

論文 粗視化セメント粒子動力学法によるセメントペーストの粘度計算に関する基礎的研究

山田 義智*1・麻生 裕梨恵*2

要旨: 本研究は、セメントペーストの粘度をコンピュータシミュレーションで求める手法を提案する。提案手法は、セメント粒子、水、水和生成物、空気泡の力学的相互作用を単純な保存力と散逸力で表し、セメント粒子群の運動をシミュレーションすることでセメントペーストの粘度を求めるものである。この提案手法を粗視化セメント粒子動力学法と称する。本研究では、粗視化セメント粒子動力学法の粘度計算に用いる諸量の検討を行うほか、セメントペーストの粘度計算結果が実験結果を表せることを確認した。さらに、粗視化セメント粒子動力学法で凝集に起因するチクソトロピー挙動も表現できることも示した。

キーワード: セメントペースト, 粗視化, 粘度, チクソトロピー, シミュレーション

1. はじめに

セメントペーストの流動特性は、セメント粒子の形状や体積分率、さらにセメント粒子の凝集状態や水和などに影響され、調(配)合や経過時間により様々に変化する。

この複雑なセメントペーストの流動特性を記述することを目的として種々の構成式が提案されている¹⁾が、粒子凝集に依存するチクソトロピー性や水和による粘度増加などを十分に考慮しているとは言い難い。

チクソトロピー性や水和の影響を構成式に反映しにくい理由として、セメント粒子の凝集状態の流動場での変化や水和生成物による粒子同士の結合状態の変化など、様々な要因が複雑に連成して生じる流動特性を数式で記述しにくいことが大きな理由であると思われる。

そこで、本研究はセメントペーストの粘度をコンピュータシミュレーションで求めることを目的として、ペースト内の種々の物質間の力学的相互関係をより単純なモデルで表し、水和の影響や凝集状態の影響も取り込める粗視化セメント粒子動力学法 (Coarse-graining Cement Particle Dynamics Method: 以後、CCPD 法と称す) を提案し、その特性および有効性を検討する。

2.CCPD 法について

2.1 CCPD 法の概要と粗視化セメント粒子

セメントペーストを構成する物質は、約 $1\mu\text{m}$ ~ $50\mu\text{m}$ 程度の大きさの異なる多数の非球形セメント粒子と水および空気泡である (図-1 参照)。セメント粒子は水中において凝集し、その状態は自身の運動および高性能 AE 減水剤の添加によって異なる。また、セメント粒子は水と反応して水和生成物を生じ、その量と状態は経過時間とともに変化する。

この様に、セメントペーストは複数の異なる物質から

なり、水和および凝集による内部構造も複雑であることから、マクロな連続体スケールでセメントペーストの粘度を求めるためには、よりミクロな視点からのアプローチが重要である。しかし、多数のセメント粒子や凝集・水和による力学的相互作用を一つ一つ満足するような構成式の確立や、コンピュータシミュレーションを行うことは困難である。

そこで、提案する CCPD 法においては、セメント粒子、水、水和生成物、空気泡の力学的相互作用を単純な保存力と散逸力で表し、複数のセメント粒子を一つにまとめた粗視化セメント粒子の運動をシミュレーションすることでセメントペーストの粘度を求める (図-1 参照)。

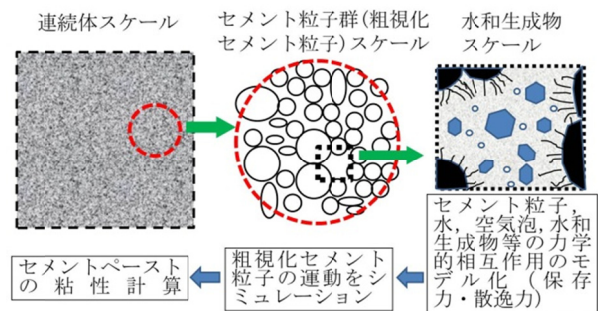


図-1 粗視化セメント粒子と CCPD 法の計算の流れ

2.2 粗視化セメント粒子の設定と配置

セメントペーストを粗視化するに当たり、セメントの体積分率 ϕ の無限大セメントペースト空間より、任意大きさの直径を持つ球を取り出す (図-2 参照)。この球の直径をカットオフ距離 r_c と称し、球が互いに重なりと粒子間で相互に力をやり取りするものとする。この球中に含まれる複数個のセメント粒子を一つの粗視化セメント粒子に纏めると、その直径 r_d は次式で表される。

*1 琉球大学 工学部環境建設工学科教授 博士(工学) (正会員)

*2 琉球大学大学院 理工学研究科環境建設工学専攻 (正会員)

$$r_d = r_c \times \sqrt[3]{\theta} \quad (1)$$

CCPD 法では、粗視化セメント粒子を図-2のように最密充填格子の一つである面心立方格子の粒子位置に配置する。ここで、面心立方格子の一边の長さ ℓ は次式で表される。

$$\ell = r_c \times \sqrt[3]{2\pi/3} \quad (2)$$

CCPD 法の解析領域は面心立方格子を各軸方向に n 倍する。したがって、解析領域の一边は $L(=n\ell)$ となる。一つの面心立方格子には4個の粒子が配置されており、解析領域中の全粒子数は $N(=4n^3)$ となる。なお、粗視化セメント粒子の質量 m は、解析領域に相当するセメントペーストの全質量を全粒子数 N で除した値である。

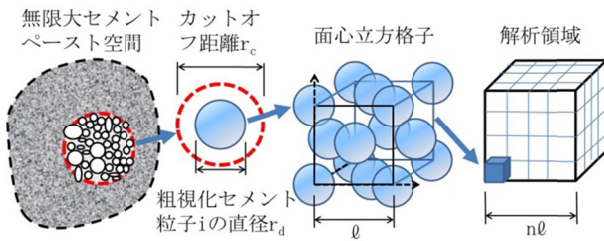


図-2 粗視化セメント粒子の配置と解析領域

2.3 CCPD 法の基礎式

提案する CCPD 法は、多数の粒子群が力をやり取りしながら運動する様子を、コンピュータを用いてシミュレーションする。ここでは、粒子の運動を Newton 運動方程式で規定している。同様なシミュレーション方法として散逸粒子動力学^{2),3)} (Dissipative Particle Dynamics:以後 DPD 法と称す) が知られており、CCPD 法は DPD 法の計算方法を参考としている。以下にその概要を示す。

CCPD 法において、任意の粒子 i の運動方程式は Newton 運動方程式として以下のように示される。

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = m_i \frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{f}_i \quad (3)$$

ここで、 \mathbf{p}_i は粒子 i の運動量である。 m_i は粒子 i の質量であり、 \mathbf{v}_i は粒子 i の速度ベクトル、 \mathbf{r}_i は粒子 i の位置ベクトル、 t は時間である。なお、ベクトルは太文字で記した。また、右辺の粒子 i に作用する力 \mathbf{f}_i は次式で与える。

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^C + \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^D \quad (4)$$

ここで、力 \mathbf{f}_i は他粒子 j から作用するものとして、粒子間が接近することで生じる保存力 \mathbf{F}_{ij}^C 、粒子間の運動量交換である散逸力 \mathbf{F}_{ij}^D を考える。DPD 法においては、熱揺動に起因するランダム力 \mathbf{F}_{ij}^R を考慮するが、CCPD 法ではセメント粒子が平均 $10\mu\text{m}$ と大きいこと、その粒子を多数まとめて一つの大きな粒子として考えることより、ランダム力 \mathbf{F}_{ij}^R を省略する。

保存力 \mathbf{F}_{ij}^C は、粒子 i, j 間に作用する力なので粒子間の相対位置ベクトル \mathbf{r}_{ij} に依存する。また、座標系によらない定式化を行うためには、散逸力 \mathbf{F}_{ij}^D は2粒子間の相対位置ベクトル \mathbf{r}_{ij} および相対速度ベクトル \mathbf{v}_{ij} の組み合わせで定式化される必要がある。さらに粒子間距離による影響を重み関数 $\omega(r_{ij})$ で考慮すると、保存力 \mathbf{F}_{ij}^C および散逸力 \mathbf{F}_{ij}^D は以下の式で各々表せる。なお、 $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$ である。

$$\mathbf{F}_{ij}^C = a_{ij}\omega(r_{ij})\mathbf{n}_{ij} \quad (5)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -b_{ij}\omega(r_{ij})(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{n}_{ij} \quad (6)$$

ここで、 a_{ij} は反発係数、 b_{ij} は散逸係数である。これらの係数は、水和程度やセメント粒子体積分率および粒径分布などに影響されると考えられる。 \mathbf{n}_{ij} は相対位置ベクトル \mathbf{r}_{ij} の単位ベクトルである。また、重み関数 $\omega(r_{ij})$ は力の影響の及ぶ範囲を相対位置ベクトル \mathbf{r}_{ij} とカットオフ距離 r_c および凝集係数 c で規定し、次式で表す。なお、凝集係数 c については、以後断りがない限り $c=1.0$ とし、それ以外の値を用いるケースを4.3節で示す。

$$\omega(r_{ij}) = \begin{cases} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right)^c, & |r_{ij}| < r_c \\ 0, & |r_{ij}| \geq r_c \end{cases} \quad (7)$$

式(4)を Newton 運動方程式(式(3))に代入すると次式が得られる。

$$d\mathbf{r}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} dt \quad (8)$$

$$d\mathbf{p}_i = \left(\sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^C \right) dt + \left(\sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij}^D \right) dt \quad (9)$$

CCPD法では、上式を時間に関して以下のように離散化して、初期値より時間発展的に計算を行い、粒子 i の位置 $\mathbf{r}_i(t + \Delta t)$ と粒子速度 $\mathbf{v}_i(t + \Delta t)$ を決定する。

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i(t)\Delta t \quad (10)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \sum_{j \neq i} \frac{a_{ij}}{m_i} \omega(r_{ij})\mathbf{n}_{ij}\Delta t - \sum_{j \neq i} \frac{b_{ij}}{m_i} \omega(r_{ij})(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{n}_{ij}\Delta t \quad (11)$$

本研究では、粒子の質量 m_i は一定値 m とし、粒子間に働く反発係数や散逸係数も各々 a および b の一定値とする。したがって、上式(11)は次式で表せる。

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{a}{m} \sum_{j \neq i} \omega(r_{ij})\mathbf{n}_{ij}\Delta t - \frac{b}{m} \sum_{j \neq i} \omega(r_{ij})(\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{n}_{ij}\Delta t \quad (12)$$

2.4 粘度の計算方法

x 方向に垂直な断面を通じて x 方向へ輸送される y 方向の運動量の単位時間・単位面積当たりの輸送速度が、せん断応力 τ_{xy} に等しい⁴⁾。したがってせん断応力 τ_{xy} は次式で表される。

$$\tau_{xy} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_i m_i v_{iy} \frac{x_i}{V} \right) = \frac{1}{V} \sum_i (m_i v_{ix} v_{iy} + F_{iy} x_i) \quad (13)$$

ここで、 v_{iy} 、 v_{ix} は粒子*i*の*y*方向と*x*方向の速度、 x_i は粒子*i*の位置座標の*x*成分である。 V は解析領域の体積であり、 F_{iy} は粒子*i*の*y*方向の作用力である。

CCPD法では、粘度を求めるために単純せん断速度場を解析領域内の粒子に与える。この速度勾配 $\dot{\gamma}$ とせん断応力 τ_{xy} より、粘度 η は次式で計算される。

$$\eta = \frac{\tau_{xy}}{\dot{\gamma}} \quad (14)$$

2.5 無次元化³⁾

コンピュータによるシミュレーションの取り扱いのため、諸量の無次元化を行う。ここでは、代表値として、距離は r_c 、速度は $(kT/m)^{1/2}$ 、時間は $r_c(m/kT)^{1/2}$ を用いた。ここで、 k はケルビン係数であり、 T は絶対温度である。このような代表値を用いて式(10)、(11)を無次元化すると次式となる。なお、上付き添え字*を付した量が無次元化された量である。

$$\Delta r_i^* = v_i^* \Delta t^* \quad (15)$$

$$\Delta v_i^* = a^* \sum_{j \neq i} \omega(r_{ij}^*) \mathbf{n}_{ij} \Delta t^* - b^* \sum_{j \neq i} \omega(r_{ij}^*) (\mathbf{n}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}^*) \mathbf{n}_{ij} \Delta t^* \quad (16)$$

反発係数と散逸係数の無次元化量は各々次式で表せる。

$$a^* = a(r_c/kT) \quad (17)$$

$$b^* = b(r_c/\sqrt{mkT}) \quad (18)$$

また、重み関数の無次元化は次のようになる。

$$\omega(r_{ij}^*) = \begin{cases} 1 - r_{ij}^*, & r_{ij}^* < 1 \\ 0, & r_{ij}^* \geq 1 \end{cases} \quad (19)$$

3. CCPD法の粘度計算に用いる諸量の検討

CCPD法に用いる諸量が粘度計算に与える影響を把握することを目的として、(1)無次元化反発係数の粘度計算に及ぼす影響、(2)無次元化散逸係数と体積分率の関係、(3)カットオフ距離の影響、(4)粗視化セメント粒子数の粘度計算に及ぼす影響について、各々検討を行う。

3.1 無次元化反発係数の粘度計算に及ぼす影響

図-3に無次元化反発係数の値を無次元化散逸係数の 10^{-6} 倍から 10^6 倍までの範囲で変化させ、無次元化粘度の値がどのように変化するか示した。ここで、無次元化散逸係数値には、次節で粘度を計算する際に用いた値を与えている。また、カットオフ距離は $400\mu\text{m}$ 、粗視化セメント粒子数は500個とし、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ は $100/\text{s}$ で300秒与えている。

無次元化反発係数による影響は、無次元化散逸係数の 10^{-6} 倍から 10^4 倍までの範囲では非常に小さく、図-3

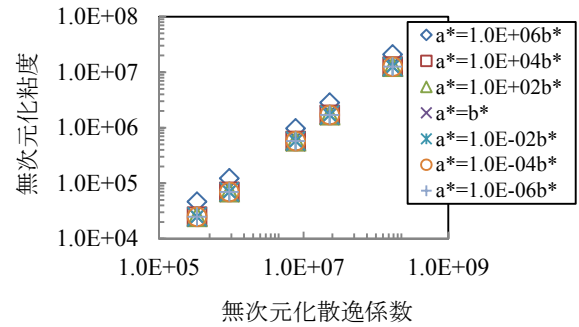


図-3 無次元化反発係数の無次元化粘度への影響

した。図-3では、無次元化反発係数が無次元化散逸係数の 10^6 倍と非常に大きな値になると有意な差が認められた(図中の◇印)。以上のことより、無次元化反発係数は、無次元化散逸係数が粘度に与える影響に比べると感度が低いと言える。そこで、本研究で行う以降の解析の範囲では、入力変数の削減のため無次元化散逸係数と無次元化反発係数は等しいものと仮定して用いた。

3.2 無次元化散逸係数と体積分率の関係

同一球形で完全分散した粒子を有するサスペンションの粘度を表す式として、アインシュタイン式を拡張したRoscoe式が知られている。この式を次に示す。

$$\eta = \eta_0 \left(1 - \frac{\phi}{\phi_m}\right)^{-2.5} \quad (20)$$

ここで、 η はサスペンション粘度、 η_0 は分散媒粘度、 ϕ は分散質の体積分率、 ϕ_m は最密充填時の分散質の体積分率(=0.74)である。

図-4に分散質の体積分率とサスペンション粘度の関係を示す。分散媒粘度は水を想定して $0.001\text{Pa}\cdot\text{s}$ とした。図中の実線はRoscoe式による結果である。また、図中の丸印はRoscoe式の値と同じとなるように無次元化散逸係数をチューニングした後のCCPD法の計算結果である。図に示すようにCCPD法はRoscoe式による粘度を精度よく表すことが可能であることがわかる。

ここでは、カットオフ距離は $400\mu\text{m}$ 、粗視化セメント粒子数は500個とした。また、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ は $100/\text{s}$ を300秒間連続で与えた。

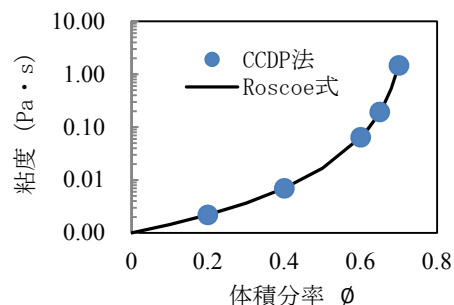


図-4 Roscoe式によるCCPD法のチューニング

チューニング後の無次元化散逸係数と無次元化粘度の関係を図-5に示す。図より、無次元化散逸係数と無次元化粘度の間には図中に示す線形近似関係が存在する。

この線形近似関係と式(20)および粘度の無次元化を考慮すれば、分散質の体積分率と無次元化散逸係数の間には次の近似式が成り立つ。

$$b^* = \frac{\eta r_c^2}{0.0743\sqrt{mkT}} = \frac{\eta_0 r_c^2}{0.0743\sqrt{mkT}} \left(1 - \frac{\phi}{0.74}\right)^{-2.5} \quad (21)$$

式(21)は、CCPD法で粘度計算に用いる無次元化散逸係数と分散質の体積分率に関する基本式である。CCPD法では、この式を利用して非球形粒子で水和や凝集があるセメントペーストの粘度を計算する。その詳細については、次章で示す。

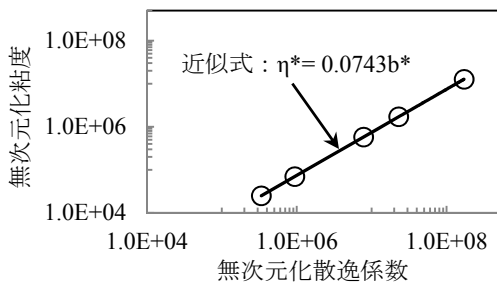


図-5 無次元化散逸係数と無次元化粘度の関係

3.3 カットオフ距離の影響

図-6にカットオフ距離を100μmから800μmまで変化したときの、無次元化散逸係数と無次元化粘度の関係を示す。ここでは、無次元化散逸係数の値を前節と同様に与え、粗視化セメント粒子数は500個とした。また、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ は100/sを300秒与えた。

図-6に示すように、無次元化散逸係数と無次元化粘度の間には図-5と同じ比例関係があり、その比例係数はカットオフ距離にかかわらず一定である。したがって、カットオフ距離にかかわらず式(21)は成り立つ。この結果は、距離の無次元化をカットオフ距離で行っているため(2.5節参照)、理論上成り立つことである。したがって、図-6の結果は、計算結果の検証にもなっている。

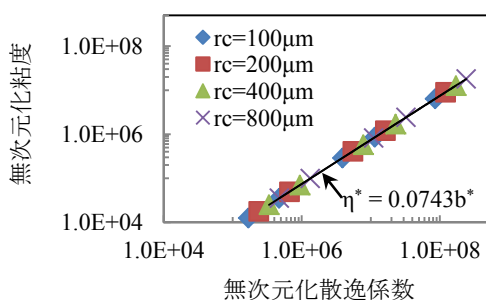


図-6 カットオフ距離の無次元化粘度への影響

3.4 粗視化セメント粒子数の粘度計算に及ぼす影響

粗視化セメント粒子数を256個、500個、1372個に変化させて、粘度計算値に与える影響を検討した。ここでは、無次元化反発係数と無次元化散逸係数は等しいものとし、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ は100/sを300秒与えた。

図-7には、式(21)で体積分率 ϕ から無次元化散逸係数を求め、上記の各粗視化セメント粒子数を用いてCCPD法で粘度を求めた結果を示す。図中の実線はRoscoe式による結果である。粗視化セメント粒子数を変化させてもCCPD法で得られる粘度計算結果はほぼ同じで、Roscoe式による結果とも一致する。従って、粗視化セメント粒子数の粘度計算に及ぼす影響は小さい。

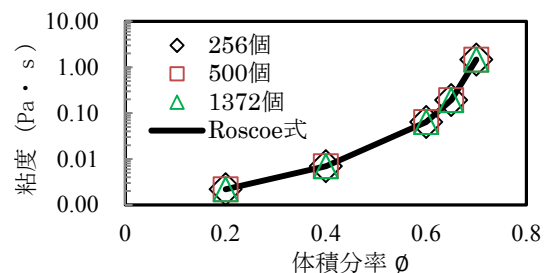


図-7 粗視化セメント粒子数の粘度計算に及ぼす影響

4. セメントペーストの粘度シミュレーション

4.1 水和の無い分散セメントペーストの粘度計算

セメントの水和を阻害する為に、溶媒にエタノール(密度0.785g/cm³、粘度0.0012Pa·s)を用いた。セメントペーストはエタノールとセメントを重量比50%で混合(体積分率0.33)して作成した。粘度は回転粘度計にて測定した。粘度の測定は、複数のせん断ひずみ速度のもと応力緩和法⁵⁾にて定常状態と見なせる300秒後に行った。

図-8に各せん断ひずみ速度における粘度の実測値を黒丸印にて示す。図より、せん断ひずみ速度60/s以下の低い領域では粘度が低下する挙動を示し、せん断速度が80/sを超えると粘度が上昇する挙動を示している。

この原因は、分散系における粒子の配置位置がせん断速度により影響を受けるためと考えられる。すなわち、粒子は当初ランダム配置であるが、せん断ひずみ速度の上昇とともに規則的に並び、粘度が下がるが、さらなるせん断ひずみ速度の上昇があると粒子配置が乱れて再びランダム配置となり、粘度が上がると考えられる。

大坪は、体積分率が低いときには粘度低下のみが現れ、体積分率が0.45以上の場合に粘度低下と粘度上昇が現れるとしている⁶⁾。今回のセメントペーストの実験結果では、使用したセメント粒子が非球形で広い粒度分布を有していることより、体積分率は0.33ではあるが、粘度低下と粘度上昇が現れたものと推察される。

図-8にはRoscoe式にて計算した粘度を実線で示す。

実測結果は何れのせん断ひずみ速度においても Roscoe 式よりも粘度が大きい。これは、セメント粒子が非球形であるためと考えられる。そこで、式(20)の指数値(-2.5)を小さくすることで粘度を大きく見積もるようにした。なお、分散系においては高せん断ひずみ速度域における粘度が採用される⁹⁾ことから、本研究では、式(20)の指数値を-5.0 として、高せん断ひずみ速度域の粘度に近い値とした。ここで、式(20)の指数値を-5.0 とする場合を修正 Roscoe 式と称し、図中に破線で示す。

Roscoe 式より導いた式(21)においても、指数値を-5.0 として無次元化散逸係数を求め、この値を CCPD 法に入力して粘度計算を行った。その結果を図中に白丸印で示す。CCPD 法による結果は修正 Roscoe 式と良く一致している。ただし、CCPD 法では粒子の配置位置変化をモデル化して取り込んでいないので、せん断ひずみ速度の変化に関わらず粘度は一定である。

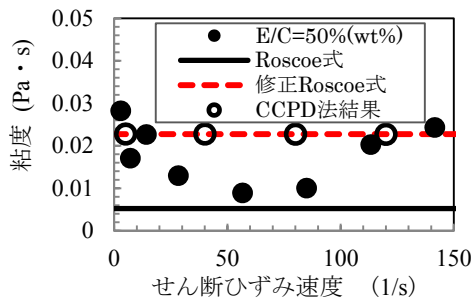


図-8 水和の無い分散セメントペーストの粘度

4.2 水和のある分散セメントペーストの粘度計算

ここでは、水和が生じ、かつ、セメント粒子が分散している状況を再現する為に、ポリカルボン酸エーテル系の高性能 AE 減水剤を添加(C×0.9%)したセメントペースト (W/C=50%, 体積分率 0.39) を使用した。なお、前述した 4.1 節の試料と体積分率は異なるが、この差は修正 Roscoe 式により考慮される。水和の状態は、注水より 30 分経過後の誘導期の状態である。

図-9 にはせん断ひずみ速度毎に上記ペーストのメディアン粒径の変化を示す。ここで、メディアン径は、レーザー回折装置にて測定を行った。分析試料の採取法および測定法は、文献 7) と同じである。図中には溶媒にエタノールを用いて分散させたセメントのメディアン粒径を破線で示す。この図より、高性能 AE 減水剤を添加しただけでは完全分散出来ず、せん断ひずみ速度を付加することによって完全分散状態に近づくことが推察される。

図-10 には、高性能 AE 減水剤を添加(C×0.9%)したセメントペースト (W/C=50%) のせん断ひずみ速度毎の粘度を示す。粘度の測定は、応力緩和法にて定常状態と見なせる 300 秒後に行った。

図より、粘度がせん断ひずみ速度の増加とともに若干低下する傾向が見られ、弱いチクソトロピー挙動が確認される。このチクソトロピー挙動は、せん断ひずみ速度の増加によって一部に残っていた凝集構造が破壊されることにより生じるものと考えられる。

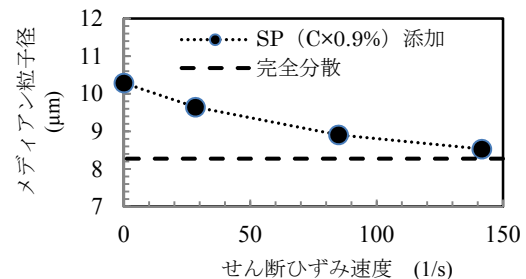


図-9 せん断ひずみ速度による粒子径の変化

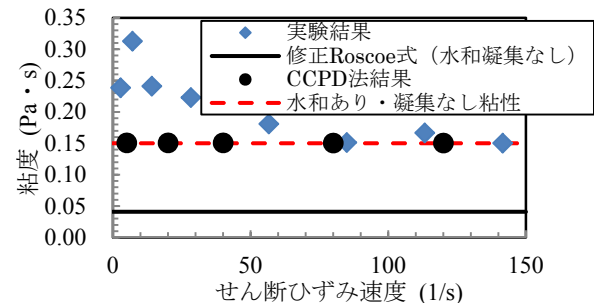


図-10 水和のある分散セメントペーストの粘度

図-10 に実線にて水和のないセメントペーストの粘度を示す。この値は、前節の修正 Roscoe 式の値である。但し、溶媒がエタノールから水に変わり、溶媒粘度と体積分率が変化していることに注意を要す。図より、水和の影響のないセメントペーストの粘度は、水和の影響のあるセメントペーストに比べて明らかに小さい。

図-9 に示すメディアン粒径の変化や、図-10 においてせん断ひずみ速度が 85/s 以降で粘度が一定になる傾向から、本研究では、せん断ひずみ速度 142/s 時の粘度を水和があり凝集が無い場合の粘度であると判断し図中に破線で示す。この粘度 (図中の破線) と修正 Roscoe 式の値で水和と凝集が無い時の粘度 (図中の実線) の差が水和による粘度増加であると考えた。

水和による粘度増加を表す係数として、図中の破線粘度を実線粘度で除して得られる値を用いた。ここでは、この係数を水和粘度増加係数 h と称する。注水 30 分後の水和による水和粘度増加係数 h は、 $h=3.68$ であった。

CCPD 法は式(21)で得られる無次元化散逸係数を h 倍することで水和の影響を取り込める。図-10 に黒丸印で CCPD 法による粘度計算結果を示す。この計算結果より、CCPD 法は水和の影響を表せることがわかる。

4.3 チクソトロピー性の表現

CCPD 法ではチクソトロピー性の再現を凝集係数 c で

行う。凝集係数 c は、式(7)に示す重み関数 $\omega(r_{ij})$ を変化させるもので、その概要を図-11に示す。凝集係数 c は、凝集による粒子同士の連結により保存力と散逸力のおよぶ範囲が拡大することをモデル化したものであり、凝集係数 c 値が小さくなるとカットオフ距離 r_c 以下の粒子間距離での重みが次第に大きくなり、 $c=0.0$ ではカットオフ距離 r_c 以下で重み関数は最大値 ($\omega(r_{ij}) = 1.0$) 一定となる。ここで、 $c=0.0$ の状態はカットオフ距離内で粒子が完全に連結し合っただけの状態を想定し、 $c=1.0$ の状態は完全分散状態を想定している。

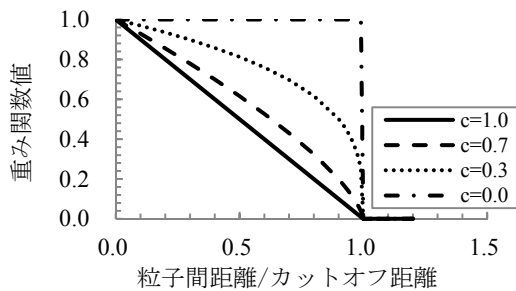


図-11 凝集係数と重み関数値の関係

図-12に凝集係数 c を変化させて CCPD 法にてチクソトロピー性を再現した結果を示す。図中の実験値は前節の結果である。ここでは実験近似値に相当するように凝集係数 c の値をチューニングしている。図より CCPD 法はチクソトロピー挙動を再現できることが分かる。

チクソトロピー挙動再現のためにチューニングした凝集係数 c とせん断ひずみ速度の関係を図-13に示す。この図より、低せん断ひずみ速度($=5/s$)時において、 c 値は 0.76 と弱い凝集状態にあるが、せん断ひずみ速度の上昇とともに、分散状態 ($c=1.0$) に近づくことが分かる。

5. まとめ

本研究では、セメントペーストの粘度をコンピュータシミュレーションで求めることを目的として、粗視化セメント粒子動力学法(CCPD 法)を提案し、その検証を行った。得られた知見を以下にまとめる。

- 1) 無次元化反発係数が粘度に与える影響は小さい。
- 2) CCPD 法は Roscoe 式の粘度を精度よく表せる。
- 3) 無次元化散逸係数と無次元化粘度の間には比例関係があり、その比例係数はカットオフ距離に係らずほぼ一定である。
- 4) 粗視化セメント粒子数を 256~1372 個の間で変化させても、粘度計算結果はほぼ同じである。
- 5) CCPD 法は、粒子形状による影響や水和の影響、チクソトロピー挙動を表すことができる。

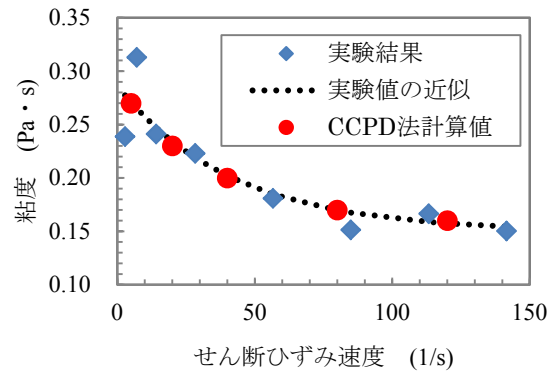


図-12 CCPD 法によるチクソトロピー性の再現

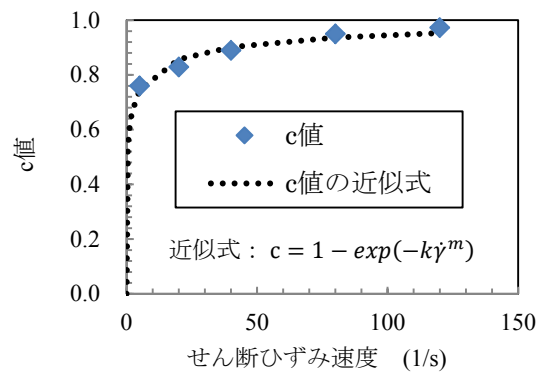


図-13 せん断ひずみ速度と c 値の関係

参考文献

- 1) 社)セメント協会：流動性研究委員会報告書，pp.55-69,2003.9
- 2) P.Hoogerbrugge and J.Koelman：Simulationg micro-Scopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics, Europhysics Letters, 19, pp. 155-160,1992
- 3) 佐藤明，間島保：散逸粒子動力学法における輸送係数の理論値とシミュレーション値との比較検討(第1報，散逸粒子の運動方程式と輸送係数の理論解との関係)，日本機械学会論文集(B編)，Vol.70, No.694, pp.87-94,2004.6
- 4) 日本機械学会編：原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション，コロナ社，1996
- 5) 東條良太，山田義智：セメントペーストの流動構成式に関する研究，コンクリート工学年次論文報告集，Vol.32, No.1, pp.1181-1186,2010.6
- 6) 大坪泰文：微粒子・ナノ粒子分散系におけるレオロジー，情報機構，2009.12
- 7) 麻生裕梨恵，山田義智：流動下におけるペースト中セメント粒子の凝集状態変化の観察・測定，日本建築学会大会学術講演梗概集(北陸)，pp.587-589,2010.9