

# 論文 CA法を用いた多孔質体中の毛管浸透モデル

渡嘉敷 勝<sup>\*1</sup>・森 充広<sup>\*2</sup>・増川 晋<sup>\*3</sup>

**要旨** : Cellular Automata(CA)法を用いた 2 次元毛管浸透モデルを構築した。本モデルは対象領域をセルに分割し, セル間の水分移動を局所近傍則によりシミュレーションする。局所近傍則には, 毛管作用による気液界面の圧力低下を駆動力とした浸透を採用した。セメントペースト供試体の細孔径分布実測値をモデルに入力した場合には, 細孔の空隙率が低いために難浸透の傾向を示した。さらに, 対象領域に設定した擬似クラックおよび擬似遷移帯の毛管径の値によって浸透挙動が異なることが確認された。

**キーワード** : Cellular Automata, 多孔質, 毛管, 浸透, 細孔構造, 細孔径分布

## 1. はじめに

コンクリート中の水分移動現象に関する研究は, コンクリートの劣化予測や耐久性性能照査の観点から注目され, これまで多くの研究がなされてきた。しかし, 未だ十分な解明はなされていないのが現状である。特に毛管浸透現象についての研究例<sup>1),2),3),4)</sup>は数少ない。近年問題となっている塩害などの劣化現象には, 水分移動が大きく影響していると考えられる。そして, その多くはコンクリート表面の水が毛管浸透によって, コンクリート内部へ移動する現象であり, 浸透に際して大気圧以上の外圧が加わることは希であると考えられる。したがって, コンクリート中の毛管浸透現象を解明することは, 重要な課題である。

本研究では, 対象領域の複雑な細孔構造を考慮可能な CA 法を用いて液状水移動を対象に毛管作用により生じる気液界面の圧力低下を駆動力としたモデルを構築し, 毛管浸透過程の理解を深めること, そして, 細孔径分布およびクラックや遷移帯が浸透挙動に与える影響を検討し, モデルの適用性について評価することを目的とした。CA 法を用いたモデルとして NIST(National Institute of Standards and Technology)によるコン

クリート水和モデル<sup>5)</sup>があるが, 化学種の拡散に重点が置かれていること, そのため, ランダムウォークが用いられていること, などが本研究で提案するモデルとは異なる。

## 2. CA モデル

### 2.1 Cellular Automata の特徴

CA 法は, 簡単なセル間の局所的相互作用から複雑な現象を再現できる計算手法である<sup>6)</sup>。そのため, 従来の手法では困難であった多孔質内部のミクロな流れをシミュレーションすることも可能である。

### 2.2 モデル設定の手順

#### (1) 対象領域の離散化

対象領域を図-1に示すように 2 次元正方形セルで分割し, そのセル群を予め設定された空隙率に基づき計算された数で固相と空隙相に分ける。そして, 固相セルと空隙相セルを乱数

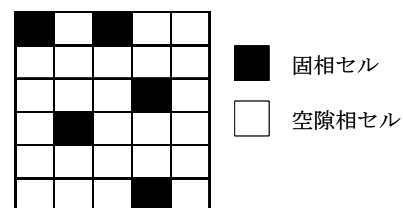


図-1 正方形による対象領域の離散化

\*1 (独) 農業工学研究所 造構部施設機能研究室 主任研究官 (正会員)

\*2 (独) 農業工学研究所 造構部施設機能研究室 主任研究官 農博

\*3 (独) 農業工学研究所 造構部施設機能研究室 室長 工博

を基に対象領域内に配置する。固相セルは不透水領域とし、空隙相セルは水が浸透可能で、飽和あるいは未飽和の2状態を遷移する。

### (2) セル情報と近傍セル

各空隙相セルは、内部情報として管径と接触角を有する。図-2に示すように管厚が0の擬似的な毛管（管径  $d_a$ ,  $d_b$ ）が長さ  $l$  のセル内部に連結されているイメージとする。このため、異なる管径を有するセル間でも保有できる水量は同じとなり、質量保存則が満たされる。なお、本モデルにおいては、セルの方向性については検討対象外とした。また、飽和した空隙相セルは、そのセル自身の近傍未飽和セルに、後述する局所近傍則に従い浸透する。図-3に2次元CA法で用いられるノイマン型とムーア型の2種の近傍セルを示す。ノイマン型が4方向、ムーア型は8方向に近傍セルを有する。本研究では、主としてムーア型近傍を用いた。

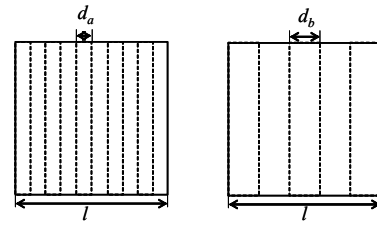
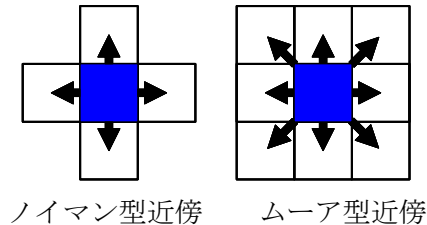


図-2 セルの毛管イメージ



ノイマン型近傍      ムーア型近傍

図-3 近傍セル

### (3) 浸透駆動力

本モデルでは、毛管作用により生じる気液界面（メニスカス）の圧力低下（負圧）を駆動力とした。圧力低下量は次のLaplace式により求まる。

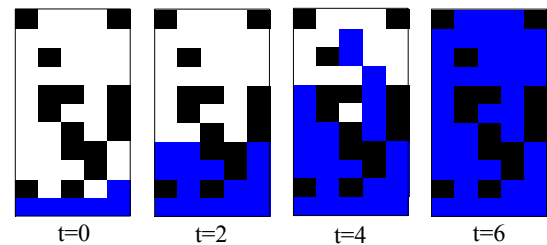
$$\Delta P = \frac{2\gamma \cos \theta}{r} \quad (1)$$

ここに、 $\Delta P$  : 圧力低下量、 $\gamma$  : 水の表面張力、 $\theta$  : 接触角、 $r$  : 毛管半径である。

### (4) 局所近傍則

セル間の浸透に関する局所近傍則を次のように設定した。

- a) 飽和セルは、近傍の未飽和セルを探し、その圧力低下量を式(1)により求める。
- b) 領域全体の近傍未飽和セルを調べたリストのうち、最も圧力低下量の大きなセルに浸透し、飽和させる。
- c) 浸透したばかりの飽和セルの近傍未飽和セルの圧力低下量を求め、先のリストに加え、最大の圧力低下量のセルに浸透する。
- d) 上記 b)~c)を所定の回数繰り返して、1単位時間ステップとする。



黒色：固相セル，白色：未飽和セル，青色：飽和セル

図-4 ムーア型近傍による浸透過程

この局所近傍則では、接触角を一定とした場合には、管径の最も小さなセルに浸透が進むこととなる。また、d)の1時間ステップ当たりの繰り返し回数は、対象領域の底面セル数  $L$  と同じとした。

上記の局所近傍則による浸透過程のイメージを図-4に示す。

局所近傍則 c) を設定した理由は、毛管内の速度の相違を定性的にはあるが、モデルに組み込むためである。毛管内を水が上昇する速度は次のWashburn式で表される。

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{4\eta h} \frac{2\gamma \cos \theta_A}{r} \quad (2)$$

ここに、 $h$  : 毛管上昇距離、 $t$  : 時間、 $\eta$  : 水の粘度、 $\theta_A$  : 前進接触角である。局所近傍則 c) の組み込みにより、管径の小さなセルが連続するところでは、これらセルの浸透が選択的に実施される。

### 3. モデルの浸透挙動

#### 3.1 空隙率と浸透率の関係

本モデルにおける一般的な浸透挙動を把握するために、モデルの空隙相セルの管径として [0,1] の乱数を与え、空隙率を 0.1~0.9 まで 0.1 刻みで変化させた場合の浸透挙動を確認した。セル数  $L=100$  とし、セル総数は  $L^2=10,000$  とした。そして、浸透可能な未飽和セルが無いことを計算終了条件とした。各空隙率において 50 回計算した浸透率の結果を図-5 に示す。ここで、浸透率とは空隙相セルのうち飽和されたセルの割合である。この図は、空隙率が 0.1~0.3 まではほとんど浸透せず、0.4 では浸透率のばらつきがかなり大きくなり、0.5 以上ではほぼ飽和状態となることを示している。空隙率 0.1~0.3 辺りまでは、空隙相セルの数が少なく、互いに連続していない状態にあることを示している。それに対して空隙率 0.5 以上では、ほぼ全ての空隙相セルが連続して存在している状態にあることがわかる。空隙率 0.4 においては、それらの中間で、セル間の連続性が生じたり、破れたりしていることが示されている。空隙率 0.4 における浸透終了状態の一例を図-6 に示す。(a)図は浸透前線の全ての飽和セルが固相セルに阻まれていた状態であり、(b)図は周りを固相に囲まれた浸透不能領域が発生していることを示している。このような細孔の不連続性が不飽和流を生じさせる要因の一つと考えられる。

なお、この空隙率 0.4 は、パーコレーション理論で扱う浸透閾値に相当すると考えられる。2次元正方格子のサイト過程（本モデルでノイマン型近傍を用いた場合であり、シミュレーション結果では 0.6）では 0.5927、3次元立方格子のサイト過程の場合では 0.3116 と約半分程度とされている<sup>7)</sup>。これは、3次元化により浸透方向の自由度が高くなることに起因する。ノイマン型を3次元に拡張すれば、6方向となり、ムーア型では18方向となる。これらの浸透閾値の相違は、2次元と3次元とによるシミュレーションでは、同じ空隙率を用いてもその浸透挙動が異なって

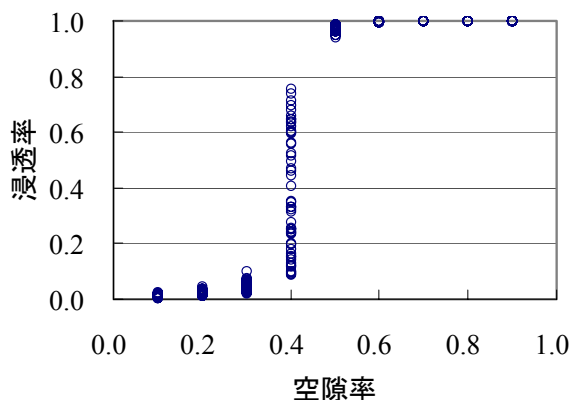
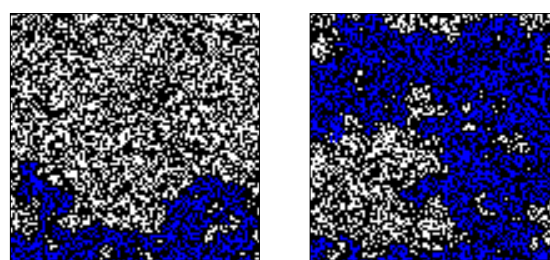


図-5 空隙率と浸透率の関係



黒色：固相セル，白色：未飽和セル，青色：飽和セル

(a)浸透前線部の障害 (b)浸透不能領域

図-6 セルの不連続性 (L=100)

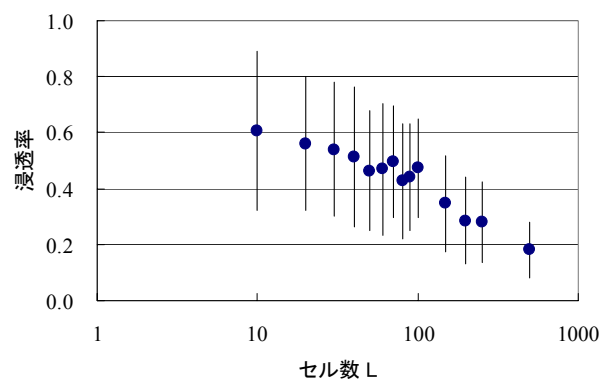


図-7 セル数と浸透率の関係

くることを示唆している。

ところで、この浸透閾値の存在は非常に興味ある結果をもたらすと考えられる。仮に同時に作製した同じ空隙率を有する供試体の空隙率が浸透閾値に近ければ、供試体ごとに浸透挙動が大きく変化することが予想される。そして、その挙動は、供試体のばらつきというよりも本来そのような挙動を示す空隙率自体に起因するのではないかということである。ここでは、その可能性を指摘するに留める。

### 3.2 セル数と浸透率の関係

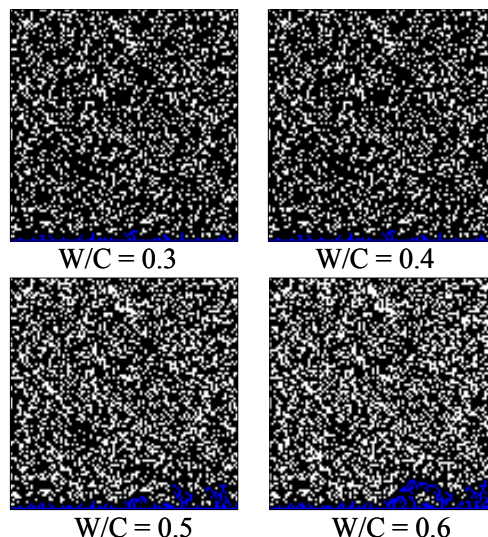
図-7に空隙率0.4の場合における、セル数Lを10~500まで変化させたときの浸透率の50回の計算結果を示す。図より、各セル数における平均浸透率がセル数の増加に伴い、一部逆転はあるものの、低下傾向にあることが読み取れる。また、浸透率のばらつきも小さくなる傾向にある。この傾向は、セル数の増加に伴い浸透閾値が大きくなることを示すものと考えられる。つまり、どのようなセル数を選択しようとも、基本的な空隙率と浸透率の関係は、図-5のパターンが示すように浸透率0から1まで変化するはずであり、図-7においてセル数の増加が浸透率の低下につながるのであれば、図-5の浸透閾値がセル数の増加に伴い右側にシフトすると考えられるからである。この現象については、今後検証を進める。

### 3.3 細孔径分布実測値を空隙率の入力とした場合の浸透挙動

W/C=0.3, 0.4, 0.5, 0.6の各セメントペーストの水銀圧入ポロシメータによる細孔容積の実測値から表-1の細孔径範囲別容積率を求め、モデルの空隙率として入力した。各細孔の容積率に従い、領域内のセルに細孔の代表値をランダムに割り当てた。そのシミュレーション結果(L=100)の一例が図-8である。各W/Cにおいてほとんど浸透することなく、浸透を終了した。これは、各セメントペーストの総細孔容積率が最大でも0.321であり、空隙率として小さかったことが原因であると考えられる。図-5の空隙率と浸透量の関係が示すようにムーア型近傍を用いた場合には、空隙率0.321程度の浸透率は大きくても0.1程度となっており、シミュレーション結果は妥当である。但し、この結果はあくまでも2次元で計算した場合の結果に過ぎない。3.1節で述べたように3次元空間では浸透閾値は低下することが示されている。単純な比較はできないが、3次元化により仮に浸透閾値0.4から0.2に下がるとすれば、表-1のW/C=0.4までは十分に浸透する状態となる。今後はモデ

表-1 セメントペーストの細孔容積率

細孔径範囲 (nm)	代表値 (nm)	細孔容積率			
		W/C	0.3	0.4	0.5
3.6-4	3.6	0.002	0.004	0.006	0.005
4-5	4	0.004	0.009	0.012	0.012
5-6	5	0.003	0.007	0.011	0.010
6-7	6	0.003	0.006	0.010	0.009
7-8	7	0.002	0.005	0.007	0.007
8-9	8	0.002	0.004	0.007	0.006
9-10	9	0.001	0.005	0.006	0.006
10-20	10	0.017	0.037	0.039	0.040
20-30	20	0.014	0.019	0.023	0.025
30-40	30	0.015	0.014	0.020	0.021
40-50	40	0.020	0.012	0.015	0.016
50-60	50	0.021	0.013	0.013	0.013
60-70	60	0.016	0.019	0.011	0.011
70-80	70	0.008	0.020	0.014	0.013
80-90	80	0.005	0.019	0.018	0.017
90-100	90	0.003	0.013	0.021	0.018
100-200	100	0.005	0.014	0.052	0.091
200-	200	0.001	0.006	0.008	0.006
	計	0.142	0.226	0.287	0.321



黒色：固相セル，白色：未飽和セル，青色：飽和セル

図-8 細孔容積率をモデルに入力した場合の浸透終了状態

ルの3次元化が課題である。また、細孔径分布実測値をモデル空間の中へ取り込む手法についても課題が残った。本研究では、細孔径実測値を基にレベル分けした細孔容積率を入力としたが、その際に、乱数によってそのセル位置を配置した。しかし、水銀圧入式ポロシメータから得られる情報は、連続性のある細孔が多くを占めていると考えられ、ランダムに配置することで細孔の連続性の情報が実供試体よりも失われている可能性もある。これについては新しい手

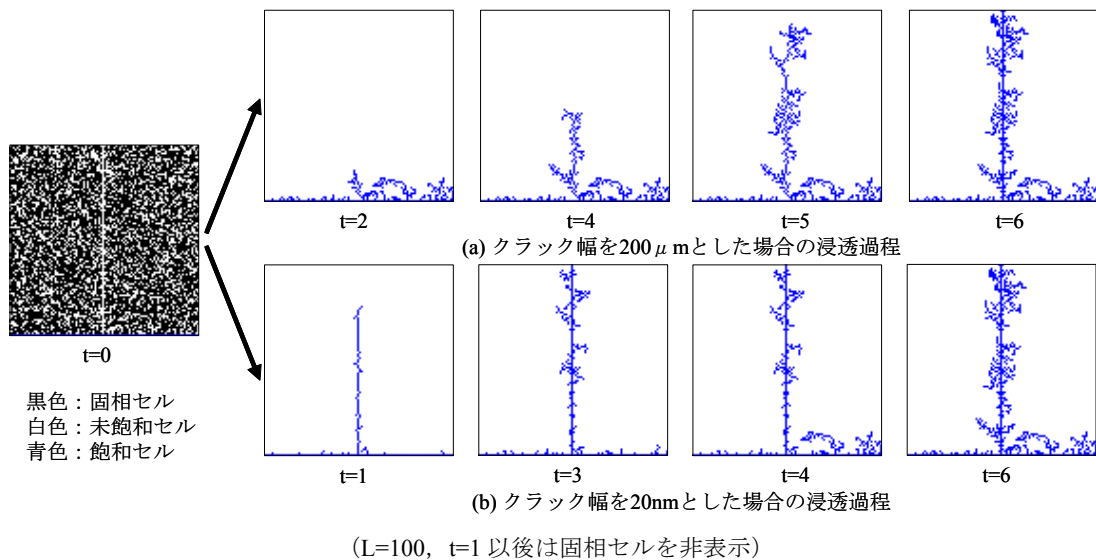


図-9 W/C=0.6 の領域の中央部に2種のクラック幅を想定した場合の浸透パターン

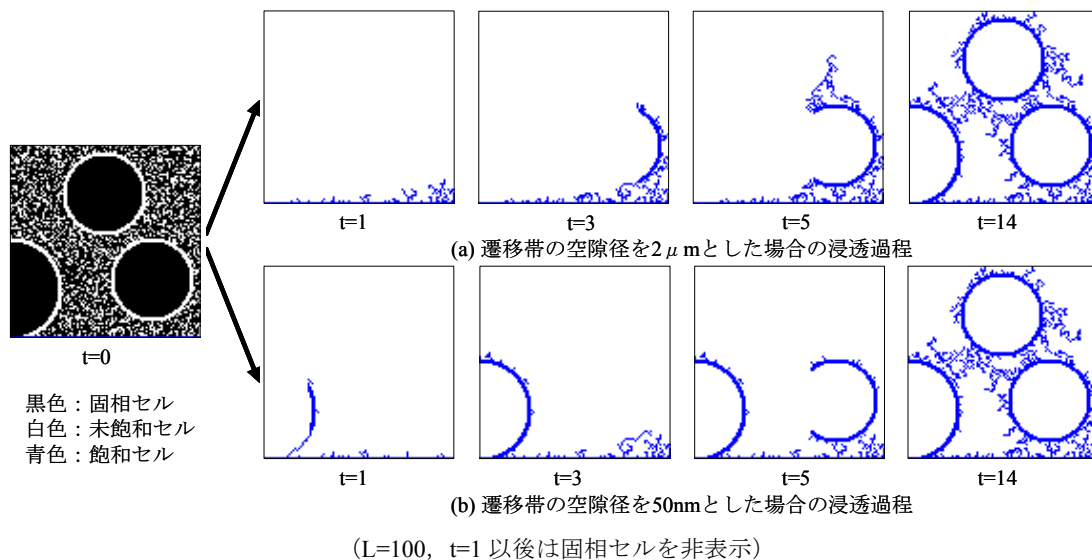


図-10 W/C=0.6 の領域内に3個の骨材と遷移帯2種を想定した場合の浸透パターン

法<sup>8)</sup>も提案されているので、今後検討したい。

### 3.4 クラックなどが浸透過程に及ぼす影響

#### (1) クラックモデル

W/C = 0.6 の細孔容積率を与えたモデルの中央部垂直方向に2種の幅を持つ擬似クラックを想定して計算した結果(図-9), 各々の浸透パターンが異なることが判明した。クラック幅を200 $\mu\text{m}$ とした場合には, 表面付近の小さな細孔の浸透が先に進行し, その後に, クラック部への浸透が生じている。これに対して, クラック幅を20nmとした場合には, 先にクラック部への浸透が進行し, 続いて表面付近の浸透が生ずる結果となっている。この浸透パターンの相違は,

劣化因子などの輸送にも影響を与えることが考えられる。(b)図においては, クラック部に先行して浸透するため少量の水でも劣化因子を内部へ輸送することが想定される。また, どちらのクラックの場合においても表層より深く水分を伝達する経路となることが示されている。

#### (2) 遷移帯モデル

W/C = 0.6 の細孔容積率を与えたモデルの領域内に擬似骨材3個を配置し, その円周に擬似遷移帯を配置した。擬似遷移帯の空隙径は文献<sup>9)</sup>より, 50nmと2 $\mu\text{m}$ とした。浸透結果は, クラックと同傾向を示した(図-10)。また, 遷移帯が互いに接触していなくても, 遷移帯間の浸透



が届くほどに近い距離に位置していれば、遷移帯から遷移帯への浸透も生ずることも示された。さらにセメントペースト自体の浸透が卓越していなくても、遷移帯から遷移帯へと浸透がジャンプすることで新たな浸透前線が生じ、浸透の範囲が拡がり得ることが示された。

#### 4. まとめ

本研究では、毛管作用による気液界面の圧力低下量を駆動力とする CA モデルを構築し、空隙率及び細孔径分布が浸透過程に与える影響について検討した。得られた知見は、以下のとおりである。

(1) セル数  $L$  と浸透率の関係では、セル数が増加するに従い浸透率が低下する傾向が見られ、この原因としてセル数の増加に伴う浸透閾値の増加が関与していると推測された。

(2) 細孔径分布の実測値より求めた細孔容積率をモデルの入力とした場合、 $W/C=0.6$  においてもほとんど浸透しない結果となったが、これは、モデルが 2 次元であることに起因すると考えられた。

(3) クラックを導入したモデルでは、小さな径を与えられたほうが、本体部分に先行して浸透したのに対し、大きな径を与えられたクラックでは、本体部分の浸透が先行するなど、クラック幅の相違による先行浸透と遅延浸透の異なる挙動が再現された。

(4) 遷移帯モデルでも、クラックモデルと同様に小さな空隙径を有する遷移帯には先行して浸透が進展することが示された。また、遷移帯相互が接触していなくても、間のセメントペーストを介した浸透が可能であるならば、遷移帯間をジャンプするように浸透が進むことが示された。さらにその結果、新たな浸透前線が生じる

ために、浸透領域の拡大過程が再現できた。

#### 参考文献

- 1) 越川茂雄, 荻原能男: コンクリートの毛管浸透試験方法に関する研究, 土木学会論文集, 第 426 号/V-14, pp.183-191, 1991.2
- 2) 秋田宏ほか: 毛管作用に基づいたモルタル中の水分移動解析, セメント・コンクリート論文集, No.51, pp.624-629, 1997
- 3) 福原輝幸ほか: コンクリートの毛管浸透と非定常法による不飽和透水係数の算定, 土木学会論文集, No.564/V-35, pp.89-96, 1997.5
- 4) 柳 博文ほか: 不飽和コンクリートの吸水過程に及ぼす水セメント比の影響, 土木学会論文集, No.683/V-52, pp.65-73, 2001.8
- 5) D.B. Bentz, E.J. Garboczi : Percolation of phases in a three-dimensional cement paste microstructure model, Cement and Concrete Research, 21, pp.325-344, 1991
- 6) 加藤恭義ほか: セルオートマトン法, 森北出版, 1998
- 7) D. スタウファー, A. アハロニー: パーコレーションの基本原則, 吉岡書店, 2001
- 8) 加藤佳孝ほか: 細孔構造に立脚したコンクリートの拡散性状のモデル化に関する一提案, コンクリート工学年次論文集, Vol.23, No.2, 2001
- 9) 内川浩ほか: 硬化モルタル及びコンクリート中の遷移帯厚さの評価並びに遷移帯厚さと強度との関係の検討, コンクリート工学論文集, Vol.4, No.2, pp.1-8, 1993.7