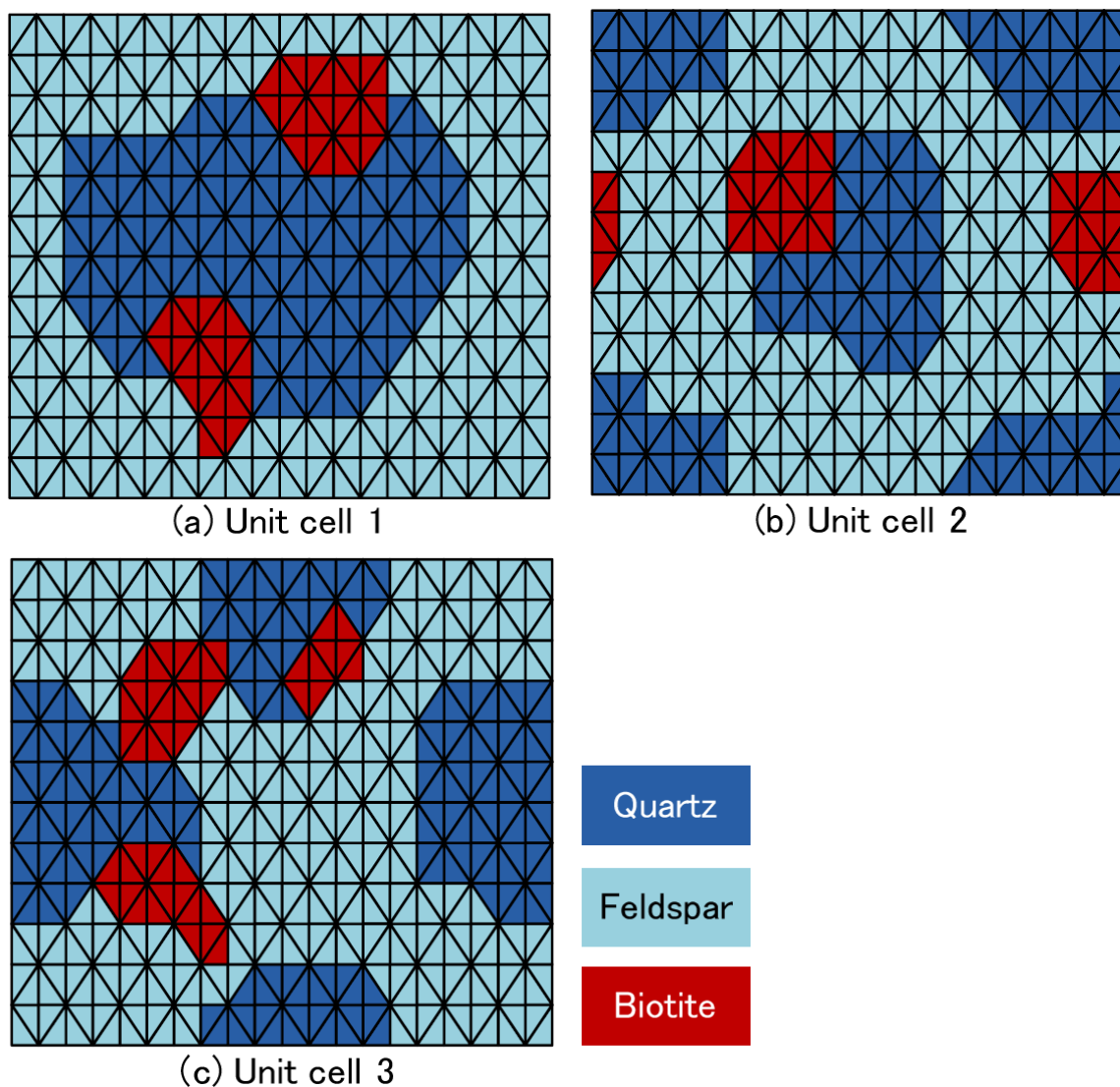


図 4.7 土岐花崗岩のユニットセルモデル

表 4.3 各鉱物の材料定数

	弾性定数 (GPa)	ポアソン比	r_0 (GPa) ^{1/2}		$r_{\max}$ (GPa) ^{1/2}		組成 (%)
			D100	D600	D100	D600	
石英 (Q)	95.6	0.079	0.0165	1.5	0.015	1.3	34.4
長石 (F)	69.7	0.301	0.008	1.3	0.007	1.0	56.3
黒雲母 (B)	88.1	0.248	0.019	1.6	0.017	1.5	9.3

4.4.2 数値解析で得られた応力-ひずみ関係

図 3.6 で示した载荷装置による一軸圧縮実験を想定した解析を行った。すなわち、1 端面は固定し、反対の端面に一定の分布荷重の増分を与えている。

D100 の材料定数等で計算した応力・ひずみ関係を横ひずみと共に図 4.8 に示す。同様に、D600 の場合を図 4.9 に示す。深度が深い D600 の材料定数等のほうが、損傷を受けている割合が大きいので、一軸圧縮実験を実施したときの供試体はより早く降伏域に入ると思われ、計算結果はそれを再現している。ただし、今回の計算では軟化域までの再現はできておらず、この点は今後の課題と考えられる。

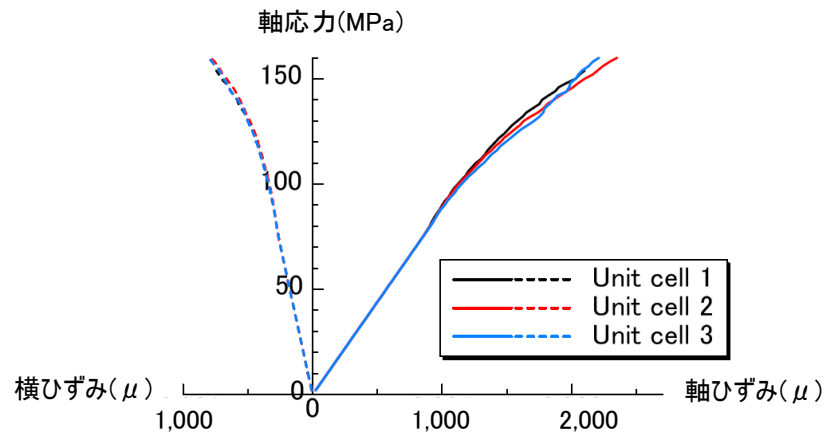


図 4.8 D100 の材料定数等で計算した応力・ひずみ関係

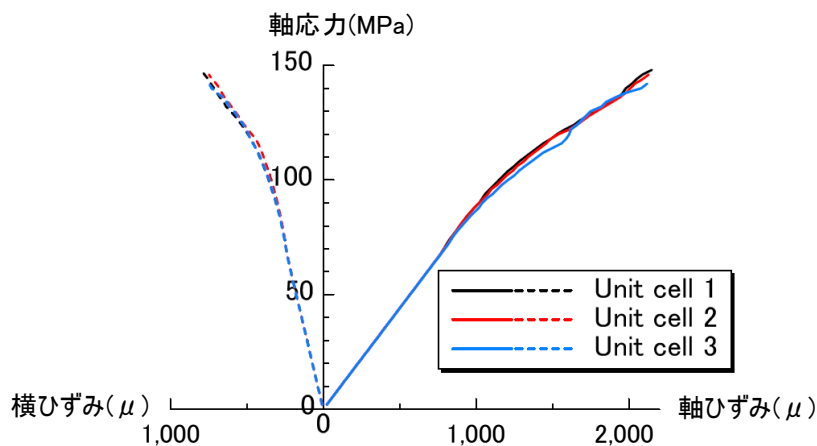


図 4.9 D600 の材料定数等で計算した応力・ひずみ関係

4.4.3 数値解析で得られたマイクロクラックの進展状況

D100 の材料定数等の供試体に対する一軸応力 $\sigma_{axis} = 130\text{MPa}$ および 140MPa 载荷時のマイクロクラックの進展状況を図 4.10 に示す。同様に、D600 の場合を図 4.11 に示す。図 4.10 と図 4.11 から、石英と長石粒子へ選択的に新しい亀裂が進展していることが理解される。なお、D100 と D600 のモデル間における亀裂進展状況の差は明瞭に認められず、表 4.3 で定めたような損傷パラメータの相違では、違いが表現できていないものと考えられる。

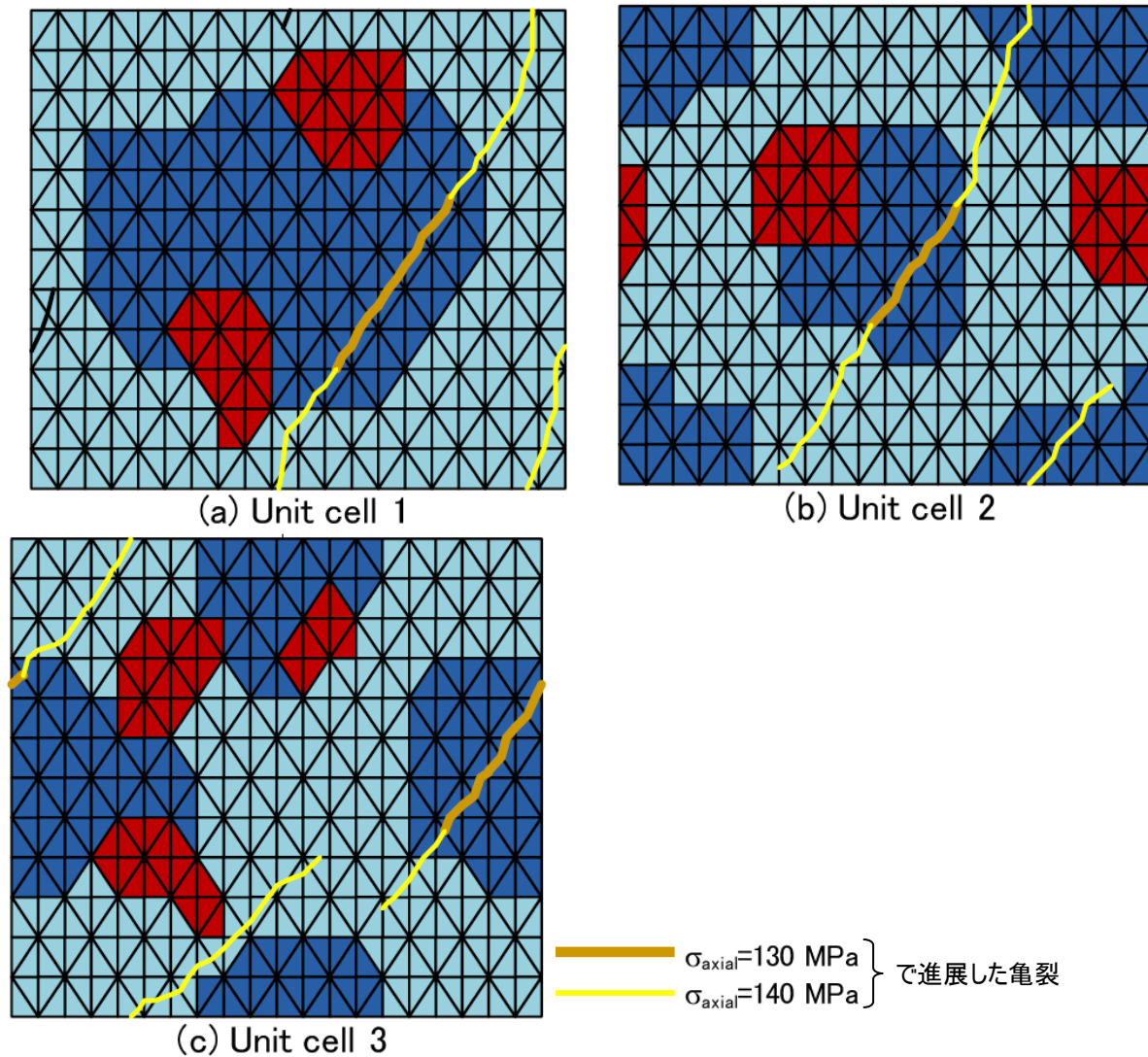


図 4.10 D100 の材料定数等で計算したマイクロクラックの進展

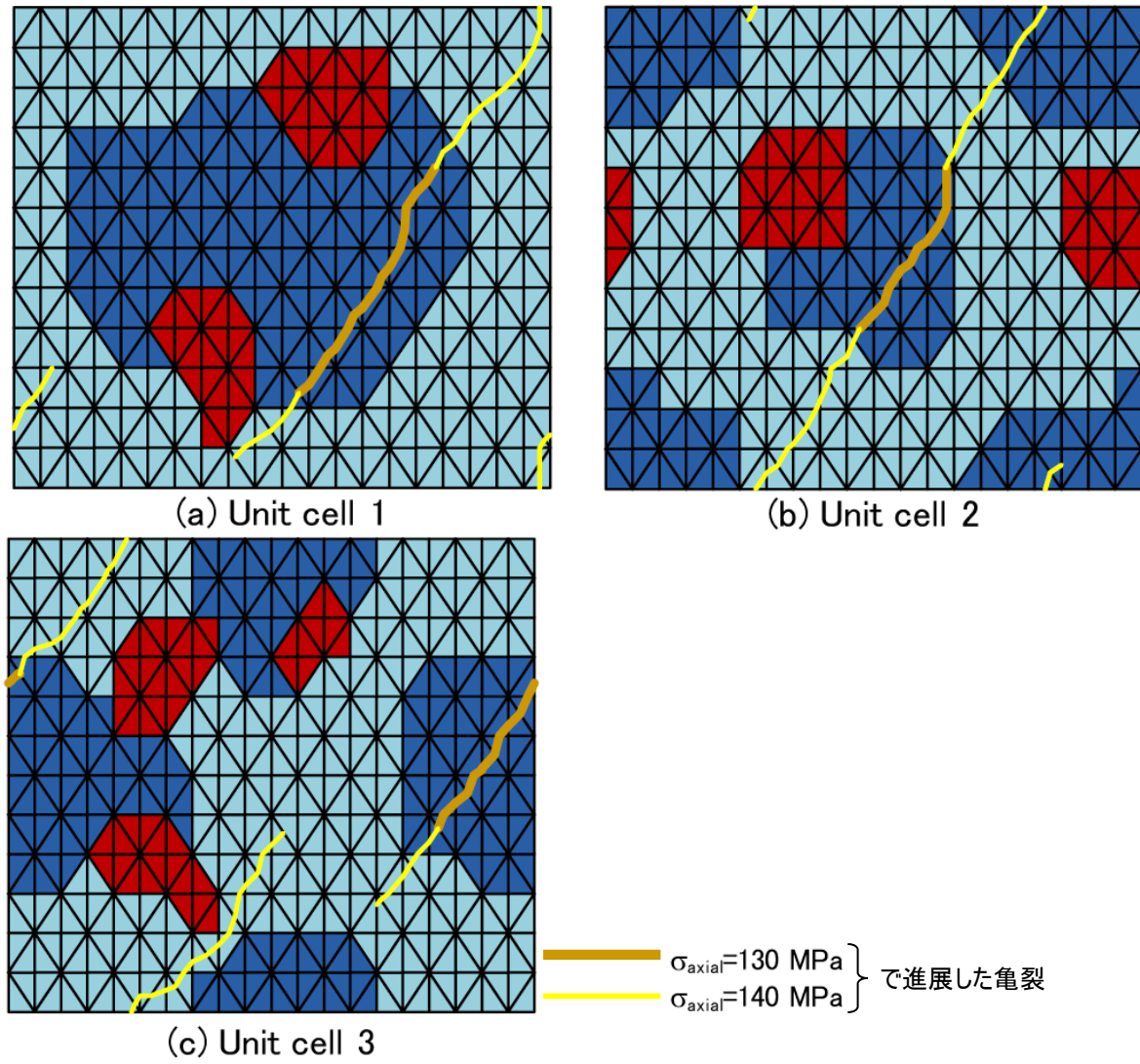


図 4.11 D600 の材料定数等で計算したマイクロクラックの進展

5. まとめ

本年度は、結晶質岩の長期挙動を解明するために、以下に示す三つのテーマの研究を行った。

- (1) 石英の溶解拡散に関する均質化解析
- (2) 土岐花崗岩の一軸圧縮試験並びに応力緩和試験
- (3) 強不連続解析を導入した均質化法による土岐花崗岩の微視的レベルの亀裂進展解析

はじめに、「(1) 石英の溶解拡散に関する均質化解析」で得られた成果は以下のとおりである。昨年度実施したベントナイトを対象とする均質化解析に、含有粘土鉱物であるスメクタイトの層間水が三層水和になる条件を追加し、再計算を行った。その結果、端面が高 pH 溶液に晒されたベントナイトについて、水酸基の濃度分布や溶解速度量が異なるものとなったが、そこから得られる一般的結論は昨年度と同様であることを確認した。以下にその主な結論を再掲する。

- ① 高アルカリ環境下における石英の溶解機構と溶解速度式について検討し、アルカリ環境下における石英の溶解は、水分子がシリカの表面に吸着し、 SiO_4 四面体にある 4 つの結合の全てが加水分解されることで起こることを確認した。
- ② ベントナイトのような多孔質体中の水酸基拡散とそれに伴う石英結晶の溶解は、多孔質体を微視的な周期構造を有したユニットセルで表現したうえで均質化法を適用すると、計算できることを確認した。
- ③ 上記の方法で行った、一次元供試体モデルを例とする定量的な解析結果から、石英の溶解に関して以下のことが明らかとなった。
 - ・ 石英溶解量における温度の影響は非常に大きい
 - ・ ベントナイトの乾燥密度の高い方が、石英溶解に対する遅延効果が大きい
 - ・ 高アルカリ環境との接触面付近では、上記の遅延効果よりも粘土鉱物量に伴って増える反応表面積の影響が大きく、石英溶解量は乾燥密度の高い方が大きくなる
- ④ 以上の研究によって、高アルカリ環境との接触面から浸出したアルカリ成分の拡散による pH の変化と石英の微視的構造および微視的レベルにおける物性を考慮した石英溶解量を定量的に求める手法を開発した。ただし、溶解物の石英以外の鉱物との化学反応による影響については未解明であり今後の課題である。

つぎに、「(2) 土岐花崗岩の一軸圧縮試験並びに応力緩和試験」に関して以下の成果が得られた。

- ① レーザー共焦点顕微鏡観察下における約 1 ヶ月間の応力緩和試験を行い、含水飽和状態の土岐花崗岩に見られる時間依存した変形破壊挙動を検討した。用いた試験装置は本研究のために開発したもので、水浸下での応力-ひずみデータを連続的に記録し、また、走査型レーザー共焦点顕微鏡を用いて、試験中の試験体表面をその場で観察した。
- ② 試験の結果、応力緩和現象が進行している土岐花崗岩の石英と黒雲母の粒子表面と粒界の画像が得られた。また、画像に有限要素近似したひずみ-接点変位の関係を適用し、粒子表面と粒界における局所的なひずみを計算することができた。以上によって、応力緩和時の土岐花崗岩の石英と黒雲母およびそれらの粒界におけるひずみの分布が得られた。そのひずみの分布は、平均ひずみ(体積ひずみ)に対して偏差ひずみ(せん断ひずみ)が相対的に大きく、局所的な変形の要因は主にせん断であることが確認された。

さらに、「(3) 強不連続解析を導入した均質化法による土岐花崗岩のマイクロクラック進展解析」での成果は以下のとおりである。

- ① 微視的な亀裂群を内包する物体を対象とする均質化解析¹³⁾に、**Oliver** 等^{2),3)}の強不連続解析を導入して内部の変位不連続を許した解析を可能とし、土岐花崗岩を対象とする亀裂進展計算が行えることを確認した。
- ② 超深地層研究用地内の深層ボーリング(MIZ-1 号孔)の、掘削深度約 **660m** から採取したボーリングコアで作成した土岐花崗岩供試体を対象として、顕微鏡写真を基にした **0.5mm** 間隔メッシュを用いたポイントカウンター法による鉱物組成を測定した。
- ③ 上記②の顕微鏡写真を基に 3 種類のユニットセルを考えて、これに、各鉱物の分子動力学シミュレーション¹⁴⁾で得た材料定数を適用し、深度 **100m** と **600m** を想定した微視的モデルを作成した。つぎにこのモデルを対象に、①で示した強不連続かつ均質化解析を行って、亀裂進展を計算した。その結果、先在する損傷の多い深度 **600m** のモデルが一軸試験を行うと早い段階から降伏領域に入ることが再現された。ただし、降伏後の軟化域までの計算が行えておらず、軟化域も結晶質岩の長期挙動に関わることから、それは今後の課題である。

参考文献

- 1) 奈良禎太, 大野有希, 今井康暁, 金子勝比古: “花崗岩における応力腐食による亀裂進展現象の異方性および粒径依存性”, 資源と素材, Vol.120, No.1, pp.25-31 (2004).
- 2) Oliver, J.: “MODELLING STRONG DISCONTINUITIES IN SOLID MECHANICS VIA STRAIN SOFTENING CONSTITUTIVE EQUATIONS. PART 1: FUNDAMENTALS”, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.39, Issue 21, pp.3575-3600 (1996).
- 3) Oliver, J.: “MODELLING STRONG DISCONTINUITIES IN SOLID MECHANICS VIA STRAIN SOFTENING CONSTITUTIVE EQUATIONS. PART 2: NUMERICAL SIMULATION”, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.39, Issue 21, pp.3601-3623 (1996).
- 4) Dove, P.M.: “The dissolution kinetics of quartz in sodium chloride solutions at 25 degrees to 300 degrees C”, American J. Sci., Vol.294, pp.665-712 (1994).
- 5) Lasaga, A. C.: “Kinematic Theory in the Earth Sciences”, Princeton Univ. Pr. (1998).
- 6) 河村雄行, 市川 康明: “粘土鉱物と水の物性-分子動力学シミュレーションによる”, 東京大学地震研究所集報, Vol.76, No.3, pp.311-320 (2001).
- 7) Ichikawa, Y., Kawamura, K., Fujii, N., Theramast, N.: “Molecular dynamics and multiscale homogenization analysis of seepage/diffusion problem in bentonite clay s”, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.54, Issue 12, pp.1717-1749 (2002).
- 8) Larsson, R., Runesson, K., Ottosen, N.S.: “Discontinuous displacement approximation for capturing plastic localization”, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.36, Issue 12, pp.2087-2105 (1993).
- 9) Celigoi, C.C.: “On strong discontinuities in anelastic solids. A finite element approach taking a frame indifferent gradient of the discontinuous displacements”, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.49, Issue 6, pp.769-796 (2000).
- 10) Jirasek, M.: “Comparative study on finite elements with embedded discontinuities”, Comput. Meth. Appl. Mech. Eng., Vol.188, num.1-3, pp.307-330 (2000).
- 11) Belytschko, T., Moes, N., Usui, S., Parimi, C.: “Arbitrary discontinuities in finite elements”, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.50, Issue 4, pp.993-1013 (2001).
- 12) Oliver, J., Huespe, A.E., Pulido, M.D.G., Samaniego, E.: “On the strong discontinuity approach in finite deformation settings”, Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.56, Issue 7, pp.1051-1082 (2003).
- 13) Sanchez-Palencia, E.: “Non-Homogeneous Media and Vibration Theory”, Springer-Verlag, Berlin (1980).
- 14) Seo, Y.: “Damage Process in Granite: Experimental Observation, Molecular Dynamics Simulation and Its Homogenization Analysis”, 名古屋大学学位論文 (1999).

国際単位系（SI）

表 1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質の量	モル	mol
光の度	カンデラ	cd

表 2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立方メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度（質量密度）	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
質量体積（比体積）	立法メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
（物質量の）濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率	（数の）1	1

表 5. SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 ²⁴	ヨタ	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	c
10 ¹⁸	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	y

表 3. 固有の名称とその独自の記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(a)	rad		m・m ⁻¹ =1 ^(b)
立体角	ステラジアン ^(a)	sr ^(c)		m ² ・m ⁻² =1 ^(b)
周波数	ヘルツ	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m・kg・s ⁻²
圧力，応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ ・kg・s ⁻²
エネルギー，仕事，熱量	ジュール	J	N・m	m ² ・kg・s ⁻²
工率，放射束	ワット	W	J/s	m ² ・kg・s ⁻³
電荷，電気量	クーロン	C		s・A
電位差（電圧），起電力	ボルト	V	W/A	m ² ・kg・s ⁻³ ・A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² ・kg・s ⁻³ ・A ⁻²
コンダクタンス	ジーメン	S	A/V	m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ³ ・A ²
磁束	ウェーバ	Wb	V・s	m ² ・kg・s ⁻² ・A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg・s ⁻² ・A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² ・kg・s ⁻² ・A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(d)	℃		K
光の度	ルーメン	lm	cd・sr ^(c)	m ² ・m ⁻² ・cd=cd
照度	ルクス	lx	lm/m ²	m ² ・m ⁻⁴ ・cd=m ⁻² ・cd
（放射性核種の）放射能	ベクレル	Bq		s ⁻¹
吸収線量，質量エネルギー分与，カーマ線量当量，周辺線量当量，方向性線量当量，個人線量当量，組織線量当量	グレイ	Gy	J/kg	m ² ・s ⁻²
	シーベルト	Sv	J/kg	m ² ・s ⁻²

- (a) ラジアン及びステラジアンの使用は、同じ次元であっても異なった性質をもった量を区別するときの組立単位の表し方として利点がある。組立単位を形作るときいくつかの用例は表 4 に示されている。
- (b) 実際には、使用する時には記号 rad 及び sr が用いられるが、習慣として組立単位としての記号“1”は明示されない。
- (c) 測光学では、ステラジアンの名称と記号 sr を単位の表し方の中にそのまま維持している。
- (d) この単位は、例としてミリセルシウス度 m℃ のように SI 接頭語を伴って用いても良い。

表 4. 単位の中に固有の名称とその独自の記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘着力のモーメント	パスカル秒	Pa・s	m ⁻¹ ・kg・s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N・m	m ² ・kg・s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg・s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m・m ⁻¹ ・s ⁻¹ =s ⁻¹
流量密度，放射照度	ラジアン毎平方秒	rad/s ²	m・m ⁻¹ ・s ⁻² =s ⁻²
熱容量，エン트로ピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg・s ⁻³
質量熱容量（比熱容量），質量エン트로ピー	ジュール毎平方メートル	J/K	m ² ・kg・s ⁻² ・K ⁻¹
質量エネルギー（比エネルギー）	ジュール毎キログラム	J/(kg・K)	m ² ・s ⁻² ・K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² ・s ⁻² ・K ⁻¹
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m・K)	m・kg・s ⁻³ ・K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ ・kg・s ⁻²
体積電荷	ボルト毎メートル	V/m	m・kg・s ⁻³ ・A ⁻¹
電気変位	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ ・s・A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² ・s・A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ⁻³ ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m・kg・s ⁻² ・A ⁻²
モルエン트로ピー	ジュール毎モル	J/mol	m ² ・kg・s ⁻² ・mol ⁻¹
モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol・K)	m ² ・kg・s ⁻² ・K ⁻¹ ・mol ⁻¹
照射線量（X線及びγ線）	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ ・s・A
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	m ² ・s ⁻³
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ ・m ⁻² ・kg・s ⁻³ =m ² ・kg・s ⁻³
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² ・sr)	m ² ・m ⁻² ・kg・s ⁻³ =kg・s ⁻³

表 6. 国際単位系と併用されるが国際単位系に属さない単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60 s
時	h	1 h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	′	1′=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	″	1″=(1/60)′=(π/648000) rad
リットル	l, L	1 l=1 dm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=10 ³ kg
ネーパ	Np	1 Np=1
ベル	B	1 B=(1/2) ln10 (Np)

表 7. 国際単位系と併用されこれに属さない単位で SI 単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.60217733 (49) ×10 ⁻¹⁹ J
統一原子質量単位	u	1 u=1.6605402 (10) ×10 ⁻²⁷ kg
天文単位	ua	1 ua=1.49597870691 (30) ×10 ¹¹ m

表 8. 国際単位系に属さないが国際単位系と併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
海里		1 海里=1852 m
ノット		1 ノット=1 海里毎時=(1852/3600) m/s
アール	a	1 a=1 dam ² =10 ² m ²
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
バール	bar	1 bar=0.1 MPa=100 kPa=1000 hPa=10 ⁵ Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1 nm=10 ⁻¹⁰ m
バール	b	1 b=100 fm ² =10 ⁻²⁸ m ²

表 9. 固有の名称を含むCGS組立単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ボアズ	P	1 P=1 dyn・s/cm ² =0.1 Pa・s
ストークス	St	1 St =1 cm ² /s=10 ⁻⁴ m ² /s
ガウス	G	1 G ≐10 ⁻⁴ T
エルステッド	Oe	1 Oe ≐ (1000/4π) A/m
マクスウェル	Mx	1 Mx ≐10 ⁻⁸ Wb
スチルプ	sb	1 sb =1 cd/cm ² =10 ⁴ cd/m ²
ホト	ph	1 ph=10 ⁴ lx
ガル	Gal	1 Gal =1 cm/s ² =10 ⁻² m/s ²

表 10. 国際単位に属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R = 2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1 cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
X線単位		1 X unit=1.002×10 ⁻⁴ nm
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
ジャンスキー	Jy	1 Jy=10 ⁻²⁶ W・m ⁻² ・Hz ⁻¹
フェルミ		1 fermi=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1 metric carat = 200 mg = 2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリ	cal	
マイクロン	μ	1 μ =1 μm=10 ⁻⁶ m

