

## 構成材料の空間的特性に着目したモルタルの物質移動特性のモデル化

Modeling of mass transport property of mortar aiming to spatial properties of materials

加藤 佳孝\*・魚本 健人\*\*

Yoshitaka KATO and Taketo UOMOTO

## 1. はじめに

現在までセメント硬化体の物質移動特性を表現する指標としては、硬化体全体を表現する見かけの拡散係数が多く用いられてきている。しかし、セメント硬化体の物質移動を規定する要因（吸着および化学的現象を無視した場合）を厳密に捉えると以下のように大別できる。①硬化体構成要素毎に求まる移動係数（拡散係数等）、②移動係数が硬化体内でどのように配列するかによる空間的影響。つまり、従来までの拡散係数はあくまでも硬化体全体を表現する“見かけの拡散係数”であり、上記した2つの要因を包括した指標である。このため、配合条件等の条件が変化した場合、拡散係数は汎用性に欠ける表現方法であった。本研究では、上記の2つの要因を独立に取り扱うことにより、物質移動特性のモデル化を行った。

## 2 硬化体の移動係数の算出

セメント硬化体の物質移動は、セメントペーストおよび遷移帯によって主に支配されている。そのため、硬化体全体の移動特性を把握するためには、全体系としての見かけの移動係数を把握するよりも、構成要素毎の移動特性を把握することの方が、正確であり汎用性を有している。これらに関しては既報<sup>1)</sup>にて、構成要素の移動係数を算出する方法を提案した。ここで言う移動係数とは、拡散係数のように次元を持った定量的な値ではなく、移動のし易さを示す程度の値であり、移動係数が大きいほど移動がし易いことを示している。表1にセメントペーストおよび遷移帯の移動係数を示す。ここで、遷移帯の特性は骨材の大きさに影響を受けるため、遷移帯の移動係数は骨材径毎に求めている（表中LS, MS, SSは細骨材の平均粒径を意味しそれぞれ1.44, 0.89, 0.35 mm）。

\*東京大学生産技術研究所 第5部

\*\*東京大学国際・産学共同研究センター

表1 各要素の移動係数

	CP	遷移帯		
		LS	MS	SS
W/C=0.5	1.9	10.9	3.0	2.2

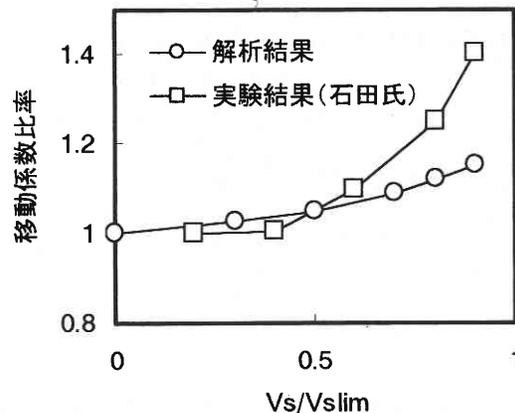


図1 計算結果と実験結果の比較

既報によって提案した3次元 King のモデル<sup>1)</sup>を用いて、硬化体の物質移動を司る2相（セメントペースト、遷移帯）における全体の移動係数を上記構成要素毎の移動係数を用いて算出する。また、見かけの拡散係数としては既往の研究より<sup>2)</sup>、1 mm の疑似骨材とセメントペーストから構成される硬化体の正規化透気係数（硬化体全体の透気係数をセメントペーストの体積割合で除すことにより骨材量の影響を排除したもの）を使用する。両者の骨材実績率割合（ $V_s/V_{slim}$ ）との関係を図1に示す。図中○印が3次元 King のモデルを用いた結果であり、□印が既往の研究による実験結果である。ここで、両者を比較するために、セメントペーストに対する比率（移動係数比率）で表現する。なお、実験結果はセメントペーストに対して行っていない

研 究 速 報

ため、骨材の量が最小な場合に対する比率で表している。一般的に、骨材の混入割合が硬化体の移動現象に与える影響としては、図1に示したような場合（実験結果参照）、混入量が少ない範囲の透気係数はセメントペーストの場合とほぼ同一で、ある値から急激に増加傾向を示すと言われている。この理由としては、従来遷移帯の連結性が要因であるとされている。しかし、透気係数や拡散係数等に代表される物質の移動を示す指標は、本来通過する径の大きさや量に依存する物理的指標であり、連結性といった空間的問題に影響を受ける物理量ではない。一方、解析によって求めた硬化体全体の移動係数は、骨材の混入に伴う遷移帯領域（径、容量共にセメントペースト部よりも大きい領域）の増加に伴って、単調に増加していることがわかる。これは、移動係数としての物理的意味に即している結果であるといえる。つまり、両者の違いは硬化体を構成する要素の空間的配列による物であると考えられる。そこで、以下空間的特性に着目した物質移動のモデル化を行う。

3. 硬化体物質移動のモデル化

3.1 2次元FEMによる拡散解析

セメント硬化体の単純な物質移動特性（非反応性物質の拡散現象）を表現するために、式(1)に示すFickの第2法則に基づく2次元拡散方程式を用いた。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \dots\dots\dots (1)$$

ここに、c：濃度、D：拡散係数

解析の対象範囲は24×24の合計576要素とし、解析対象内に存在する要素としてはセメントペースト、遷移帯、骨材の3種類とする。このとき、遷移帯の厚さはブリーディングの生じていないモルタルでは約25μm<sup>3)</sup>、ブリーディングを簡易的に考慮したコンクリートの場合約55μm<sup>3)</sup>である。ここで、1要素の大きさを遷移帯の厚さに合わせた場合、解析範囲がモルタルでは0.6mm、コンクリートでは1.32mmとなり、硬化体をシミュレートすることが不可能である。そこで、2次元要素である骨材領域の周囲に1次元要素である遷移帯（遷移帯厚さは考慮する）を張り付ける概念をプログラムに反映させる手法を採用した<sup>4)</sup>。材料の配置は、配合に応じた骨材量をモンテカルロシミュレーションに基づいた乱数発生により配置し、骨材以外の領域をセメントペーストとすることにより一般化させる方法を採用した。骨材同士が連結した場合、骨材周囲の遷移帯領域の特性としては保有していた遷移帯厚さを足し合わせることにのみにより規定した。つまり、連結した骨材周囲

にある遷移帯の厚さが両者ともに25μmであった場合、50μmの厚さを接点間の拡散計算の中に取り込むということである。ここでは、硬化体中の物の流れをシミュレートすることを念頭に置いているため、拡散する対象物質を特定しない。拡散係数はセメントペースト領域を0.1(cm<sup>2</sup>/day)、骨材領域を0(cm<sup>2</sup>/day)、遷移帯領域に関しては表1に示した移動係数をセメントペーストの拡散係数に対する比率として採用した。初期および境界条件としては式(2)に示す条件を採用した。

初期条件：c(x, y, 0) = 0  
 ..... (2)  
 境界条件：c(x, 0, t) = 1.0

3.2 モルタル硬化体の解析および考察

解析手法の妥当性を確認するために、本研究ではブリーディングの生じていないモルタルを対象に解析を行う。また、実際の場合骨材は粒度分布を持っているが、ここでは簡易的に平均的な粒径を0.8mm（要素としては2×2）として単一径の細骨材が存在すると仮定した。また、遷移帯の特性は骨材径に依存して変化するため<sup>3)</sup>、骨材の粒度分布を考慮した平均的な特性を与えることとした。解析の対象を水セメント比0.5とし標準的な細骨材を使用した場合、平均遷移帯厚さは25μmであり移動係数はセメントペーストの2.75倍である（表1参照）。

解析結果は図2に示すように骨材がランダムに配置されているために、境界面からある距離における濃度分布が一定でなく、解析結果をそのまま評価することが困難である。そこで、境界面から最遠の距離における濃度の平均値を結果として用いる。図3は解析結果の一例であり、濃度の経時変化を示している。さらに、通常の拡散試験は対象物質

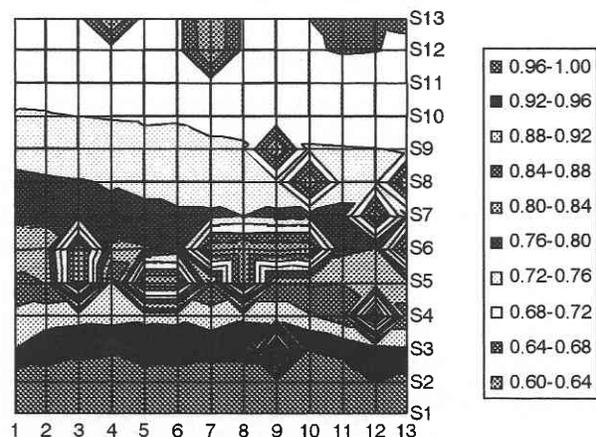


図2 濃度分布の概念図

が供試体を通り抜ける量を経時的に測定し、その結果を1次元の拡散現象と見なし見かけの拡散係数を算出している。そこで、**図3**に示した解析結果に式(3)で示される1次元の拡散方程式の理論解を適用することにより見かけの拡散係数を算出し、これを解析結果として用いた。

$$c(x, t) = 1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \dots\dots\dots (3)$$

ここに、 $c$  : 濃度,  $x$  : 境界面からの距離 (cm)  
 $D$  : 見かけの拡散係数 (cm<sup>2</sup>/day),  $t$  : 時間 (day)

**図4**に解析結果と既往の研究<sup>2)</sup>の透気係数の結果を示す。ここで、両者の移動係数を同等に取り扱うために、先ほどと同様にセメントペーストの拡散係数に対する比率として表現している。本解析は、従来言われている骨材量の増加に伴う拡散係数の急激な増加という現象を表現することが可能であることがわかる。しかし、その増加の開始す

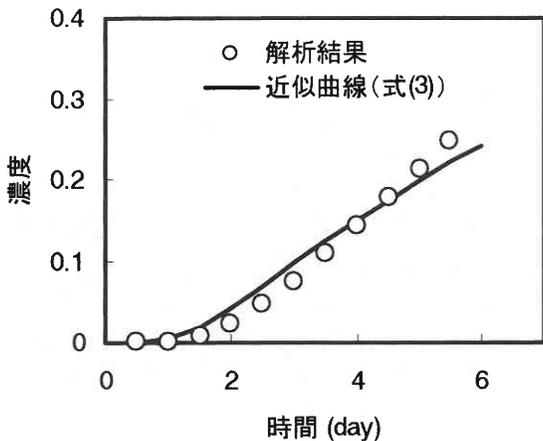


図3 解析結果の一例 (濃度の経時変化)

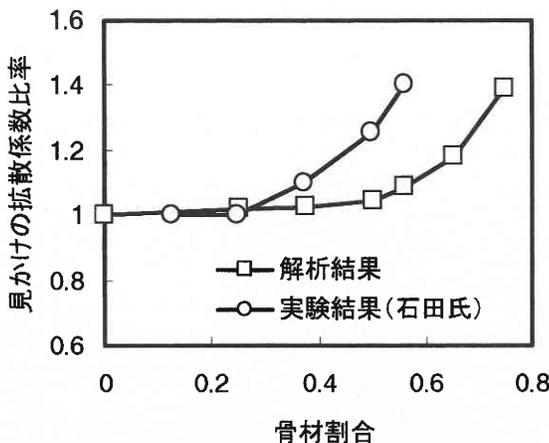


図4 解析結果と実験結果 (見かけの拡散係数)

る細骨材量が実験結果と大きく異なっている。これは、移動現象 (特に骨材や遷移帯の影響等を取り込んだモデル) を考えた場合、その空間的配列が非常に重要な要因として考えられ、これらの要因が2次元と3次元で果たす役割は異なっているということは容易に想像できる。空間的な特性を考えた場合骨材の配列とそれに伴う遷移帯の配置が問題となると考えられる。そこで、両者を統一的に論じることができると考えられる骨材間距離に着目して、次元の差に関して検討する。

まず始めに3次元の場合に関して述べる。平均粒径が  $D_b$  である粒子が単位体積当たり  $N$  個ある場合の占有体積  $d_b$  は、式(4)として表現できる ( $g$  : 形状係数)。一方粒子が互いに接触するまで大きくなったときの粒径を  $D_b + t_{3D}$  とすれば、そのときの占有体積  $d_0$  は、式(5)として表現できる。両者から骨材間距離を表す  $t_{3D}$  は、式(6)として示される。また、粒子同士が接触するまで大きくなった状態を限界の充填容積とみなすと、 $d_0$  は限界単位骨材容積つまり  $V_{lim}$  (3次元における実積率) と同義である。従って式(6)は式(7)のように変換できる。

2次元の場合も同様にして考えると、骨材間距離 ( $t_{2D}$ ) は式(8)として表現できる ( $A_{lim}$  は2次元における実積率)。

$$d_b = N \cdot g \cdot D_b^3 \dots\dots\dots (4)$$

$$d_0 = N \cdot g \cdot (D_b + t_{3D})^3 \dots\dots\dots (5)$$

$$t_{3D} = \left\{ \left( \frac{d_0}{d_b} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right\} \cdot D_b \dots\dots\dots (6)$$

$$t_{3D} = \left\{ \left( \frac{1}{V/V_{lim}} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right\} \cdot D_b \dots\dots\dots (7)$$

$$t_{2D} = \left\{ \left( \frac{1}{A/A_{lim}} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right\} \cdot D_b \dots\dots\dots (8)$$

$$\left( \frac{1}{V/V_{lim}} \right)^{\frac{1}{3}} = \left( \frac{1}{A/A_{lim}} \right)^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (9)$$

$$A = A_{lim} \cdot V_{lim}^{-\frac{2}{3}} \cdot V^{\frac{2}{3}}$$

ここで、2次元と3次元における骨材間距離が同一とな

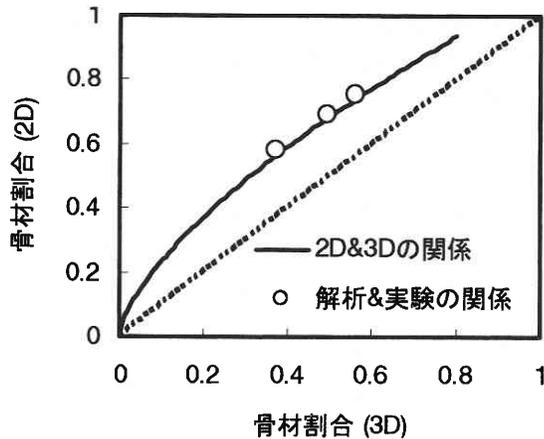


図5 2次元と3次元の関係

る時（遷移帯の連結性に関して同義）が物質移動に関して両者を比較することが妥当であるとすれば、式(7)、(8)より二次元における骨材の占有率の関係式が式(9)のように表現することができる。

遷移帯の連結性に関して同義となる2次元と3次元における骨材割合の関係を図5に示す。ここで、各々の次元における実積率であるが3次元の場合は実験結果より0.62を用いた。2次元に関しては $24 \times 24$ の解析範囲内に骨材( $2 \times 2$ )をランダムに配置させることにより最大骨材割合を求め、これを2次元における実積率(0.79)として用いた。ここで、実験結果と解析結果を比較するために、実験結果と解析結果の見かけの拡散係数比率が同じ値を示すときの、両者の骨材割合の関係を図5に○印として示した。図より両者の関係は、計算により求めた2次元と3次元の関係とほぼ等しい関係にあることがわかる。これにより、本解析結果が妥当であることが検証され、今後は本モデルを3次元へと拡張することによって実際の現象を表現できることが明らかとなった。

#### 4 おわりに

セメント硬化体を構成する3要素（セメントペースト、遷移帯、骨材）の移動係数を独立に算出した結果を用い、各々の空間的特性を考慮した形で硬化体全体の移動現象をシミュレートする手法を提案した。その結果、従来から言われている骨材量の増加に伴う見かけの拡散係数の急激な増加現象を再現することが可能となった。しかし、急激な増加が生じる骨材量が実験と解析では大きく異なっていた。これは、ある骨材量に対する遷移帯の連結性が2次元と3次元では異なるためであることを、骨材間距離を指標にして考察した。その結果、本手法を3次元へと拡張することにより実際の現象を追従することが可能であることがわかった。本モデルの最大の利点は、移動を規定する2要因を切り離して考慮している点であり、これにより任意の配合条件に対する硬化体の移動現象をシミュレートすることができる可能性を示した点にある。

(1999年8月10日受理)

#### 参 考 文 献

- 1) 加藤佳孝, 魚本健人: 遷移帯およびセメントペーストの物質移動特性の定量的評価手法に関する一考察, セメント技術大会・講演集, Vol.53, pp.196-197, 1999.
- 2) 石田哲也, 前川宏一: 物質移動特性からみたコンクリートの微小空隙構造, 土木学会第49回年次学術講演会講演概要集, pp.1020-1021, 1994.
- 3) 加藤佳孝: 遷移帯がコンクリートの物質移動現象に及ぼす影響, 東京大学学位論文.
- 4) 出口知史, 魚本健人: 骨材界面組織が物質拡散に及ぼす影響, 東京大学大学院工学系研究科修士論文, 1998.