

# 硬化セメントペーストの圧縮強度評価に対する 非線形ボクセル有限要素解法とその適用可能性\*

Nonlinear Voxel Finite Element Procedure  
for Compressive Strength Evaluation of Hardened Cement Paste and Its Applicability

永井 学志<sup>1</sup>・池田 翔太<sup>2</sup>・胡桃澤 清文<sup>3</sup>

Gakuji NAGAI, Shota IKEDA and Kiyofumi KURUMISAWA

<sup>1</sup> 岐阜大学 工学部 数理デザイン工学科 (〒501-1193 岐阜市柳戸 1-1)

<sup>2</sup> 前 岐阜大学大学院 工学研究科 数理デザイン工学専攻 (〒501-1193 岐阜市柳戸 1-1)

<sup>3</sup> 北海道大学大学院 工学研究院 環境循環システム部門 (〒060-8628 札幌市北区北 13 条西 8 丁目)

To predict the macroscopic compressive strengths of hardened cement paste, a digital-image-based finite element procedure for damage evolution due to local tension is developed and its applicability from practical viewpoint is studied through numerical experiments. In the procedure, microscopic three-dimensional geometries of hardened cement paste are assumed to be periodic and each phase is randomly generated by using auto-correlation function evaluated from a two-dimensional SEM image of specimen. Nonlocal isotropic damage model is employed to represent crack evolutions in the geometries. Predicted macroscopic uni-axial compressive strengths are qualitatively consistent with experimental results in terms of water-cement ratio and material age.

**Keywords:** Two-scale analysis, 3D digital image, Periodic boundary, Nonlocal isotropic damage

## 1. はじめに

コンクリートの多様化にともない、その挙動の理解や性能の予測において、実験だけでなく数値解析を採用することが資源の省力化や効率性の観点から有用となりつつある。特に、各種混和材料の添加による高性能化や、様々な環境下における耐久性などの長期的性能の理解や予測では、コンクリート中の結合材であるセメントペーストが重要な因子の1つとなる。

筆者らはこのような視点から、硬化セメントペーストとその力学挙動に対する数値的評価を試み、実験結果との比較を進めている。この際、既往の研究より水セメント比(w/c)と材齢が主要パラメータであることが一般に知られているため、まずはこれらに注目している。具体的に、硬化セメントペーストを4相(未水セメント粒子、水酸化カルシウム、C-S-H、粗大空隙)からなる不均質材料とし、ある断面の電子顕微鏡画像から各相の空間分布に関する自己相関関数を得て、その統計的な特徴を調べている<sup>1)</sup>。次に、これらの自己相関関数を用いて、硬化セメントペーストのミクロ構造モデルを3次元デジタル画像として統計的に作成することにより、ボクセル有限要素解析でマクロ的な

Young率を評価し、これらが実測値と定量的に一致することを確認している<sup>2)</sup>。しかしながら、これらの評価は線形計算によるものであるため、硬化セメントペーストのもう1つの重要なパラメータである圧縮強度までは検討できていない。なお、先行研究として、硬化セメントペースト中の空隙に着目して圧縮強度に関する知見を得た数値解析的研究<sup>3)</sup>があるが、ミクロ構造モデルは2次元の模式的なものに留まっている。

そこで本論文では、a) 筆者らの3次元ミクロ構造モデル<sup>1),2)</sup>に新たに局所的な引張破壊を考慮することにより、硬化セメントペーストのマクロな圧縮強度を評価しうる非線形ボクセル有限要素解法を構成し、b) 数値解の妥当性(ペリフィケーション)と物理現象の再現性(部分的なバリデーション)という両視点から、本解法の適用可能性を検討する。これにより、本解法を硬化セメントペーストの圧縮強度の理解や予測に対する実験的検討の補助ツールにできると考える。

具体的に、a)における局所的な引張破壊のモデル化には、材料構成則に破壊エネルギーを考慮した等方損傷モデル<sup>4)</sup>を採用し、このパラメータのみを非局所化<sup>5),6)</sup>して用いる。この種の非局所化は、軟化挙動の要素分割依存性のある程度回避する便法に過ぎないが、各種の数値実験により一定の妥当性が示されている。この妥当性に加えて、アルゴリズムが簡便かつロバストなことが、本研究でこのモデリングを採用する理由である。なお、非局所化された損傷モデルは、破壊という

\* 原稿受付 2010 年 05 月 24 日, 改訂年月日 2010 年 07 月 20 日, 発行年月日 2010 年 08 月 09 日. ©2010 日本計算工学会.  
Manuscript received, May 24, 2010; final revision, July 20, 2010; published, August 09, 2010. Copyright ©2010 by the Japan Society for Computational Engineering and Science.

現象をある厚さをもつ損傷領域として陰に表現するものであり、破壊した面同士のかみ合い等による抵抗機構も軟化挙動に暗に組み込まれている。また、周期境界条件下でのボクセル解析には、2 スケール解法と高速 Fourier 変換 (FFT) を用いた高速な反復解法<sup>7)</sup>を用いる。ただし、本論文ではこの解法をひずみ制御に拡張し、実装レベルでの高速化も考慮する。

次に、b) に関して、本論文では硬化セメントペーストのマクロ的な圧縮強度評価が目的なので、解法特に非局所化と周期境界条件の導入の妥当性と、それによる物理現象の再現性についての検討は、無負荷状態から 1 軸圧縮のピークに至るまでの範囲とする。その後のポストピーク域での検討は本論文の対象外とする。この理由は、ポストピーク域では、1) クラックを表現する面状の損傷領域が周期的なミクロ構造よりも大きく成長していくので、「不均質材料」でなく「周期構造物」としての挙動がより支配的になってくるためであり、2) 解の分岐可能性が高まることから、各種のわずかな摂動に挙動が鋭敏化してくる可能性があると考えためである。理由 1) に関して、極めて理想化された状態では局所化しない多数のクラックを理解できないこともないが、多数の欠陥を含み周期性がない実現象との対応関係が薄くなる。そうといって、仮に周期境界に替えて応力境界や変位境界にしたとしても、周期的なミクロ構造よりはるかに大規模自由度となる硬化セメント供試体を直接モデル化しない限り、これらの境界条件にも優位性はないと考える。理由 2) に関して、このような特定の経路を静的に追跡することにはそれほど意味がないと考える。

## 2. 圧縮強度評価のための非線形ボクセル有限要素解法

硬化セメントペースト内の各相の空間分布を 3 次元デジタル画像で与えるため、その 1 画素を 1 つの 8 節点立方体要素とみなすボクセル有限要素解法の使用を前提とする。このボクセル解法では、解くべき連立 1 次方程式の自由度が大きくなるので直接解法は非効率的であり、さらに今回は非線形問題となるばかりでなく、ミクロ構造モデルを統計的に作成するので統計的には同一条件であるが形状の異なる複数のモデルを解く場合がある。したがって、アルゴリズムと実装の両視点からの高速化も重要となる。また、構成則に引張軟化を組み込むので、数値解は要素分割と要素寸法に依存しないようにしつつ、一方で物理現象としての破壊の局所化は適切に再現する必要がある。以下では、これらの点に留意した解法を、既存の手法<sup>4),6),7)</sup>を組み合わせることで構成する。なお、非線形解法には割線剛性法と静的陽解法を、連立 1 次方程式の求解には前処理付きの共役勾配法 (PCG) を用いる。

### 2.1 周期境界条件下での 2 スケール解法

3 次元ミクロ構造の領域を  $Y$  とする。 $Y$  内で一定関数であるマクロひずみテンソルを  $E$ 、 $Y$  に関して周期性のあるミクロ擾乱変位ベクトルを  $u^1(y)$  とする。た

だし、

$$\int_Y u^1 dy = 0 \quad (1)$$

である。このとき、ミクロひずみ  $\varepsilon$  を、

$$\varepsilon \equiv E + \nabla^s u^1 \quad (2)$$

で定義する。ここで、 $\nabla^s$  は  $y$  に関して対称な勾配テンソルをとる演算子である。 $\sigma$  をミクロ応力テンソルとすれば、損傷モデルの構成則は

$$\sigma = C : \varepsilon \quad (3)$$

と書くことができる。ここで、 $C$  は損傷した材料の弾性テンソルである。次に、応力テンソル  $\sigma$  はミクロ領域  $Y$  におけるつりあい方程式、

$$\nabla \cdot \sigma = 0 \quad (4)$$

を満たす必要がある。また、マクロ応力  $\Sigma$  を次に示す領域平均で定義する。

$$\Sigma \equiv \frac{1}{|Y|} \int_Y \sigma dy \quad (5)$$

ここで、 $|Y| \equiv \int_Y dy$  である。

式(4)を弱定式化して式(2)、(3)を代入し、有限要素法により離散化するとともに、式(5)にも式(2)、(3)を代入すると、行列・数ベクトル形式の次式を得る。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \bar{\mathbf{K}} \\ \bar{\mathbf{K}}^T & \bar{\mathbf{K}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u^1 \\ E \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ |Y| \Sigma \end{Bmatrix} \quad (6)$$

ここで、各テンソル変数の行列・数ベクトル表記をその変数の立体で表現している。また、下添字  $e$  を要素番号、 $n_{el}$  を全要素数、 $B_e$  を要素節点変位 - ひずみ変換行列、 $L_e$  を収集操作 (その転置  $L_e^T$  は分配操作) の論理行列表現として、

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} L_e^T K_e L_e, & K_e &= \int_{Y_e} B_e^T C_e B_e dy \\ \bar{\mathbf{K}} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} L_e^T \bar{K}_e, & \bar{K}_e &= \int_{Y_e} B_e^T C_e dy \\ \bar{\mathbf{K}} &= \sum_{e=1}^{n_{el}} \bar{K}_e, & \bar{K}_e &= \int_{Y_e} C_e dy \end{aligned} \quad (7)$$

である。

マクロひずみ  $E$  とマクロ応力  $\Sigma$  の既定値は、成分ごとと排他的に指定されるので、これらの成分の並び順を適切に入れ替えて、それぞれの既定値を  $E_1$ 、 $\Sigma_2$ 、対応する未知数を  $E_2$ 、 $\Sigma_1$  とすると、式(6)は次のように書き換えることができる。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \bar{\mathbf{K}}_1 & \bar{\mathbf{K}}_2 \\ \bar{\mathbf{K}}_{11} & \bar{\mathbf{K}}_{12} & \\ \text{Sym.} & \bar{\mathbf{K}}_{22} & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u^1 \\ E_1 \\ E_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ |Y| \Sigma_1 \\ |Y| \Sigma_2 \end{Bmatrix} \quad (8)$$

この式を $\mathbf{E}_2$  に関して静的縮約すると,

$$\begin{aligned} & (\mathbf{K} - \bar{\mathbf{K}}_2 \bar{\mathbf{K}}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{K}}_2^T) \mathbf{u}^1 \\ &= -[\bar{\mathbf{K}}_1 \quad \bar{\mathbf{K}}_2] \left\{ \begin{array}{c} \mathbf{E}_1 \\ \bar{\mathbf{K}}_{22}^{-1} (\mathbf{Y} \boldsymbol{\Sigma}_2 - \bar{\mathbf{K}}_{12}^T \mathbf{E}_1) \end{array} \right\} \quad (9) \end{aligned}$$

を得る. したがって, 実際には 2.3 節に述べるように式(9)を $\mathbf{u}^1$  について解き, 式(8)の 3 行目により $\mathbf{E}_2$ を回復し, 同 2 行目から $\boldsymbol{\Sigma}_1$ を得る.

なお, マクロひずみの 6 成分すべてが既定値で,  $\mathbf{E}_1 = [1 \ 0 \ \dots \ 0]^T, [0 \ 1 \ \dots \ 0]^T, \dots, [0 \ 0 \ \dots \ 1]^T$  なる 6 つの互いに正規直交な列ベクトル基底とすると, これらに対する $\mathbf{u}^1$  と $\boldsymbol{\Sigma}_1$  は, それぞれ通常の均質化法<sup>8)</sup>における特性関数行列の列ベクトルと均質化剛性行列の列ベクトルに一致する.

## 2.2 非局所化された等方損傷モデル

構成則に引張軟化を組み込んだことともなう数値解析上の問題を, ある程度ではあるが簡便に回避するために, 破壊エネルギー $G_f$ を考慮した等方損傷モデル<sup>4)</sup>に非局所化<sup>5),6)</sup>を組み合わせる. すなわち, つりあいは局所のままにして, 損傷量評価のためだけに後処理的に, 非局所化ひずみ

$$\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\mathbf{y}) \equiv \frac{1}{\int_{\Omega_p \cap \Omega_M} \alpha(\mathbf{s}) \, ds} \int_{\Omega_p \cap \Omega_M} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{y} + \mathbf{s}) \alpha(\mathbf{s}) \, ds \quad (10)$$

を導入する. ここで,  $\alpha(\mathbf{s})$  は位置 $\mathbf{y}$  を $\mathbf{s} = \mathbf{0}$ とし, この位置に関して点対称かつ非負の非正規化フィルタ関数である. また,  $\Omega_p$  は位置 $\mathbf{y}$ の要素が属している相の全領域,  $\Omega_M$  はフィルタ関数 $\alpha$ の影響領域(マスキング)である. 実装上, 式(10)の畳み込みは単精度で要素中央点のみの中点積分則により離散的に評価する. これは, ローパスフィルタの一種である重み付き移動平均であり, デジタル画像に対するフィルタリング操作そのものである.

破壊エネルギーを考慮した等方損傷モデル<sup>4)</sup>は, 損傷開始規準をひずみに関するものに替えて用いる. ミクロ的な引張破壊を等方損傷とするのは, 簡潔なモデルであることのほかに, 今回は 1 軸圧縮という方向を一定に保った単調負荷であることから, ボクセル解法のように多くの要素の使用を前提とする場合, ミクロ構造に起因するマクロ的な異方性のある程度は表現できると考えるためである. また, 損傷開始規準を応力でなくひずみで与えるのは, セメントペーストの結合力の源泉は結晶間の機械的なかみ合いや分子間力なので, 結晶粒子の大きさを固定すれば破壊開始条件は距離に依存していると考えerるほうが都合よいためである.

この等方損傷モデルでは, 現時刻 $T$ におけるスカラ損傷量を $d = d(T)$  ( $0 \leq d \leq 1$ ), 材料の初期等方弾性テンソルを $\mathbf{C}_0$ とすれば,

$$\mathbf{C} = (1 - d)\mathbf{C}_0 \quad (11)$$

であり, 損傷進展則を次式で定義する.

$$d \equiv \begin{cases} 0 & r < r_0 = \sqrt{E} \varepsilon_u \\ 1 - \frac{r_0}{r} \exp \left\{ H \left( \frac{r}{r_0} - 1 \right) \right\} & r \geq r_0 \end{cases}$$

$$r = r(T) = \max_{t \in (-\infty, T)} \{r_0, \tau(t)\} \quad (12)$$

$$\tau(t) = \sqrt{\langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle : \mathbf{C}_0 : \langle \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} \rangle}$$

$$H = 2 \frac{r_0^2}{r_0^2 k - 2G_f} k$$

ここで,  $\varepsilon_u$  は損傷開始規準となる等価 1 軸引張ひずみ,  $E$  は Young 率である. また $\langle \cdot \rangle$  はテンソル $\cdot$ の主値のうち負(圧縮を負)のものを 0 とする演算子である. すなわち, 非局所化ひずみ $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ の主ひずみ座標系における引張成分のみが, 損傷進展に寄与する. さらに,  $k$  はいわゆる分布ひび割れモデルの特徴長さであり, 本論文では次のように定める. すなわち, 直径が $k$ の球体内で定数値 1 である正規化フィルタ関数を新たに考え, 次式に示すように, これが正規化したフィルタ関数 $\alpha(\mathbf{s}) / \max_{\mathbf{s} \in \Omega_M} \alpha(\mathbf{s})$ と, 損傷の厚さ方向の線積分量が両者で一致するように $k$ を定める.

$$\int_0^k 1 \, dl = \int_{\text{diameter of } \Omega_M} \frac{\alpha(l)}{\max_{\mathbf{s} \in \Omega_M} \alpha(\mathbf{s})} \, dl$$

$$\therefore k = \frac{1}{\max_{\mathbf{s} \in \Omega_M} \alpha(\mathbf{s})} \int_{\text{diameter of } \Omega_M} \alpha(l) \, dl \quad (13)$$

特に, 領域 $\Omega_M$ 内で $\alpha(\mathbf{s}) = 1$ とすると,  $\Omega_M$ の直径は $k$ に一致し, 式(10)は単純移動平均となる.

## 2.3 ボクセル有限要素解法の高速度化

連立 1 次方程式(9)を, 階層型メモリ構造をもつ PC にて求解するため, PCG 法をアルゴリズムと実装の両面から高速化する. 実装面からは, PC におけるこの種の計算は演算そのものよりも主メモリと CPU 内の演算器間のデータ転送がボトルネックとなる. したがって, データ転送が不要となる CPU 内のレジスタや, 高速なデータ転送が可能なキャッシュメモリの積極的な活用を考える. 以下では, PCG 法を構成する計算のうち, 工夫の余地が多い疎行列・数ベクトル積(SpMV)部と前処理部の高速化について述べる. なお, PCG 内の数ベクトル同士の和や内積計算については, 単純な計算ゆえに工夫の余地はほとんどない.

### (1) 疎行列・数ベクトル積

PCG 法のうち, 式(9)左辺の SpMV 計算が最も演算量が多くなる. この左辺の全体剛性行列 $\mathbf{K} - \bar{\mathbf{K}}_2 \bar{\mathbf{K}}_{22}^{-1} \bar{\mathbf{K}}_2^T$ は密行列となるが, これを構成する $\mathbf{K}$ は本研究では 3 自由度を基準として 27 重の $3 \times 3$ ブロック対角行列であり,  $\bar{\mathbf{K}}_2$ にもこれに類する規則性があるので, それぞれ DIAG 形式<sup>10)</sup>で記憶しておくことで SpMV 計算ができる. しかし, 主メモリから CPU へのデータ転送が膨大となる DIAG 形式は, PC での高速化には不利である.

そこで, Element-by-Element (EBE) 法により SpMV 計算を行う. この計算法は, 演算の順序を変えることで, PCG 反復ごと・要素ごとに, たとえば要素剛性行

列  $\mathbf{K}_e$  を作成しては要素節点変位数ベクトル  $\mathbf{u}_e^1$  から要素節点力数ベクトル  $\mathbf{f}_e$  を計算し、全体節点力数ベクトル  $\mathbf{f}$  に加算していく方法である。式(9)左辺に対しては、具体的に次のように計算を進める。

$$\mathbf{f} \leftarrow \sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{L}_e^T \left( \underbrace{\mathbf{K}_e (\mathbf{L}_e \mathbf{u}_e^1)}_{\mathbf{f}_e} \right), \quad \mathbf{w}_1 \leftarrow \sum_{e=1}^{n_{el}} \bar{\mathbf{K}}_e^T (\mathbf{L}_e \mathbf{u}_e^1) \quad (14)$$

$$\mathbf{w}_2 \leftarrow \bar{\mathbf{L}}^T (\bar{\mathbf{K}}_{22}^{-1} (\bar{\mathbf{L}} \mathbf{w}_1)) \quad (15)$$

$$\mathbf{f} \leftarrow \mathbf{f} - \sum_{e=1}^{n_{el}} \mathbf{L}_e^T \left( \underbrace{\bar{\mathbf{K}}_e \mathbf{w}_2}_{\mathbf{f}_e} \right) \quad (16)$$

ここで  $\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2$  は  $6 \times 1$  の作業用数ベクトルであり、 $\bar{\mathbf{L}}$  は式(8)の分割にしたがって未知のマクロひずみに対応する成分のみを収集する操作を表す。したがって、式(16)右辺第2項の計算には一部無駄がある。なお、 $\bar{\mathbf{K}}_{22}^{-1}$  は高々  $6 \times 6$  以下であり、反復開始前に計算しておくことができる。 $\mathbf{K}_e$  は  $24 \times 24$  行列、 $\bar{\mathbf{K}}_e$  は  $24 \times 6$  行列なので、これらの作成を除いて、1回の SpMV 計算に約  $\{2 \times (24 \times 24) + 2 \times (24 \times 6)\} n_{el} + \{2 \times (6 \times 24)\} n_{el} = 1728 n_{el}$  回の加減乗算がある。この演算量は、DIAG形式の SpMV 計算に比べて約 3.1 倍に増えるものの、要素剛性行列  $\mathbf{K}_e$ 、 $\bar{\mathbf{K}}_e$  は演算器とキャッシュメモリ間のみで作成・廃棄を繰り返すことができるので、主メモリからのデータ転送は、 $\mathbf{u}^1$  と  $\mathbf{f}$  に加えて要素剛性行列の作成に必要な材料パラメータのみとなる。これにより PC におけるデータ転送ボトルネックをほぼ解消できると考える。なお、文献<sup>7)</sup>との違いは、マクロ応力  $\Sigma_2$  とマクロひずみ  $\mathbf{E}_1$  の混合既定とした点と、EBE法とDIAG形式を混用せずにすべてEBE法とした点にあり、結果として大幅に省メモリ化されている。

特に、等方損傷モデルの場合、EBE計算の実装には様々な工夫ができる。本論文では、要素剛性行列  $\mathbf{K}_e$ 、 $\bar{\mathbf{K}}_e$  の成分が Lamé 定数にスカラー係数  $(1 - d_e)$  を乗じたものから効率的に計算できることに注目する。これらの成分の種類は符号を無視して高々10個と3個であるので、実装上、 $\mathbf{K}_e$ 、 $\bar{\mathbf{K}}_e$  を2次元配列上に作成することなく、行列・数ベクトル積を数式処理ソフトによりすべて書き下すことで、 $\mathbf{u}_e^1$  から  $\mathbf{f}_e$  等を計算する。なお、同時にレジスタブロッキングを施すことで、レジスタに一度格納された値の再利用率の向上を図った。

また、全体節点変位数ベクトル  $\mathbf{u}^1$  や全体節点力数ベクトル  $\mathbf{f}$  等は、4次元配列(直交格子上の節点位置  $(p, q, r)$  に3次元、節点変位ベクトルに1次元)に対応づける。周期境界条件については、配列に糊代部を設けて整合性を保ちつつデータを冗長化することで課す。EBE法の要素に関するループは、要素位置  $(i, j, k)$  による3重ループで指定し、要素節点と全体節点の陽な接続関係から、必要最低限の回数で明示的に  $\mathbf{u}^1$  のデータを  $\mathbf{u}_e^1$  にコピー、あるいは  $\mathbf{f}_e$  から  $\mathbf{f}$  にコピーバックする

ことでキャッシュされたデータの再利用率を向上させる。さらに、要素に関する3重ループについて、ループストリップマイニングを施すことで、最外側ループに関しては2色のマルチカラー化で2重ループとして OpenMP で並列化するとともに、最内側ループに関してはコンパイラが SIMD ベクトル命令を発行できるようにベクトル長をストリップの基準として2重ループ化する。すなわち、並列化とベクトル化のために、全体として5重ループ構成とする。

## (2) FFT 前処理

PCG法では前処理を工夫することで反復回数を大幅に減らすことが可能なアルゴリズムを構成できる。ここでは、元の支配方程式を近似したものを前処理として用いる (FFT-PCG)<sup>7)</sup>。具体的には、 $\mathbf{I}$  を単位テンソルとして、構成則(3)を

$$\boldsymbol{\sigma} = \text{Tr}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} \quad (17)$$

と改めて定義した場合の支配方程式の左辺を用いて、

$$\nabla^2 \mathbf{u}^1 = \mathbf{r} \quad (\nabla^2 u_i^1 = r_i \quad (i = 1, 2, 3)) \quad (18)$$

を離散化したものを前処理に用いる。ここで、 $\mathbf{r}$  は残差力ベクトルである。式(18)を周期境界条件と直交格子のもとで3次元有限実 Fourier 級数により離散化すれば、FFTを用いて直接法的一种である高速 Poisson ソルバにより非常に効率的に解くことができる。

説明を単純化するため、ミクロ領域  $Y$  を  $[-\pi, \pi]^3$  の立方体とする。 $\mathbf{k}$  を波数ベクトルとすれば、 $y_i$  方向の擾乱変位  $u_i^1$  は、 $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  で  $\hat{u}_{ik}^1 = 0$  として

$$u_i^1(\mathbf{y}) \approx \sum_{\mathbf{k}} \hat{u}_{ik}^1 \exp(\sqrt{-1} \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}) \quad (19)$$

と展開できる。式(18)を弱定式化して、式(19)を代入・整理すれば、

$$\hat{u}_{ik}^1 = \frac{a}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}} \int_Y r_i(\mathbf{y}) \exp(\sqrt{-1} \mathbf{k} \cdot \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \quad (\mathbf{k} \neq \mathbf{0}) \quad (20)$$

を得る。ここで、 $a$  は定数係数であるが、前処理用途では無視できる。式(19)の右辺は逆離散 Fourier 変換であり、式(20)右辺の積分を台形則により離散化したものは離散 Fourier 変換である。すなわち、前処理の具体的な手順は、各  $y_i$  方向について 1) 残差力  $r_i$  を離散化したものの3次元配列表現を3次元実 FFT し、2) その各成分を  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  のときにゼロとし、それ以外のときにスカラー係数  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}$  で除して(式(20))、3) 逆3次元実 FFT して変位  $u_i^1$  の3次元配列表現を得る(式(19))となる。

なお、FFT前処理の演算量について、たとえば次元あたりの要素分割数が同一のとき、次元あたり節点数は約  $\sqrt[3]{n_{el}}$  なので、 $2 \times (3 \times (5/2) n_{el} \log_2 \sqrt[3]{n_{el}}) + 3 n_{el} = (15 \log_2 \sqrt[3]{n_{el}} + 3) n_{el}$  程である。この演算量のオーダーは SpMV 計算よりも  $\log_2 \sqrt[3]{n_{el}}$  だけ高いが、現実に解くことのできる問題の次元あたりの節点数はせいぜい数100なので、FFTを前処理に用いることは実質的に問

題ない。また、多次元 FFT は基数 13 程度までのものが各種ライブラリで用意されており、並列化された高速なものを利用できる。一方で、基本的にデータ転送がボトルネックとなりがちなアルゴリズムである。そこで、前処理は単精度でもよいとする研究<sup>9)</sup>もあることから、本研究では単精度としてデータ転送量を半減することで前処理を高速化する。

### 3. 数値実験

本章では、前章で構成した圧縮強度評価のための解法を数値的に検討する。入力データとなる 3 次元マイクロ構造モデルは、硬化セメントペースト断面の電子顕微鏡画像から統計的手法により作成<sup>1)</sup>するので、まずはこれに関することから述べる。

#### 3.1 対象とするセメントペーストとそのモデル化

##### (1) 試料の作製と供試体の圧縮強度

本研究では 5% の混和材を含まない普通ポルトランドセメント（密度：3.17g/cm<sup>3</sup>，比表面積：3340cm<sup>2</sup>/g）を使用した。w/c = 30, 45, 60% のセメントペーストを複数作製し、所定の材齢まで水中養生を行った。また、参考までに、JIS1108 に示されるコンクリートの圧縮強度試験方法に準拠し、硬化したセメントペーストを整形して作成した円柱供試体（直径 30mm，高さ 60mm）の圧縮強度を測定した。Table 1 に、材齢 28 日と 10 ヶ月それぞれにおける各 w/c に対する供試体の圧縮強度を示す。なお、この圧縮強度は供試体という、ここで注目している寸法に比べて巨大な構造物と、その境界条件 特に端面の摩擦 に依存したものであるため、本解法により算出されるマクロな圧縮強度と定義が異なっていることに注意が必要である。

##### (2) 2次元画像の取得と3次元マイクロ構造モデルの作成

3次元マイクロ構造モデルを作成するために、その元となる硬化セメントペーストの断面画像を、電子顕微鏡により取得する。これに用いる試料は、所定の材齢において 5mm 角程度に切り出し、エポキシ樹脂に含浸させ硬化後に表面を研磨したものである。この2次元画像から4相（未水和セメント粒子、水酸化カルシウム、C-S-H、粗大空隙）に分離するため、電子顕微鏡の加速電圧は 15kV，ワーキングディスタンスは 17mm で、その表面の反射電子像（倍率 500 倍）を測定した。測定範囲は 200 × 150μm の大きさであり、640 × 480 画素（1 画素の辺長は約 0.32μm）で取り込んだ。

各相への分離は輝度分布の極小点で行い、輝度の高いほうから順に未水和セメント粒子、水酸化カルシウム、C-S-H、粗大空隙とした<sup>1)</sup>。この分離された2次元画像から、次式により各相の自己相関関数を求めた。

$$R_p(p, q) = \sum_{i=1}^{M-p} \sum_{j=1}^{N-q} \frac{I(i, j) I(i+p, j+q)}{(M-p)(N-q)} \quad (21)$$

ここで、整数の組 (p, q) は画素の位置、M, N はそれぞれ次元あたりの画素数であり、I(i, j) は位置 (i, j) の画素

Table 1 Compressive strength of hardened cement paste specimens (MPa)

w/c \ Age	28 days	10 months
30%	80.2	93.7
45%	47.7	50.0
60%	29.2	37.1

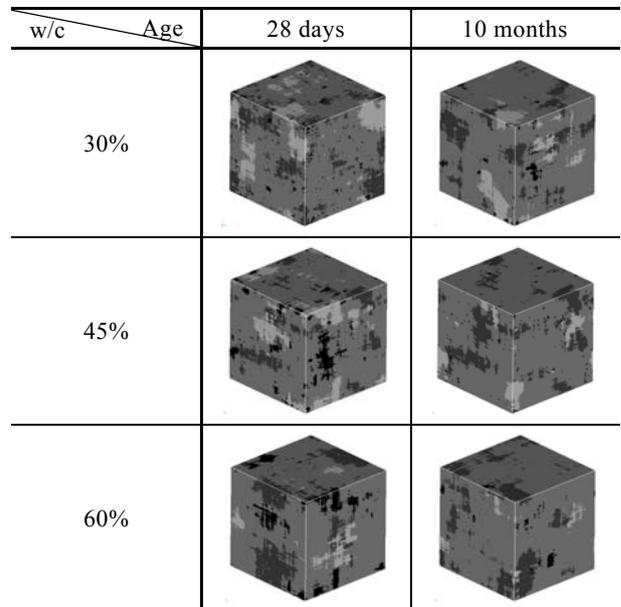


Fig. 1 Microscopic geometrical models generated by statistical method

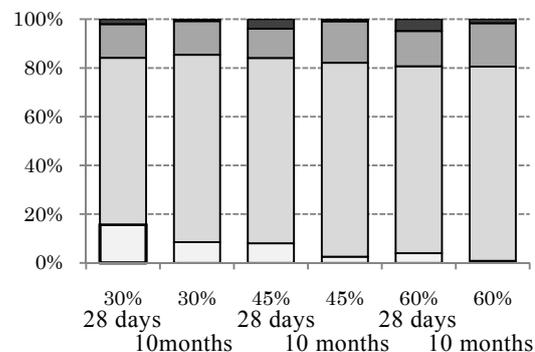


Fig. 2 Volume ratio of microscopic geometrical model

Table 2 Experimental Young moduli of C-S-H (median) (GPa)

w/c \ Age	28 days	10 months
30%	28.9	35.4
45%	19.4	26.1
60%	12.6	15.4

が注目する相である場合に 1，その他で 0 となる 2 値関数である。r =  $\sqrt{p^2 + q^2}$  として、自己相関関数(21)

を極座標系に変換すると,

$$R_p(r) = \frac{1}{2r+1} \sum_{l=1}^{2r} R_p \left( r \sin \frac{\pi l}{4r}, r \cos \frac{\pi l}{4r} \right) \quad (22)$$

となる. 文献<sup>1)</sup>に基づき, この関数を用いて周期性のある3次元ミクロ構造モデル(辺長  $32\mu\text{m}$ ,  $100^3$  画素)を統計的に作成した. Fig. 1, 2に, 各材齢・各w/cについて作成した3次元ミクロ構造モデルと, 各相の体積率を示す.

### (3) ミクロ構造モデルにおける物性値の設定

未水和セメント粒子と水酸化カルシウムそれぞれのYoung率とPoisson比は文献<sup>11)</sup>のものを用いて, 材齢によらず  $117.6\text{GPa}$ ,  $42.3\text{GPa}$ ,  $0.314$ ,  $0.324$ とした. また, 粗大空隙のYoung率は  $0\text{GPa}$  もしくはそれに準じる  $0.224\text{GPa}$ とした. 一方で, 一般的にC-S-H相には, 反射電子像の分解能以下の微細空隙(数  $\text{nm}$  ~)が含まれているので, そのYoung率はw/cと材齢に大きく依存する<sup>12)</sup>. そこで, C-S-H相についてマイクロインデンテーション法によりYoung率を評価した<sup>12)</sup>. この測定法は, 圧子を試料表面に押し込みその深さと荷重を測定し, 徐荷する際に測定された荷重とその変位の関係から算出された傾きに基づきYoung率を評価するものである. セメント硬化体試料を樹脂埋めした後, フィッシャースコープ H100Cによりマイクロインデンテーションの測定を実施した. 最大荷重を  $20\text{mN}$ , 載荷速度は  $1.0\text{mN/s}$ として最大荷重に達したところで5秒間最大荷重を維持し, その後負荷するときと同じ速度で徐荷した. 測定点は,  $10\mu\text{m}$ ごとの  $10 \times 10$  点の格子状で行った. 本論文では, 試料のPoisson比は  $0.25$ とし, 評価された全測定点のYoung率の中央値を用いる. Table 2にその結果を示す.

また, 損傷開始規準の等価1軸引張ひずみ  $\varepsilon_u$ を全相に対して一律に  $\varepsilon_u = 100\mu$ (引張強度換算でYoung率の  $10^{-4}$ 倍), 破壊エネルギーも一律に  $G_f = 10^{-5} \text{N/mm}$ を主としつつ,  $G_f = 10^{-6}, 10^{-4} \text{N/mm}$ についても考慮する. これらの値については, いずれ実験等により同定する必要があるが, 本研究では経験的に妥当であると考えうるオーダーの値を用いた.  $G_f$ 値の根拠は, コンクリート構造物のスケールでは  $G_f = 0.1 \text{N/mm}$ 程度であることから, その特徴厚さ  $0.1\text{m}$ に厚さ  $32\mu\text{m}$ 毎に破壊面があると考えると, 1破壊面あたり約  $G_f = 3 \times 10^{-5} \text{N/mm}$ と略算できることと, また文献<sup>3)</sup>で  $G_f = 5 \times 10^{-7} \text{N/mm}$ と設定していることによる.

なお, 今回の対象は混和材を含まない普通ポルトランドセメントに関してなので, 各相同士の遷移層が力学的な弱点となることは稀であり, これを特にモデル化することはしない. しかし, スラグ粉末のような混和材を混入したときには, 遷移層が弱点となる可能性のあることが確認されているので, そのモデル化には注意が必要となる.

### 3.2 数値解の妥当性確認

以降では特に断りのない限り, 次の設定を用いる.

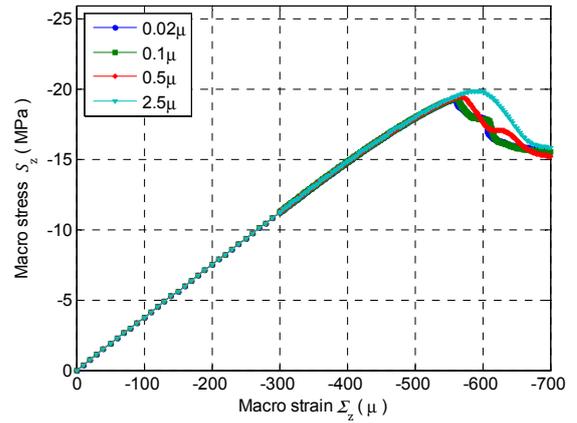


Fig. 3 Comparison of strain increments in explicit method

(w/c=30%, Age=28 days,  $G_f = 10^{-5} \text{N/mm}$ )

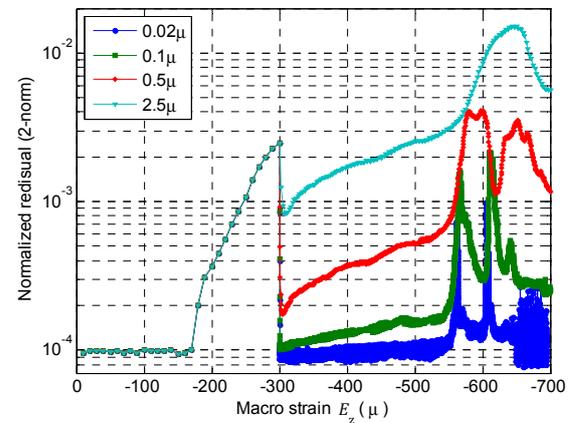


Fig. 4 Histories of normalized residual

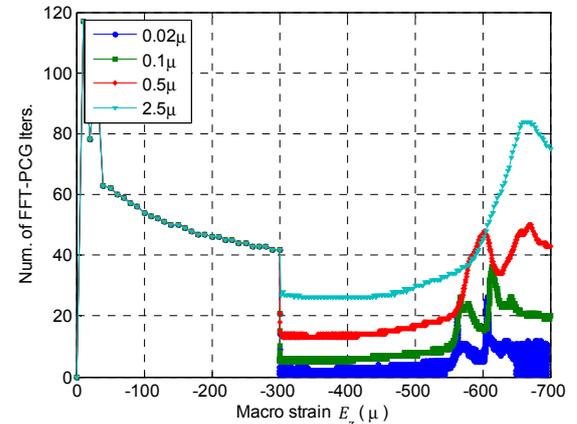


Fig. 5 Histories of FFT-PCG iteration

すなわち, 1辺  $32\mu\text{m}$ の3次元ミクロ構造モデルは  $100^3$ 画素を単純に間引いた  $50^3$ 画素, 材齢は28日, 破壊エネルギーは  $G_f = 10^{-5} \text{N/mm}$ , フィルタ関数  $\alpha(s)$ は偏差が  $1/2$ 要素辺長である正規分布関数, その影響領域  $\Omega_M$ の半径は偏差の2倍強(偏差が  $1/2$ 要素辺長であるとき,  $3^3$ 画素マスクに対応), PCG法の収束判定条件は2ノルムで式(9)の右辺に対する相対残差で  $10^{-4}$ 以下とする. また, 圧縮方向の強制マクロひずみ  $E_z$ を既定し, 適当なところで増分計算を打ち切る.

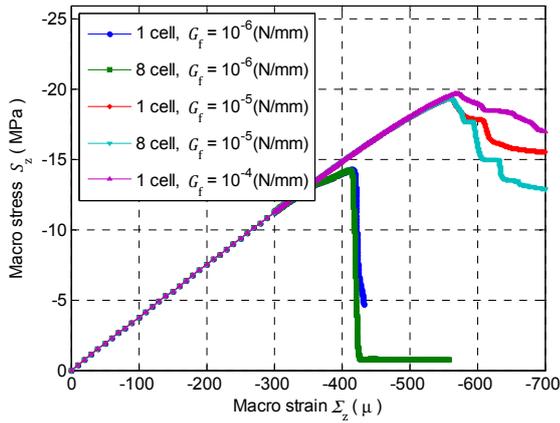


Fig. 6 Influence of periodic boundary and fracture energy (w/c=30%, Age=28 days)

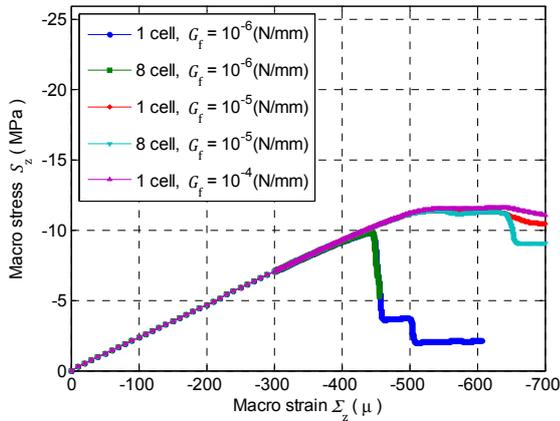


Fig. 7 Influence of periodic boundary and fracture energy (w/c=45%, Age=28 days)

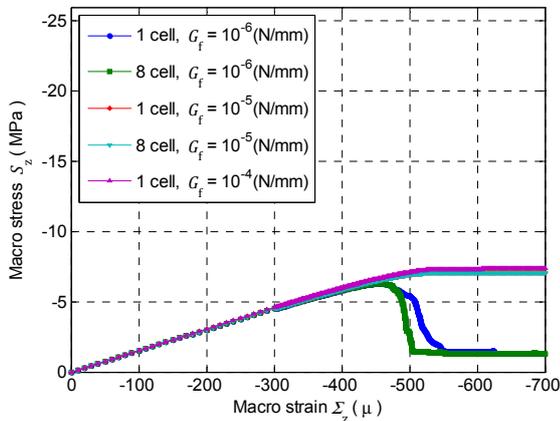


Fig. 8 Influence of periodic boundary and fracture energy (w/c=60%, Age=28 days)

#### (1) 静的陽解法におけるひずみ増分量の検討

本研究では静的陽解法を用いてつりあいをとることなく増分計算を進めるため、強制マクロひずみ  $E_z$  の増分量の違いにより計算結果が異なる。そこで適切なマクロひずみ増分量を検討するために、w/c=30%の場合について、 $E_z = -300\mu$  以降におけるひずみ増分の大きさを4種類  $0.02\mu$ ,  $0.1\mu$ ,  $0.5\mu$ ,  $2.5\mu$  にしたときのマクロ挙動(応力 - ひずみ関係)を比較する (Fig. 3)。ひずみ増分  $0.02\mu$  と  $0.1\mu$  について、ほとんど同じ応力 -

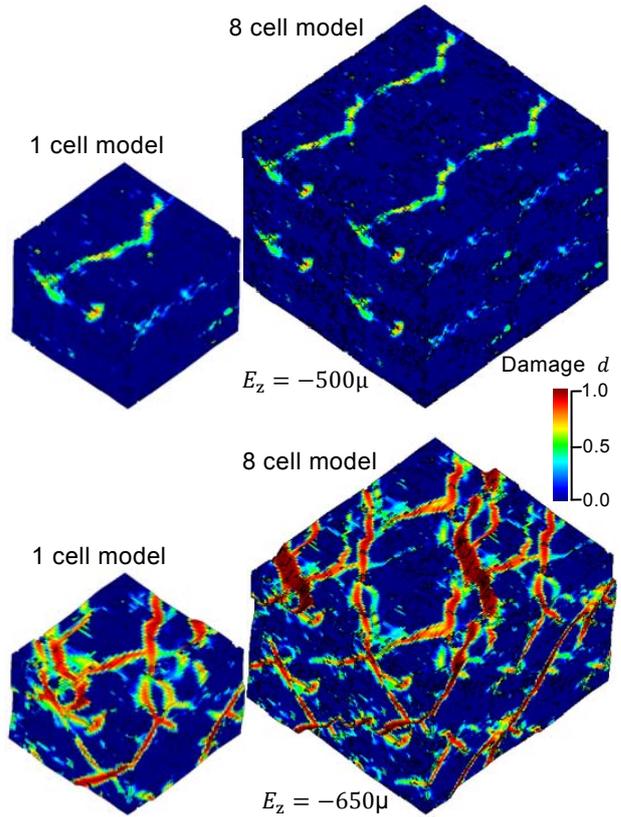


Fig. 9 Damage distributions in Microscopic model Y (w/c=30%, Age=28 days,  $G_f = 10^{-5}$  N/mm)

ひずみ関係を描く一方で、 $0.5\mu$  と  $2.5\mu$  についてはそれぞれ異なる結果が得られた。したがって、以降ではひずみ増分の大きさを  $0.1\mu$  とする。なお、陰解法を用いると、増分解析の途中でほとんどの場合に残差力が振動して収束しないことを確認した。

また、このときの相対残差の履歴と FFT-PCG の反復回数の履歴を、それぞれ Fig. 4 と Fig. 5 に示す。大きな増分、あるいは大きく圧縮軟化するとき、相対残差と反復回数はいずれも増加することがわかる。また、Fig. 5 より、ひずみ増分を小さくしても計算量の増加はそれほど大きくならないことがわかる。

#### (2) 周期境界条件と破壊エネルギーの影響

周期境界条件のもとでの損傷進展解析の適用可能範囲を検討するため、1辺  $32\mu\text{m}$  のマイクロ構造モデルを単位セルとして、計算領域のマイクロ領域  $Y$  を構成するセル数を変えたものと比較する。具体的に、w/c=30% について、1セルモデル (1辺  $32\mu\text{m}$ ,  $50^3$  要素) と、それを次元あたり2つ並べた8セルモデル (1辺  $64\mu\text{m}$ ,  $100^3$  要素) を考える。Fig. 6 に、破壊エネルギー  $G_f = 10^{-6}$ ,  $10^{-5}$  N/mm それぞれの場合における1セルモデルと8セルモデルのマクロ挙動と、 $G_f = 10^{-4}$  N/mm の場合における1セルモデルのマクロ挙動を示す。同一の破壊エネルギーでは、セル数に関係なく、各マクロ挙動はピークまでは同じ応力 - ひずみ関係を描いている。特に、 $G_f = 10^{-5}$  N/mm の場合には、ピークを少し過ぎたあたりまで同じ関係を描く。これはマクロ挙動における圧

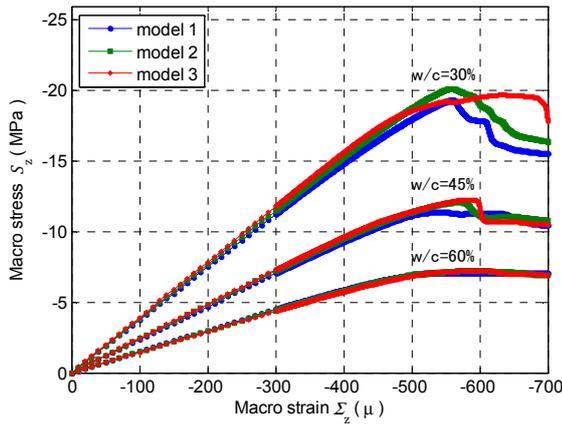


Fig. 10 Influence of microscopic geometry (Age=28 days,  $G_f = 10^{-5}$  N/mm)

縮軟化が穏やかなためと考える。なお、 $w/c$ のみ45%、60%に替えた場合のマクロ挙動についてもそれぞれFig. 7, 8に示すが、同様の帰結を得る。したがって、マクロ視点の圧縮強度評価を目的とする限りにおいて、周期境界条件のもとでの損傷進展解析は妥当と考える。

次に、ミクロ領域 $Y$ 内における損傷量 $d$ の分布について、 $G_f = 10^{-5}$  N/mmにおける1セルモデルと8セルモデルそれぞれをFig. 9に示す。ピーク前( $E_z = -500\mu$ )では単位セルを基本周期として、両モデルはほとんど同じ分布となっている。一方で、ピーク後( $E_z = -650\mu$ )では単位セルではなく、それぞれのミクロ領域 $Y$ を基本周期とする分布に変化している。これは、引張軟化によりミクロ領域 $Y$ の変形がある1面に局所化していくためである。この局所化は、Fig. 6だけでなくFig. 7, 8でも、応力-ひずみ関係において8セルモデルのほうの圧縮軟化が急峻になっていくことに対応する。これらの問題では、ピークもしくはそれを過ぎたあたりを境に「不均質材料」としての挙動から「周期構造物」としての挙動が支配的になっている。一般に、ピーク前に「周期構造物」としての挙動が支配的になる可能性もある。しかし、本論文で用いた構成則が等価1軸ひずみ $\varepsilon_u$ を境に硬化から軟化に折れ線で変化するものであるために、ピークまでの挙動がほとんど一致したと考える。以上のことから、「不均質材料」としてのマクロ挙動はピークまで適切に評価できると考える。

最後に、Fig. 6~8より、破壊エネルギーの違いがマクロ視点の圧縮強度に及ぼす影響は、文献<sup>3)</sup>における知見と同様、それほど大きくない。特に、 $G_f = 10^{-5}$  N/mmと $G_f = 10^{-4}$  N/mmの圧縮強度はほとんど同じである。この理由は、破壊エネルギー $G_f$ よりも損傷開始規準である等価一軸引張ひずみ $\varepsilon_u$ のほうが、圧縮強度への寄与が大きいためであると考えられる。すなわち、ミクロ構造の不均一性に起因する局所的な引張により順次損傷が生じる結果、機械的抵抗の機構を成す未損傷部に次第に引張ひずみが集中していき、破壊エネルギーの違いにそれほど依存することなく早晩、 $\varepsilon_u = 100\mu$ に達する

と考える。

### (3) 圧縮強度への幾何形状のばらつきの影響

本論文のミクロ構造モデルは、統計的な自己相関関数だけを満たすようにランダムに作成するため、 $w/c$ と材齢が同一でも幾何形状は異なる。そこで、このばらつきがマクロ挙動、特に圧縮強度に与える影響の程度を確認する。具体的に、 $w/c=30\%$ 、 $45\%$ 、 $60\%$ それぞれについて、乱数の発生条件を変更することで幾何形状の異なるモデルを3つずつ準備する。Fig. 10に $w/c$ ごとの3モデルのマクロ挙動を示す。いずれの $w/c$ においても、圧縮強度についてモデル間で差は最大4%程度なので、圧縮強度に対する幾何形状のばらつきは2次的な要因といえる。

### (4) 圧縮強度への要素分割とフィルタ関数の影響

圧縮強度の要素分割とフィルタ関数 $\alpha(s)$ への依存性を見積もる。 $100^3$ 画素モデルを単純に間引いて $50^3$ 画素としたもの(略記: $50^3\_hf\_dev = l_e/2$ )を基準とし、幾何形状の離散化誤差への鋭敏性を確認するため、支配体積率が最大の画素値でダウンサンプリングして $50^3$ 画素としたもの( $50^3\_hf1\_dev = l_e/2$ )を準備する。また、フィルタ関数 $\alpha(s)$ の影響を確認するため、正規化したときの偏差はそのままに、フィルタ関数を正規分布に似たベル型関数<sup>6)</sup>としたもの( $50^3\_hf\_asai\_dev = l_e/2$ )も準備する。さらに、元の $100^3$ 画素モデルについて、正規分布関数の偏差を3種類 $1/2$ 、 $1$ 、 $3/2$ 要素辺長(それぞれ、 $3^3$ 、 $5^3$ 、 $7^3$ 画素マスクに対応)としたもの( $100^3\_dev = l_e/2$ 等)を準備する。ここで、 $100^3$ 画素の要素辺長は $50^3$ 画素のもの $1/2$ である。

$w/c=30\%$ において、幾何形状の違う2モデルのマクロ挙動をそれぞれFig. 11, 12に示す。いずれの幾何モデルでも、圧縮強度の差は最大8%程度に留まる。詳細に注目すると、ダウンサンプリング法の違いとフィルタ関数の違いによる影響が最も少ないので、幾何形状の離散化誤差やフィルタ関数の差異への鋭敏性はそれほどないといえる。また、不均質材料による応力勾配があること、ピークに至るまでを考えていることから、もともと要素寸法への依存性は小さいと考えられるが、要素分割数を変えたときにフィルタ関数の偏差が一致するようにすると、影響はさらに小さくなる。フィルタ関数の偏差を大きくすると、圧縮強度は少しずつ高く評価される。その一方で、参考に過ぎないものの「周期構造物」としての圧縮軟化挙動は、フィルタ関数の偏差に強く依存している。したがって、要素分割時に主にフィルタ関数の偏差に注意すれば、マクロ視点の圧縮強度評価に限って本解法は適用可能といえる。

Fig. 13に、幾何モデル1の $100^3\_dev = l_e/2$ と $100^3\_dev = 3l_e/2$ におけるピーク前( $E_z = -500\mu$ )の損傷量分布を示す。フィルタ関数の偏差が大きくなると、非局所化の効果が大きくなるので、損傷面の厚さが増すことは述べるまでもないが、細かな損傷がなくなる。これらがピーク前における剛性の微増、ピーク値の増加、さらにはピーク後の脆性化の原因となっている。なお、

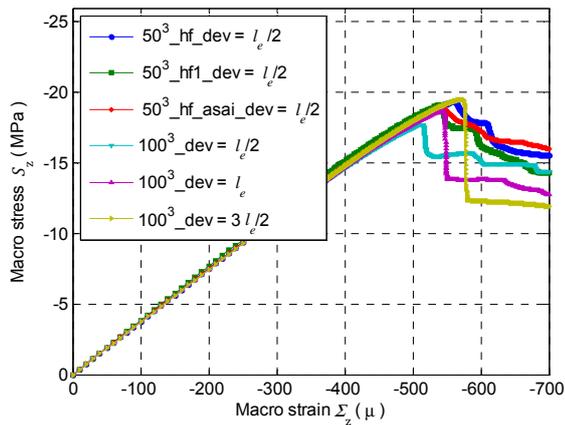


Fig. 11 Influence of mesh and filter function (w/c=30%, Age=28 days,  $G_f = 10^{-5}$  N/mm, Geom.=1)

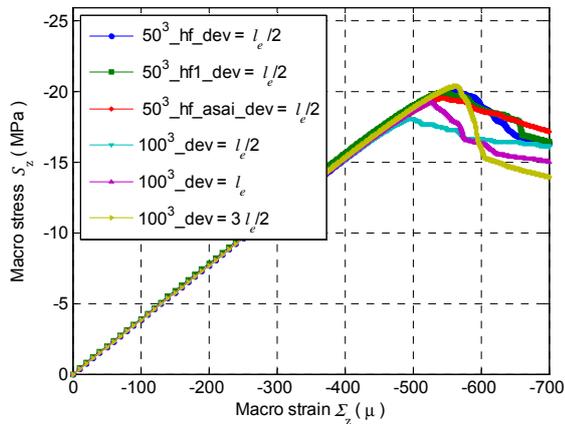


Fig. 12 Influence of mesh and filter function (w/c=30%, Age=28 days,  $G_f = 10^{-5}$  N/mm, Geom.=2)

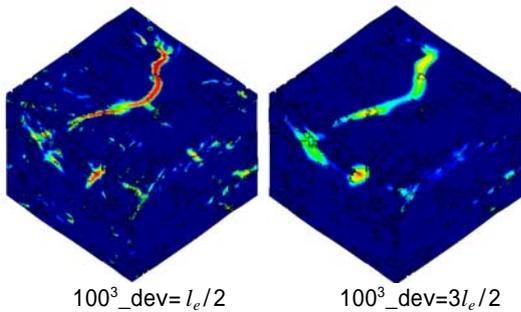


Fig. 13 Damage distributions in Microscopic model Y (w/c=30%, Age=28 days,  $G_f = 10^{-5}$  N/mm, Geom.=1)

両者の損傷量が異なっているのは、特徴長さ(式(13))に応じて、損傷面の厚き方向にひずみを線積分した変位量が等しくなるように式(12)でモデル化しているためである。

### 3.3 w/c と材齢による圧縮強度差の再現可能性

w/c と材齢による圧縮強度差の再現可能性を検討するため、w/c = 30, 45, 60%それぞれについて材齢 28 日と 10 ヶ月のモデルを準備する。Fig. 14 に、これら 6 モデルのマクロ挙動を示す。圧縮強度について、よく知られた傾向 一般に低 w/c ほど、高材齢ほど、圧縮強度が高くなる を再現している。各相の材料パ

ラメータ  $\varepsilon_u, G_f$  の同定を含めた実験結果との定量的な比較については、基本的に今後の課題であるが、計算結果よりも Table 1 に参考として示した圧縮強度のほうが全体的に数倍高くなっている。そこで参考までに、 $\varepsilon_u$  のみを一律 5 倍して  $\varepsilon_u = 500\mu$  とした場合のマクロ挙動を Fig. 15 に示す。 $\varepsilon_u = 100\mu$  とした圧縮強度(Fig. 14) に比べて、ひずみの集中により 5 倍には至らないものの総じて数倍高くなり、w/c=45%、材齢 10 ヶ月のもを除けば、Table 1 の圧縮強度に類似した値となる。以上より、本解法は w/c と材齢による圧縮強度差を再現できると考える。

なお、本論文の計算結果は C-S-H 相の微細空隙の影響を構成則に反映するために、Table. 3 に示した実測 Young 値を用いたものである。もし、w/c と材齢に関わらず C-S-H 相の Young 率を一律に 22.4GPa<sup>11)</sup> とした場合、Fig. 16 を得る。これは、自己相関関数の違いが圧縮強度に及ぼす影響の程度を示している。C-S-H の Young 率に比べて自己相関関数の圧縮強度への影響は大きくないものの、先ほどと同様、よく知られた傾向を再現している。高材齢のほうが高圧縮強度となる傾向については、Fig. 2 に示した各相の体積率から、高材齢で粗大空隙と未水和セメント粒子が減少することと対応づける。念のため、同一 w/c、同一材齢における幾何形状のばらつきの影響が無視できることを確認するため、前節と同様に材齢 28 日で w/c ごとに 3 モデルを準備した。同一 w/c における圧縮強度の差は最大でも 7%であり、Fig. 16 中における w/c 間の圧縮強度の差 20%程度より明らかに小さいので、自己相関関数の違いに比べて幾何形状のばらつきは無視できる。

w/c=30%と 60%それぞれにおける材齢 28 日のモデルについて、Fig. 17 の左右に圧縮ピーク直前(それぞれ  $E_z = -550\mu, -650\mu$ )での損傷量分布を相ごとに示す。w/c=30%の場合、未反応セメント粒子と粗大空隙の近傍にある C-S-H 相から損傷がはじまり、C-S-H 相と水酸化カルシウム相の損傷の一部が順次連結していく。この際、Fig. 16 左に示したように、基本的に未反応セメント粒子相の塊状部を避けながら損傷は進展する。一方、w/c=60%の場合、未反応セメント相に加えて、30%の場合では損傷した水酸化カルシウム相が損傷しなくなる(Fig. 17 右)。これは C-S-H 相の Young 率が最も小さいことから相対的に大きく変形する結果、C-S-H 相のみが等価一軸引張ひずみ  $\varepsilon_u = 100\mu$  に早く達するためである。

### 3.4 実行性能

実行性能の計測に用いた PC は、CPU : Intel Core i7 920 (理論演算速度 : 42.6Gflops (4 コア), 理論データ転送速度 25.6GB/sec), OS : Windows XP (32bit), コンパイラ : Intel Visual Fortran Ver. 11.1 (主要オプション : fast) である。

演算速度は 100<sup>3</sup> 要素でハイパースレッディング 8 コア並列のときに、SpMV 計算部は要素剛性の係数作成も含めて約 25Gflops, Intel Math Kernel Library を用い

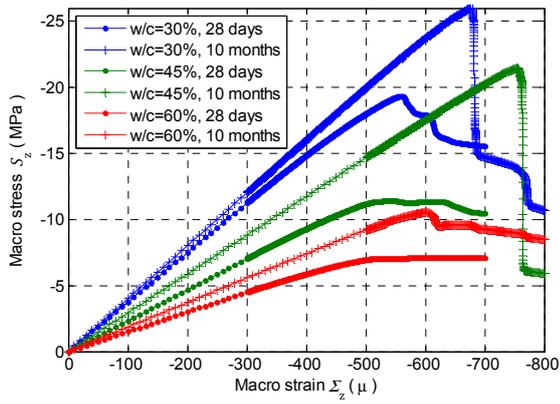


Fig. 14 Difference in w/c and age ( $G_f = 10^{-5}$  N/mm)

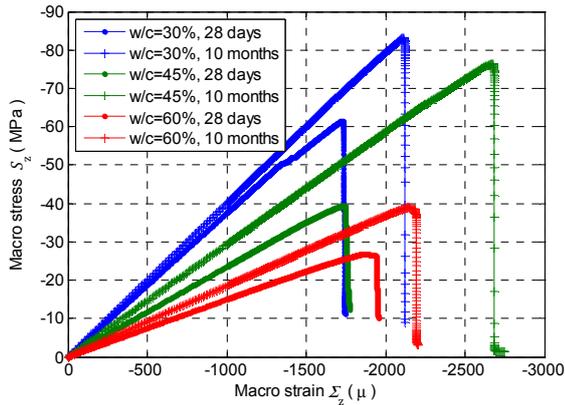


Fig. 15 Difference in w/c and age ( $G_f = 10^{-5}$  N/mm,  $\epsilon_u = 500\mu$ )

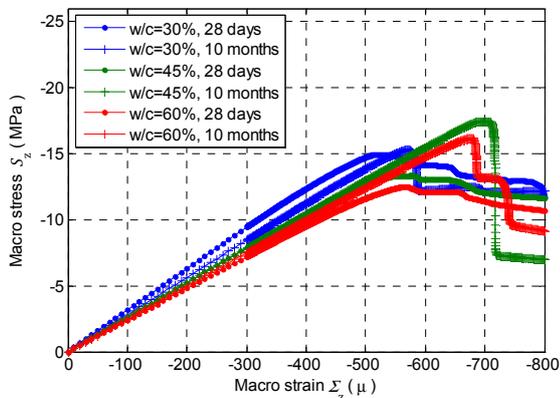


Fig. 16 Difference in w/c and age (Young moduli of C-S-H = 22.4GPa,  $G_f = 10^{-5}$  N/mm)

た単精度 FFT 前処理部は約 7Gflops, 内積計算部は約 1.6Gflops (キャッシュメモリを考慮しない場合の理論上限値はデータ転送速度で律速されて 3.2Gflops) であり, FFT-PCG 計算の 1 反復では約 17Gflops であった.

計算に要した実時間は, たとえば w/c=30%, 材齢 28 日の場合について,  $50^3$  要素で 30 分程度,  $100^3$  要素で 5.5 時間であった. また, 実メモリ使用量については, それぞれ 31MB, 183MB (全体節点変位ベクトル  $\mathbf{u}^1$  配列を単位として, それぞれ 10 本分, 8 本分ほど) であった. なお, いくつかの問題において, FFT 前処理

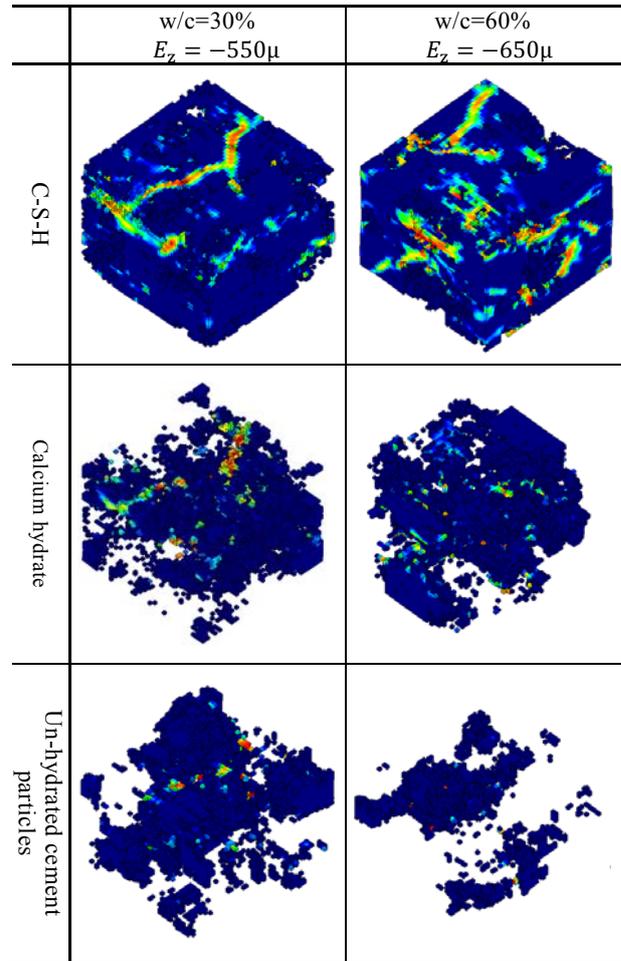


Fig. 17 Damage distributions just before compressive peak (Age=28 days,  $G_f = 10^{-5}$  N/mm)

部を倍精度としたが, FFT-PCG の収束性は単精度の場合とほとんど変わらないことを確認した.

#### 4. おわりに

本論文では, 硬化セメントペーストのマクロな圧縮強度を評価するために, 周期境界条件のもとでの非局所型の非線形ボクセル有限要素解法を構成した. そのうえで, マクロな応力-ひずみ関係で圧縮ピークまでの数値解が妥当なものであることを示した. また, 硬化セメントペーストの実測画像から統計的に作成したミクロ構造モデルと, C-S-H 相の実測 Young 率を用いることで, 圧縮強度の w/c と材齢による傾向が再現可能なことを示した.

今後の課題として, 定量的に圧縮強度を評価するためには, 特に各相の損傷開始規準である等価 1 軸引張ひずみ  $\epsilon_u$  (あるいはこれに対応する引張強度) の同定と, 寸法や境界条件等に関して本解法のモデル化と実験条件の両方をすり合わせる必要性が挙げられる. ただし, C-S-H 相は材齢・水セメント比・養生条件によりその構造が変化するため, 一意的に値を定めることは困難であり, ナノレベルでの構造の精密化などが必要である.

## 謝辞

九州大学 浅井光輝 准教授には非局所化や損傷開始規  
準について、東京大学 河合浩志 博士にはベクトル化  
のための実装法について、有益な助言を頂いたので、  
ここに記して謝意を表す。また、試料作製及び圧縮強  
度の測定に関しては、経済産業省より公益財団法人 原  
子力環境整備促進・資金管理センターに委託された「平  
成 21 年度地層処分技術調査等委託費 TRU 廃棄物処分  
技術人工バリア長期性能評価技術開発」で取得したデ  
ータの提供を受けた。

## 参考文献

- 1) 胡桃澤清文, 名和豊春: セメント硬化体の 3 次元  
イメージモデル構築と動弾性係数, 日本建築学会  
構造系論文集, No.642, pp.1405-1411, 2009
- 2) 池田翔太, 永井学志, 胡桃澤清文: イメージベース  
モデリングによるセメントペーストの弾性係数推  
定に関する基礎的検討, 日本コンクリート工学年  
次論文集, Vol.31, No.1, pp.499-504, 2009
- 3) 笹川崇, 車谷麻緒, 寺田賢二郎, 閑田徹志, 全振煥  
煥: 超高強度セメントペースト微細構造のひび割  
れ挙動解析と強度評価, 計算工学講演会論文集  
14(2), pp.945-948, 2009
- 4) J. Oliver, M. Cervera, S. Oller and J. Lubliner:  
Isotropic Damage Models and Smearred Crack Analysis  
of Concrete, Computer Aided Analysis and Design of  
Concrete Structures, Proceedings of SCI-C 1990, II.  
International Conference(Austria), pp.945-957, 1990
- 5) Z. P. Bazant and G. Pijaudier-Cabot: Nonlocal  
Continuum Damage, Localization Instability and  
Convergence, Journal of Applied Mechanics, ASME,  
Vol.55, pp.287-293, 1988
- 6) 浅井光輝, 山岸道弘, 寺田賢二郎, 永井学志: 非局  
所型ボクセル有限要素法の開発とその破壊挙動解  
析への適用, 土木学会論文集, No.759 / I-67, pp.  
233-245, 2004
- 7) 山田貴博, 永井学志: コンクリート材料のメソ  
スケール解析のための高速な数値計算法, 応用力学  
論文集, Vol.3, pp.177-184, 2000
- 8) 寺田賢二郎, 菊池昇: 均質化法入門, 丸善株式会社,  
2003
- 9) H. Tadano and T. Sakurai: On Single Precision  
Preconditioners for Krylov Subspace Iterative Methods,  
Large-Scale Scientific Computing, Springer Berlin /  
Heidelberg, Vol.4818, pp.721-728, 2007
- 10) N. Bell and M. Garland: Efficient Sparse Matrix-Vector  
Multiplication on CUDA, [http://www.nvidia.com/docs/  
IO/66889/nvr-2008-004.pdf](http://www.nvidia.com/docs/IO/66889/nvr-2008-004.pdf), December 11, 2008
- 11) C. -J. Haecker, E. J. Garboczi, J. W. Bullard, R. B.  
Bohn, Z. Sun, S. P. Shah and T. Voigt : Modeling the  
Linear Elastic Properties of Portland Cement Paste,  
Cement and Concrete Research, Vol.35,pp. 1948-1960,  
2005
- 12) 胡桃澤清文, 名和豊春, 奈良禎太: セメント硬化体  
の微細構造と弾性挙動, 日本コンクリート工学年  
次論文集, Vol.30, No.1, pp.591-596, 2008
- 13) (財)原子力環境整備促進・資金管理センター:  
平成 21 年度地層処分技術調査等委託費 TRU 廃棄物  
処分技術人工バリア長期性能評価技術開発報告書  
(第 1 分冊),(財)原子力環境整備促進・資金管  
理センター (2010)