# セメントの水和反応・組織形成モデルを用いた コンクリートの発熱・硬化シミュレーション

Simulation of Temperature Rise and Strength Development of Concrete Using the Mathematical Model for Cement Hydration and Microstructure Formation

> 宇都宮大学 地域デザイン科学部 Department of Architecture and Urban Design Utsunomiya University

<sup>教授</sup> **杉山 央** SUGIYAMA Hisashi



# 1. 建築分野における性能設計

社会ニーズの多様化,経済活動のグローバル化,品質 確保、コスト低減などの時代の流れに呼応して、産業界 で基準認証等の見直しが進められてきた。建築分野では、 1998年の建築基準法改正において性能規定の理念がは じめて導入された。性能規定では、従来の仕様規定に比 べて社会(ユーザー)に対する説明が明確になる,設計・ 施工の自由度が増す、さらには新材料・新技術の開発が 促進されるなどの利点がある。このため、建築物全体レ ベルの設計のみならず建築材料・部材レベルからの導入 が期待された。しかし、性能規定化への進展状況は各分 野で異なり、建築材料・部材の分野では性能規定化への 移行が十分に進んでいない。とりわけ、コンクリートの 調合設計・製造・施工については、依然として従来から の仕様規定型設計(以降,仕様設計と表記)が主流となっ ている。なお、仕様設計と性能規定型設計(以降、性能 設計と表記)は、次のような概念で区分できる。

### 【仕様設計】

設計における手法や過程を重視しており、過去の経験や事例をもとに規定された方法・手順に従って設計すれば、自ずと最終的な要求性能(目標性能)を達成できる。設計の方法・手順は限定されているが、設計の方針は明確であり、マニュアル化が容易である。大幅な余裕を見込んでいるため、要求性能を過剰に上回る場合もある。

#### 【性能設計】

設計による結果を重視しており、最終的な要求性能(目標性能)が達成できれば、その方法・手順等についての選択肢は幅広い。設計者には様々な工夫の余地が生まれるが、要求性能を満たしているかどうかを検証することが必要になる。

#### 2. コンクリートの性能設計

まだ多くの課題があるが、将来、コンクリートの調合設計、製造および施工の分野に性能設計が導入されると、従来の仕様設計と比較して種々のメリット、デメリットが予想される。

#### (1) 要求性能の設定の自由度

これまでの仕様設計では、コンクリートの強度管理を行う材齢がほぼ限定されている(例えば、28日、91日など)。しかし、施工計画等の事情から任意の材齢で設計基準強度を満足させる必要が生じる場合もある。仕様設計ではこのような任意の要求性能に対応することはできないが、性能設計であれば対応可能であり、要求性能を設定するにあたっての自由度は大きい。

# (2) 材料選択・調合設計の自由度

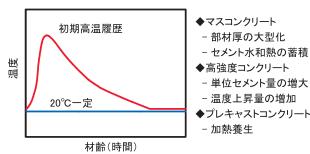
年々新たなセメントや混和材料などが開発されており、またコンクリートに要求される機能および性能も多様化してきている。このように多種多様なコンクリートのすべてに対応した仕様を定めることは困難である。これに対して、性能設計では要求性能を満足することが検証できれば、コンクリートに使用する材料の選択および調合設計における制約は少なく、その自由度は大きい。

#### (3) 新技術の利活用

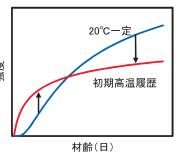
性能設計では要求性能を明確に設定し、その性能を満足することを事前に検証することが重要である。その検証の方法としては、あらかじめ実験を行って確認する方法や数値解析技術を利用する方法などが考えられる。後者については、コンピュータを利用してコンクリートの各種性状を精緻に予測する技術等が研究・開発されている。このようなシミュレーションによる新技術を利用すれば、効率的な性能設計が実現可能になる。

# (4) 責任の大きさ

コンクリートの調合設計・製造・施工については、学協会からオーソライズされた標準仕様書が出版されており、多くの仕様設計ではこれらを利用している。基本的に標準仕様書の規定に従っていれば、設計者が調合設計等について大きな責任を負うことは少ない。他方、性能設計では要求性能を確実に満足することを何らかの手法により検証する必要がある。このため、検証の方法や判断基準についてはリスクが存在し、設計者・製造者が負う責任は大きい。



- ◆マスコンクリート
- 部材厚の大型化
- セメント水和熱の蓄積
- ◆高強度コンクリート
- 単位セメント量の増大
- 温度上昇量の増加
- 加熱養生



- ◆特異な強度発現 Т
- ·調合設計上の問題
- ・強度管理上の問題
- ●現象の解明
- ●現象の予測
- ●解決策の提案

図1 初期高温履歴と強度発現

# 3. セメントの水和反応・組織形成モデル

性能設計によるメリットは多いが、要求性能を満足す ることを検証しなければならない。特に、コンクリート は使用材料の種類,調合,硬化過程での環境条件,さら には部材の形状・寸法などによって硬化後の性質が大き く変わる材料であり、このような性状を網羅した性能設 計の実現は難しい。例えば、高強度コンクリートやマス コンクリートはセメントの水和反応熱によって温度が上 昇し、プレキャストコンクリートは製造過程で加熱養生 する。図1に示すように、いずれも初期材齢に高温を履 歴するため、20℃一定条件で養生したコンクリートとは 大きく異なった硬化性状を示す。高強度のプレキャスト コンクリートとなれば、一層複雑な発熱・硬化性状を示す。 一方、最近ではセメントの水和反応モデルをベースと したコンピュータ解析により、コンクリートの各種性状 を精緻に予測する技術が研究・開発されている。これを 有効に利用すれば、多様なコンクリートに対応した性能 設計が可能になる。筆者も、セメントの水和反応が進行 して、微細組織を形成していく過程を精緻に表す水和反 応・微細組織形成モデルを構築した1),2)。

セメントの水和反応・微細組織形成モデルでは, 水和反応によるセメント粒子どうしの結合に着目

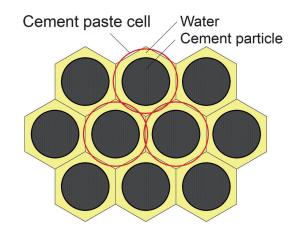


図2 セメントペーストセル

し、セメント粒子の内側だけではなく、外側で進行す る水和反応および組織形成も精緻に表すことを目指し た。まず、図2に示すような1個のセメント粒子とそれ を取り巻く水により構成されるセメントペーストセルを 設定した。そして、図3に示すようにセメントペースト セル内のセメント粒子と水の物質収支を考え、セメント 粒子内に拡散する水とつり合う量のセメント成分(C3S, C<sub>2</sub>S, C<sub>3</sub>A および C<sub>4</sub>AF) がセメント粒子外に拡散する という双方向の非定常拡散理論を導入した。なお、図3

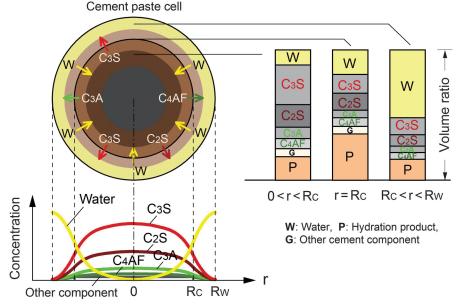
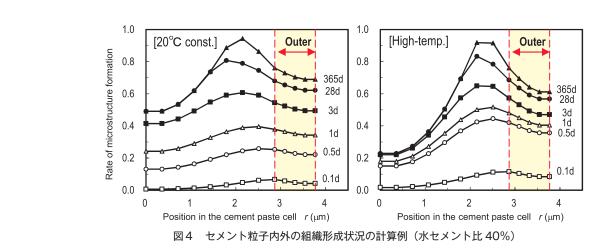


図3 セメントペーストセル内の非定常拡散と濃度分布



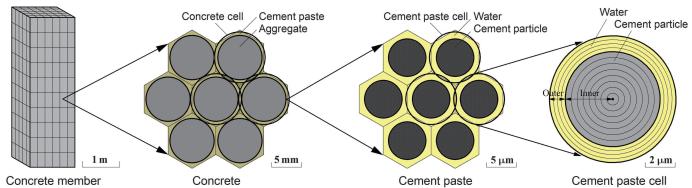
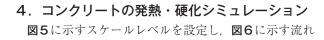


図5 スケールレベル

中で、Rc はセメント粒子の半径、Rw はセメントペーストセルの半径を示す。また、セメント成分と水の化学反応は、セメント粒子の内外を問わず、両者が出会った位置で進行すると考え、2次反応の理論によって表すことにした。以上の理論のもと、セメントの水和反応・組織形成モデルを構築した。これにより、水和反応率に加えて、セメント粒子内外の水和物による組織形成率が計算可能になった。

計算例として、20C一定条件および初期高温履歴条件で水和反応した場合のセメント粒子内外の組織形成状況をそれぞれ図4に示す。なお、図4中で、セメント粒子の半径 RC は  $2.87~\mu$  m、セメントペーストセルの半径 RW は  $3.77~\mu$  m である。初期段階で水が存在するのは  $2.87~\alpha$   $3.77~\mu$  m の領域であるが、時間の経過とともに水がセメント粒子内に拡散していく。この計算結果によれば、水和反応初期に高温履歴を受けると、セメント粒子内外の組織形成が一時的に促進されるが、その後の組織形成が十分に進行せず、特にセメント粒子外部( $2.87~\alpha$ 3.77 $\mu$  m)の組織形成が停滞することがわかる。すなわち、初期高温履歴を受けるとセメント粒子どうしの結合が脆弱となり、これに起因して長期的な強度増進が停滞することを理論的に説明することができる。



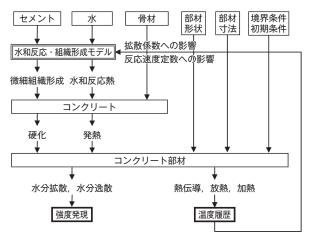


図6 コンクリートの発熱・硬化シミュレーションの流れ

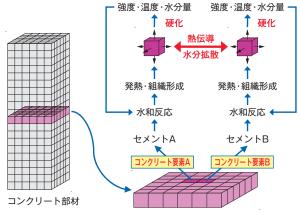


図7 コンクリートの発熱・硬化シミュレーションの概念図

の発熱・硬化シミュレーションシステムを構築した<sup>3)-8)</sup>。 本システムでは、セメントの水和反応・組織形成モデル を起点としており、**図7**に示すようにコンクリート部材 中の様々な位置におけるセメントの水和反応・組織形成 過程をすべて個別に計算する仕組みとなっている。なお、 精緻な計算を行うために、次のような各種情報が必要で ある。

- 1) セメントの化合物割合,密度,比表面積など
- 2) 骨材の密度, 吸水率, 比熱など
- 3) コンクリートの調合、初期温度、熱伝導率など
- 4) コンクリート部材の形状、寸法など
- 5) 型枠の熱伝導率, 厚さ, 存置期間など
- 6) 外気の温度, 湿度, 風速など

発熱シミュレーションでは、セメントの水和反応熱、コンクリートの発熱、コンクリート部材中での熱伝導を順次計算することで、コンクリート部材の温度履歴が予測できる。ケーススタディとして、図8に示すように実大コンクリート柱部材(断面寸法:1000×1000mm)

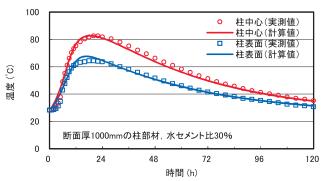


図8 実大コンクリート柱部材の温度履歴の計算例

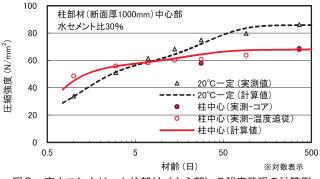


図9 実大コンクリート柱部材(中心部)の強度発現の計算例

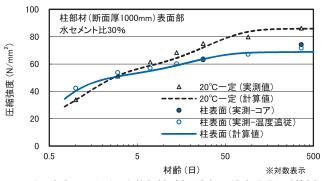


図 10 実大コンクリート柱部材(表面部)の強度発現の計算例

の温度履歴をシミュレーション計算した。計算温度を実 測温度と比較すると、良好な精度で計算できていること がわかる。

硬化シミュレーションでは、セメント水和物の微細組織形成率、セメント硬化体の強度などの硬化性状に深く関与する物理量を順次計算することで、コンクリート部材の強度発現が予測できる。ケーススタディとして、図9および図10に示すように実大コンクリート柱部材の中心部および表面部の強度発現をシミュレーション計算した。計算強度をコア供試体強度および温度追従供試体強度と比較すると、良好な精度で計算できていることがわかる。

# 5. プレキャストコンクリートの温度上昇シミュレーション

プレキャストコンクリートは、その製造過程において、蒸気を用いた加熱養生を行うことが多い。蒸気加熱養生では、蒸気が持つ熱量が直接伝わる顕熱に加えて、蒸気が凝縮することにより発生する潜熱も作用するため、効率的にコンクリートを加熱することができる。この現象を図示すると、図 11 のようになる。ここで、 $d_f: 型枠の厚さ(m)$ 、 $d_w: 表面水膜の厚さ(m)$ 、 $T_a: 外部空気の温度(K)$ 、 $T_w: 表面水の温度(K)$ 、 $T_f: 型枠外面の温度(K)$ 、 $T_s: コンクリート表面の温度(K)$ 、 $X_a: 外部空気の絶対湿度(kg/kg(DA))$ 、 $X'_f: 型枠外面の飽和絶対湿度(kg/kg(DA))$ 、 $r_w: 水蒸気の凝縮潜熱(J/kg)である。$ 

これらをもとに、外部空気からの顕熱により型枠に与えられる熱流束  $g_a(W/m^2)$ 、外部空気中の水蒸気の移動

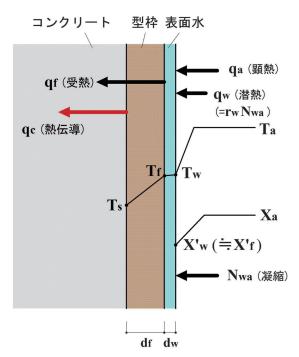


図 11 プレキャストコンクリートの表面の熱伝達

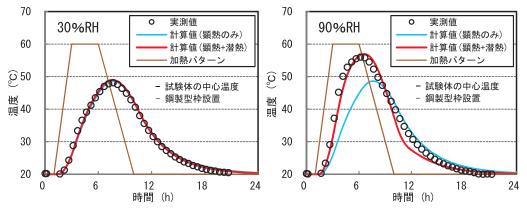


図 12 鋼製型枠中のコンクリートの加熱による温度変化(湿度別)

流束  $Nwa(kg/(m^2 \cdot s))$ , 外部空気中の水蒸気が凝縮して発生する潜熱により型枠に与えられる熱流束  $qw(W/m^2)$ , 型枠内を通過する熱流束  $qf(W/m^2)$ , 型枠からコンクリート表面に与えられる熱流束  $qc(W/m^2)$  がそれぞれ計算できる g0.

図 12 は、鋼製型枠内で 28 日間養生してセメント水和発熱による温度変化が終了したコンクリート試験体 (寸法:  $200 \times 200 \times 400$ mm) を調温調湿チャンバー内に存置し、チャンバー内の空気の相対湿度を 30 および 90% RH とした条件で、それぞれ空気の温度を  $20 \rightarrow 60 \rightarrow 20$   $\mathbb{C}$  に変化させて、試験体の中心温度を測定した結果である。

30% RH の条件では顕熱のみによって温度上昇が生じているが、90% RH の条件では顕熱に加えて潜熱(凝縮熱)も作用しており、30% RH の場合よりも温度上昇勾配が急激で最高温度が高い。図 12 中の青色の線は顕熱のみを取り上げて試験体温度を計算したものであり、赤色の線は顕熱に加えて潜熱の影響も組み込んで試験体温度を計算したものである。30% RH では両者の計算結果に違いはないが、90% RH では赤色の線の方が実測値と整合していることがわかる。

以上にように、プレキャストコンクリートでは、セメントの水和反応熱、外部からの顕熱および潜熱の3つの作用によって複雑な温度上昇過程を示す。図 13 は、

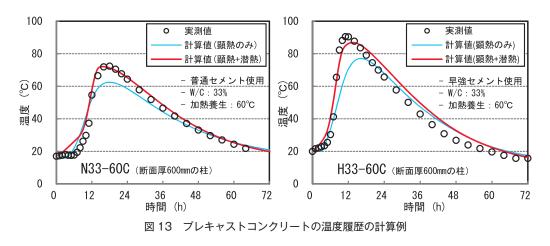
最高温度 60℃の加熱養生を行ったプレキャストコンクリート柱部材(断面寸法:600×600mm)の温度上昇をシミュレーション計算したものである。青色の線は顕熱のみを取り上げて計算したもの、赤色の線は顕熱に加えて潜熱の影響も組み込んで計算したものである。赤色の線の方が実測値と整合しており、潜熱の影響も組み込むことで、プレキャストコンクリートの温度上昇を精度よく予測計算できることがわかる。

# 6. シミュレーション技術と性能設計

コンクリートの各種性状をシミュレーション計算する 技術を利用すれば、要求性能を満足させるための最適値 を導出するためのシステムを構築することができ、さら には効率的な調合設計および製造計画の策定が可能にな る。例えば、次のようなケースに有効である。

# 【要求強度を満足させるための水セメント比の導出例】

コンクリート部材内では位置によって履歴する温度が異なり、この影響によって強度発現も位置によって異なる。特に、コンクリート部材の寸法(断面厚)が大きくなるほど位置による強度の差異は顕著となる。ここでは、コンクリート部材(幅 1000 × 奥行 1000 × 高さ3000mm、加熱せずに外気温 20℃で養生)内のすべての位置において、材齢1日で30N/mm²以上の圧縮強度を満足させるために必要な水セメント比の導出例を示す。





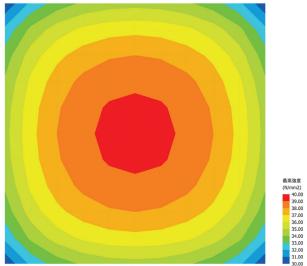


図 14 要求強度を満足させるための水セメント比の導出例

5回のシミュレーション計算を繰り返し、要求強度を満足させるために必要な水セメント比を導出した結果を図14に示す。ここでは初期条件として単位水量を160kg/m³に設定したので、単位セメント量の最適値を求める例題と等価になるが、材齢1日においてコンクリート部材内のすべての位置の圧縮強度を30N/mm²以上にするためには496kg/m³の単位セメント量が必要であり、水セメント比を32.3%にすればよいという結果が導かれている。

ここで導出された単位セメント量および水セメント比は、あくまでも要求強度を満足させるために必要な数値であり、フレッシュコンクリートのワーカビリティー等の観点から適切な数値であるかどうかも別途検討する必要がある。このように実務で利用するにはまだ課題が残されているが、性能設計を支援するための計算ツールの1つとして役立つものである。

### 7. まとめ

このようなシミュレーションシステムを活用すれば、コンクリート試験を行わずに予測計算のみで効率的な調合設計・製造計画が可能になる。例えば、調合を決める際に、実際の部材と同じ寸法の試験体を作製してコア供試体強度を調べるというような多大な労力・費用・時間がかかる作業が不要になる。

ここで紹介したシミュレーションシステムに限らず,

国内外でコンクリートの各種性状を予測するための技術 が開発されており、予測計算のみで性能設計を行うよう な将来像も見えてきている。

#### 参考文献

- 杉山央ほか:非定常拡散理論に基づくセメントの水和反応・組織形成モデル、セメント・コンクリート論文集、第53号、pp.35-42、2000
- H. Sugiyama: Mathematical model for the hydration of cement and the formation of microstructure based on the unsteady diffusion theory, Proceedings of International Workshop on Control of Cracking in Early-Age Concrete, pp.107-118, 2000
- 3) 杉山央ほか:セメントの水和反応・組織形成モデル を用いたコンクリートの強度発現推定,セメント・ コンクリート論文集,第54号,pp.646-653,2001
- 4) H. Sugiyama: Prediction of Strength Development of Concrete Using Mathematical Model for Hydration of Cement and Formation of Microstructure, Proceedings of 6th CANMET/ACI International Conference on Durability of Concrete, pp.417-431, 2003
- 5) 杉山央ほか:セメントの水和反応・組織形成モデル を用いたコンクリートの発熱シミュレーション,日 本建築学会構造系論文集,第565号,pp.9-16,2003
- 6) H. Sugiyama: Simulation of Adiabatic Temperature Rise of Concrete Using Mathematical Model for Hydration of Cement and Formation of Microstructure, Proceedings of 7th CANMET/ACI International Conference on Recent Advances in Concrete Technology, pp.317-332, 2004
- 7) 杉山央ほか:セメントの水和反応・組織形成モデル を用いたコンクリート部材の初期温度上昇予測,日 本建築学会構造系論文集,第73巻,第623号,pp.9-17,2008
- 8) H. Sugiyama: Prediction of Physical Properties of Concrete Using Mathematical Model for Cement Hydration and Microstructure Formation, Proceedings of International RILEM Symposium on Concrete Modelling CONMOD'08, pp.353-360, 2008
- 9) 杉山央: セメントの水和反応・組織形成モデルを用いたプレキャストコンクリート部材の温度上昇予測, 日本建築学会構造系論文集, 第80巻, 第714号, pp.1215-1225, 2015