

# 論文 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

池田 翔大<sup>\*1</sup>・永井 学志<sup>\*2</sup>・胡桃澤 清文<sup>\*3</sup>

**要旨:** 近年建築構造物の高層化に伴い、水セメント比が非常に低いコンクリートが使用されてきている。また、コンクリート構造物に超長期耐久性を要求される設計も行われている。このような多様化するコンクリートの長期的性能を予測する上で実験的検討は欠かせないものであるが、環境への負荷や時間の制約を考慮すると実験的に検証を行うよりも数値的に解析を行い、より少ない実験からその予測を行うことが有用である。そこで本研究ではその基礎的検討としてセメントペーストの弾性係数予測のための数値モデル適用を行った。反射電子像から3次元イメージベースモデルを構築し、解析手法として均質化法を適用した。その結果、弾性係数は実測値よりも高い値を示したためさらに高解像度の画像取得の必要性が示されたが、異方性の検討及び応力分布を評価できる本モデルの有用性を示した。

**キーワード:** 3次元イメージ, 弾性係数, 均質化法, C-S-H, 反射電子像, 硬化セメントペースト

## 1. はじめに

近年、建築構造物の高層化に伴い、水セメント比(W/C)が非常に低いコンクリートが使用されてきている。また、コンクリート構造物に超長期耐久性を要求される設計も行われている。それら多様化するコンクリートの長期的性能を予測する上で実験的検討は欠かせないものであるが、環境への負荷や時間の制約を考慮すると実験的に検証を行うよりも数値的に解析を行い、少ない実験により予測を行うことが有用であると考えられる。そのためにも、高精度を有し、かつ各種条件変化に対応するためマイクロ物性の変化を取り入れたモデルを構築する必要がある。

マイクロ物性を考慮したモデルとして、Ulmら<sup>1)</sup>はセメントペースト中の未水和セメントや水和物などの各相の量から巨視的な弾性係数を予測するモデルを提案しているが、このモデルでは各相の幾何学的な配置を考慮していない。また、Haeckerら<sup>2)</sup>はセメントの水和反応モデルを用い、幾何学的な影響も考慮したモデルから弾性係数を推定しているが、水和反応モデルから得られた推定値であり実際のセメントペースト中の微細な形状を検討するには至っていない。このようにマイクロレベルではその量を考慮した研究と反応モデルによる検討は行われているが実際のマイクロ構造を考慮したモデルはない。

しかしながら、永井ら<sup>3)</sup>はコンクリートを粗骨材、界面、マトリックス(モルタル)の3相材料として仮定し、コンクリートの断面をスキャンし3次元イメージを構築し、それを均質化法<sup>4)</sup>によって解析することにより圧縮破壊を表現することに成功している。この解析法をセメ

ントペースト硬化体に適用することによりマイクロ構造を考慮した解析が可能であると考えられる。

そこで本研究では、実際のセメントペースト硬化体の反射電子像測定から得られた2次元イメージを3次元イメージに再構築し、それに著者らが提案する均質化法を適用し弾性係数推定を行いその有用性について検討することを目的とした。

## 2. 3次元モデル構築と均質化法

### 2.1 3次元マイクロモデルの構築

#### (1) ミクロモデル構築の手順

ペースト硬化体は普通ポルトランドセメント(密度 $3.16\text{g/cm}^3$ 、比表面積 $3450\text{cm}^2/\text{g}$ )を用い水セメント比40、60、80%とし $50\phi \times 100\text{mm}$ 円柱型枠に打ち込み24時間後に脱型し、所定の材齢まで水中養生を行った。試料は5mm角程度に切り出し表面を研磨し、観察に用いた。3次元モデルを構築するのに必要な空隙および各鉱物に分離するため、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でセメントペースト硬化体の反射電子像(倍率500倍)の測定を行った。測定範囲は $200 \times 150\mu\text{m}$ の大きさであり、1画像は $640 \times 480$ 画素からなり、1画素の大きさは約 $0.32\mu\text{m}$ である。それぞれの相の分離は輝度の違いによって行うこととし、輝度の高いほうから未水和セメント粒子(UH)、水酸化カルシウム(CH)、C-S-H、粗大空隙(P)とする。なお、相の分離は隣接する各相の輝度分布が最小となる値で行い、元画像と抽出した相の分布が目視で異ならないように行った。図-1に輝度ヒストグラムと反射電子像の測定例を示す。また、反射電子像の輝度を表す反射電子係数 $\eta$

\*1 岐阜大学大学院 工学研究科 数理デザイン工学専攻(正会員)

\*2 岐阜大学 工学部 数理デザイン工学科 博士(工学) (正会員)

\*3 北海道大学大学院 工学研究科環境循環システム専攻 博士(工学) (正会員)

は下記の通りである。

$$\eta = -0.0254 + 0.016Z - 1.86 \times 10^{-4}Z^2 + 8.3 \times 10^{-7}Z^3 \quad (1)$$

ここで、 $Z$ : 元素番号を表す。

また、輝度によって分離した各相の分布を図-2に示す。図中の左上は反射電子像の原図であり、右上図は空隙を抽出した空隙の分布図(黒い部分)、下の図はC-S-Hを抽出した図(白い部分)を示す。

上記の方法によって得られた画像の個々の相分離を行った画像から次のようにして自己相関関数を得る。 $M \times N$  画素からなる画像から得られる自己相関関数  $S(x,y)$  は以下の式を用いて求める。

$$S(x,y) = \frac{\sum_{i=1}^{M-x} \sum_{j=1}^{N-y} I(i,j) \times I(i+x,j+y)}{(M-x) \times (N-y)} \quad (2)$$

ここで  $I(x,y)$  は座標  $(x,y)$  の画素が目的の相(たとえば空隙等)である場合は1, その他は0として計算を行う。ここで  $S(x,y)$  を決定した後、 $S(x,y)$  を極座標での自己相関関数  $S(r)$  に変換する。 $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  とするとき  $S(r)$  は次式で変換できる。

$$S(r) = \frac{1}{2r+1} \sum_{l=0}^{2r} S\left(r, \frac{\pi l}{4r}\right) \quad (3)$$

ここで、 $S(r, \theta) = S(r \cos \theta, r \sin \theta)$  である。

この自己相関関数  $S(r)$  を用いて大きさ  $100^3$  画素 (1辺  $32 \mu\text{m}$ ) の3次元モデルを構築する。図-3に自己相関関数を計算した結果の一例を示す。距離0の値は各相の存在量を示しており、距離が離れるにつれて減衰していく。この関数に従い各相を配置していくことにより、2次元画像から3次元モデルを構築する。

3次元モデルはガウシアンノイズを用いて作成し、自己相関関数によって各相の分布を決定する。ガウシアンノイズフィルター  $F(x,y,z)$  は次式で表され、

$$F(r) = F(x,y,z) = \frac{S(r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}) - S(0) \times S(0)}{[S(0) - S(0) \times S(0)]} \quad (4)$$

初期に正規分布させた各相  $N(x,y,z)$  と  $F(x,y,z)$  の積によって、各相の自己相関関数から推定した分布  $R(x,y,z)$  を決定する。自己相関関数は  $S(0)^2$  が60画素程度で収束したため  $31 \times 31 \times 31$  の大きさにて畳込みを行い計算を行った。

$$R(x,y,z) = \sum_{i=0}^{30} \sum_{j=0}^{30} \sum_{k=0}^{30} N(x+i,y+j,z+k) \times F(i,j,k) \quad (5)$$

なお、次に述べる均質化法との整合性のため、境界条件として周期境界条件を与えた。

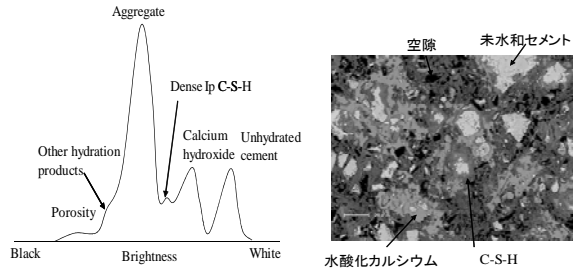


図-1 反射電子像と輝度の分布

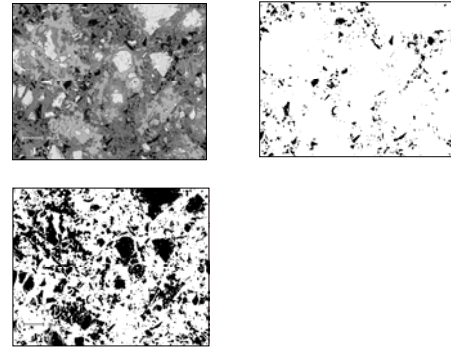


図-2 反射電子像からの各相抽出

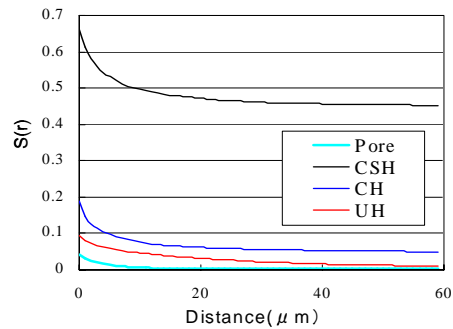


図-3 自己相関関数  $S(r)$

## 2.2 均質化法による定式化

本研究の定式化は均質化法<sup>3)</sup>に基づき行い、その有限要素離散化は1画素を1有限要素とみなす。均質化法は、マイクロ構造がマクロ特性に強く影響する複合材料の評価に適した解析手法であり、式(2)~(5)を用いて構築されるセメント硬化体のマイクロ構造の力学的特性を評価するのにも有用と考える。本手法の特徴は、弾性係数のようなマクロ特性だけでなく、材料内部のマイクロ構造における応力分布等も計算できることである。ここでマイクロ構造はマクロ構造に対して十分に小さく、ミクロスケールの単位構造が周期的に繰り返されていると仮定する。

座標系  $\mathbf{x}$  で表されるマクロ構造と、座標系  $\mathbf{y}$  で表されるマイクロ構造のスケールの違いに着目して、スケール比を  $\lambda \ll 1$  として、 $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\lambda$  と関連付ける。全体構造の変位場  $\mathbf{u}$  を次のように漸近展開する。

$$u_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = u_i^0(\mathbf{x}) + \lambda u_i^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots \quad (6)$$

マイクロ構造が周期的な構造を持つことを仮定して、式(6)を弾性体の支配方程式に代入し $\lambda$ の低次項に関して整理すると、次の均質化法によるアルゴリズムを得る。

(1)特性関数の求解

マクロスケールの変形とミクロスケールにおける単位周期領域の変形を繋ぐ特性関数テンソル $\chi$ を次式から算出する。

$$\frac{1}{|Y|} \int_Y C_{ijkl} \frac{\partial \chi_k^{mn}}{\partial y_l} \frac{\partial \delta u_i^1}{\partial y_j} dY = \frac{1}{|Y|} \int_Y C_{ijmn} \frac{\partial \delta u_i^1}{\partial y_j} dY \quad (7)$$

ここで $C$ はマイクロ構造の弾性テンソルであり、 $|Y|$ はマイクロ構造の体積を表す。

(2)均質化

得られた特性関数 $\chi$ を用いて、次式により均質化されたマクロ弾性テンソル $C^H$ を算出する。

$$C_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \left( \int_Y C_{ijkl} - C_{ijmn} \frac{\partial \chi_m^{kl}}{\partial y_j} \right) dY \quad (8)$$

(3)全体構造の応力解析

マクロ弾性テンソル $C^H$ を用いて通常の構造物全体の応力解析を行い、マクロ変位 $u^0$ を算出する。

(4)局所化

マクロ変位 $u^0$ と特性関数 $\chi$ を用いて $u^1$ を計算し、次式よりマイクロ構造内の応力を評価する。

$$u_i = y_i \frac{\partial u_i^0}{\partial x_j} + u_i^1 \quad (9)$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (10)$$

以上の手順の概要を図-4に示す。

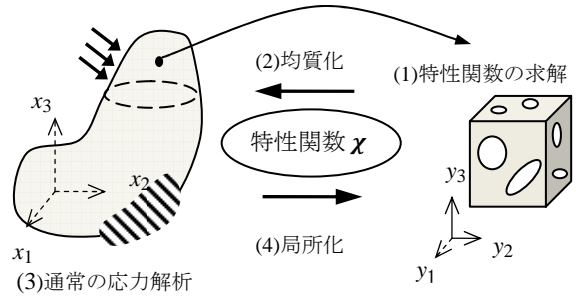


図-4 均質化法の手順

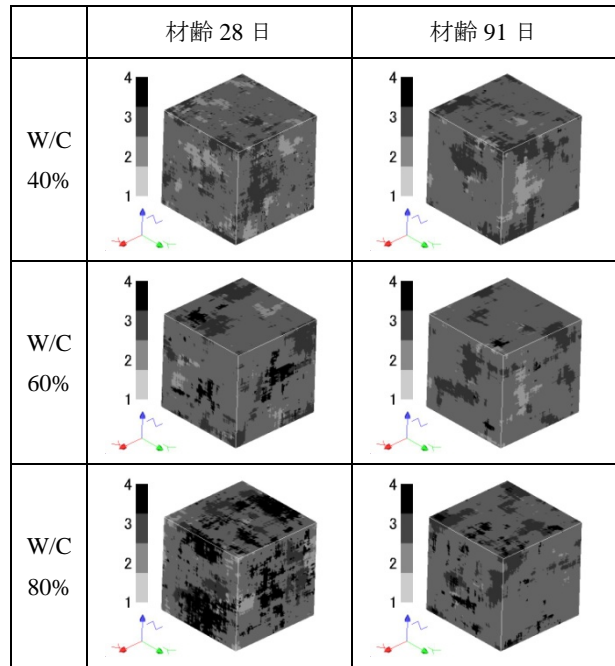
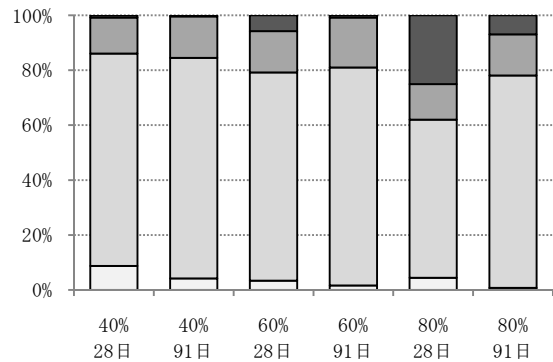


図-5 ミクロモデル

□UH □C-S-H ■CH ■P



上段:W/C, 下段:材齢

図-6 体積分率

3. 数値実験

3.1 計算モデルの設定

(1) ミクロモデル

マイクロモデルは 2.1 節で述べた方法に基づき、図-5に示すように W/C と材齢が異なる 6 つを構築した。図中では未反応セメントを 1, C-S-H を 2, 水酸化カルシウムを 3, 空隙を 4 で示す。2.1 節で述べたように寸法は一辺が  $32 \mu m$ , 要素数は  $100^3$  要素である。各モデル中の相の体積分率を図-6に示す。

未反応セメント, C-S-H, 水酸化カルシウム, 粗大空隙それぞれの相の物性値は等方性を仮定して, 未反応セメントがヤング率  $E = 117.6 GPa$ , ポアソン比  $\nu = 0.314$ , C-S-H が  $E = 22.4 GPa$ ,  $\nu = 0.25$ , 水酸化カルシウムが  $E = 42.3 GPa$ ,  $\nu = 0.324$  とした。また粗大空隙については, 便宜的に C-S-H のヤング率, ポアソン比の 1% ( $E = 0.224 GPa$ ,  $\nu = 0.025$ ) とした<sup>2)</sup>。

図-5 に示したどのマイクロモデルも, 大半を C-S-H が

占めている。未反応セメントの割合はモデルにより異なり, W/C が大きいモデルほど少なく, 材齢が大きいモデルほど少なくなる。粗大空隙の割合もモデルにより異なり, W/C が大きいモデルほど多く, 材齢が大きいモデルほど少なくなる。また未反応セメントのヤング率は

C-S-H や水酸カルシウムより数倍高いこと、粗大空隙は応力を負担しないことより、セメントペースト硬化体のマクロ特性や強度には、これらの割合が大きく影響すると予想できる。

## (2) マクロモデル

マクロモデルでは一様な軸圧縮問題を考え、 $x_3$  軸方向に $-10\text{MPa}$ を与える(図-7)。このときマクロモデルは線形構成則を解けばよい。

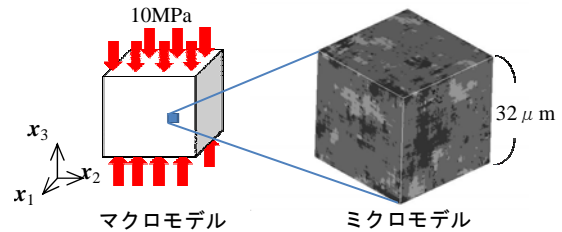


図-7 計算モデル

## 3.2 計算結果

### (1) 同一条件における計算モデルのばらつき

マイクロモデルの構築は統計的手法によるため、同一の W/C と材齢を与えても幾何学的には全く同じモデルにならない。そこでこの違いによるばらつきの程度を確認するために、W/C=40%材齢 28 日と W/C=80%材齢 28 日のマイクロモデルをそれぞれ 3 つ準備し、主応力分布のヒストグラムを見る(図-8, 9)。

W/C=40%材齢 28 日と W/C=80%材齢 28 日それぞれ 3 つのモデルの誤差は最大でも 5%程度であり、ほぼ同じ結果が得られた。したがって同一条件のマイクロモデルであれば、構築によるばらつきはほとんどない。そこで本研究では各 W/C と材齢につき、それぞれ 1 つのモデルのみで計算した。

### (2) マクロ特性

W/C=80%のモデルに関して、材齢 28 日と 91 日のモデルそれぞれについて、マクロ弾性  $\mathbf{c}^H$  の成分を示す。

14.19	3.880	4.163	0.211	0.003	0.482	GPa
	15.62	4.081	0.296	0.103	0.178	
		15.65	0.039	0.157	0.486	
			4.678	0.229	0.009	
sym				4.938	0.077	
					4.998	
25.48	8.400	8.513	0.117	0.008	0.058	GPa
	25.52	8.468	0.040	0.076	0.031	
		26.02	0.026	0.053	0.105	
			8.250	0.036	0.007	
sym				8.377	0.021	
					8.383	

均質化法では、NIST モデル<sup>5)</sup>では算出できないマクロ弾性  $\mathbf{c}^H$  の求解できることが特徴である。この特徴により、材齢 28 日のマクロ弾性には、垂直成分に最大で 9%の差、せん断成分に最大で 6%の差が生じており、若干の異方性のあることがわかる。一方で材齢 91 日では、垂直成分、せん断成分の差は共に 2%未満になり、ほとんど等方性を示している。これらの違いは、材齢 28 日モデルの方が空隙の体積比が高く、 $100^3$ 要素のモデルでは十分な大きさではないためと考えられる。そこで一辺の寸法を倍にしたモデル ( $200^3$ 要素) で検討した結果、垂直成分、せん断成分の差は共に 2%未満になり、ほとんど等方性を示した。このことから W/C=80%材齢 28 日

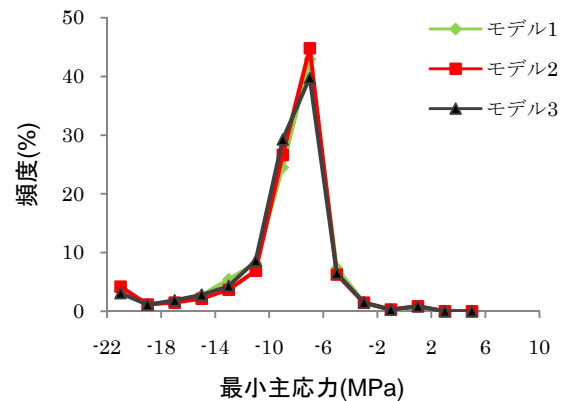


図-8 W/C=40% 材齢 28 日の応力分布

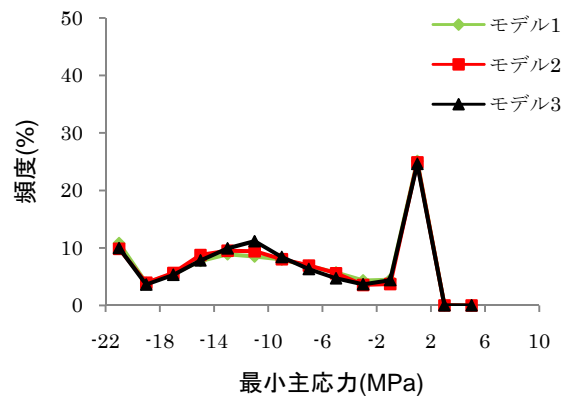


図-9 W/C=80% 材齢 28 日の応力分布

のモデルでは弾性係数を推定するためには、 $200^3$ の大きさが必要であることが示された。

W/C=40%, 60%のモデルに関しては、材齢 28 日の状態で、垂直成分、せん断成分の差は共に 2%以下でありほとんど等方的であった。そこでマクロなヤング率を評価した(表-1)。比較のためこの表に NIST モデル<sup>5)</sup>により評価されたヤング率と動弾性係数の実測値<sup>6)</sup>を示す。なお W/C=80%, 材齢 28 日のモデルは異方性があるが近似的にヤング率を評価した。実測値と比較するとすべての予測した弾性係数が高い値であった。これは反射電子像で C-S-H であると仮定した相には  $0.32\mu\text{m}$ 以下の空隙が含まれており、実際には既往の研究で仮定した C-S-H

	材齢 28 日	材齢 91 日
W/C=40%	28.4GPa	26.6GPa
	28.1GPa	26.3GPa
	20.7GPa	22.6GPa
W/C=60%	23.0GPa	25.6GPa
	24.0GPa	25.6GPa
	13.6GPa	14.6GPa
W/C=80%	12.5GPa	21.3GPa
	14.9GPa	22.2GPa
	9.4GPa	10.2GPa

表-1 マクロなヤング率

(上段：均質化法, 中段：NIST, 下段：実測値)

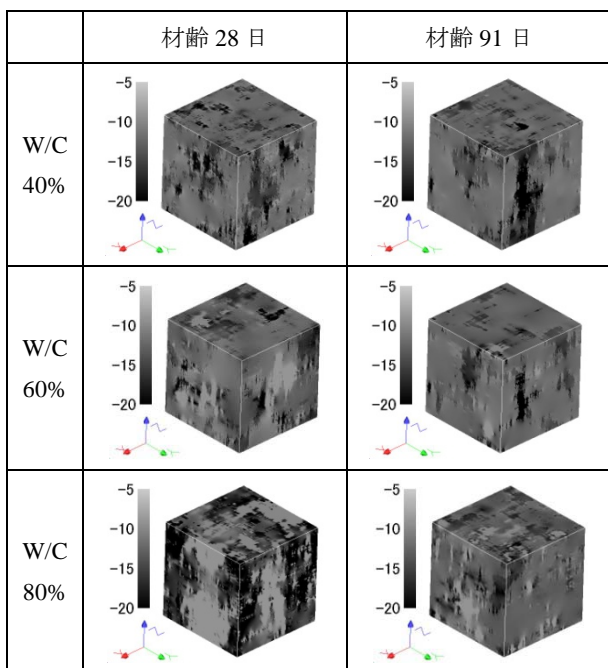


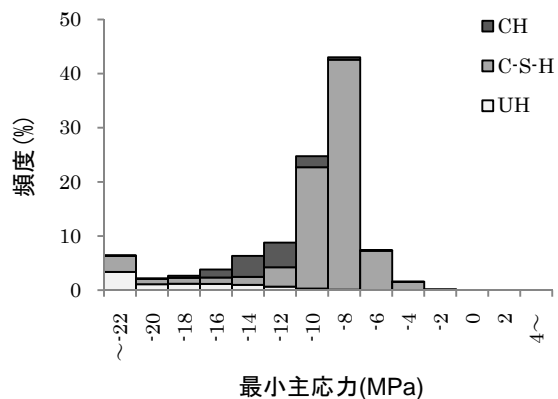
図-10 最小主応力分布(MPa)

の弾性係数より低い値であると考えられる。そのため今後高解像度の画像を取得し  $0.32 \mu\text{m}$  以下の空隙を検出する必要があると考えられるが、計算結果と実測値の傾向は同様であるのでモデルの試算結果について詳細な検討を次項にて行った。

### (3) ミクロモデルの主応力分布

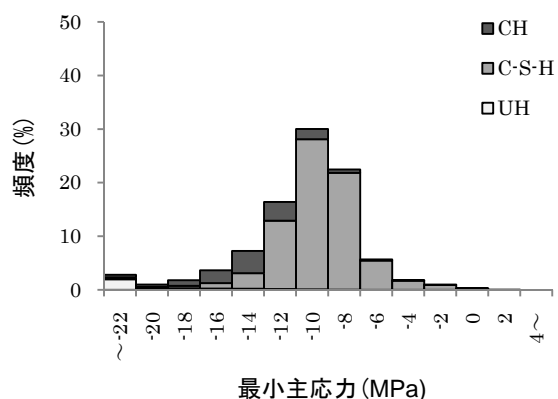
マクロモデルに  $x_3$  軸方向に一律な応力  $-10\text{MPa}$  を作用させた場合のミクロモデルの応力分布を次に示す。図-10 は、各モデル中の最小主応力分布である。いずれのミクロモデルにおいても、未反応セメントとその近傍に圧縮応力の集中が多くみられる。これはこの相のヤング率が高いためであり、この相の割合が多いほど圧縮応力の集中が多くみられる。逆に未反応セメントが少ない、すなわち高 W/C かつ高材齢のモデルほど圧縮応力が全体的に分散する。

最小主応力の集中や分散を検討するために、特徴的な4つのモデル(W/C=40%材齢28日, W/C=60%材齢28日, W/C=60%材齢91日, W/C=80%材齢28日)について、



	全体	UH	C-S-H	CH
平均	-10.1	-20.3	-9.63	-12.8
標準偏差	4.41	6.95	4.22	2.38
中央値	-8.89	-19.1	-8.68	-12.8

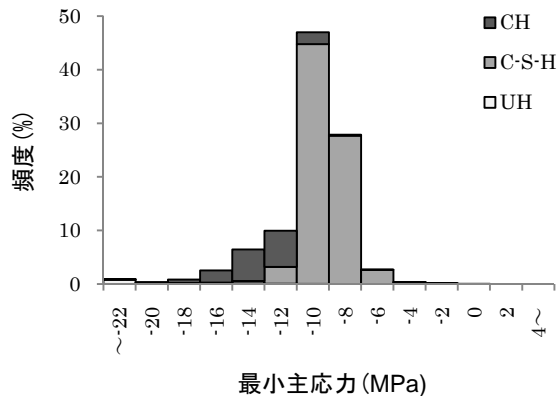
図-11 最小応力分布(W/C=40% 材齢28日)



	全体	UH	C-S-H	CH
平均	-10.1	-24.1	-9.62	-13.6
標準偏差	5.07	10.1	2.77	3.82
中央値	-9.87	-22.9	-9.55	-13.5

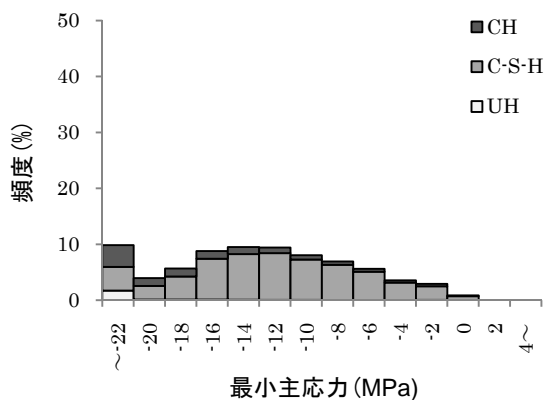
図-12 最小応力分布(W/C=60% 材齢28日)

ヒストグラム、平均値、標準偏差及び中央値を図-11～14に示す(空隙は除外)。最小主応力の全体の平均値は、マクロな応力が同一であるためモデルによる違いはほとんどない。全体の標準偏差、中央値に関しては、モデルにより異なった傾向がみられる。水セメント比が大きいモデルほど、中央値が高くなり、標準偏差が小さくなる。また材齢が長いモデルほど、分布が  $-10\text{MPa}$  に集中し、標準偏差も小さくなる。具体的には、W/C=40%のモデルでは、材齢が28日から91日に移行すると全体の標準偏差が約15%減少、同様にW/C=60%のモデルでは約40%減少、W/C=80%のモデルでは約55%減少している。またW/Cが大きくなると標準偏差の減少の割合も大きくなる。



	全体	UH	C-S-H	CH
平均	-10.0	-22.2	-9.17	-13.2
標準偏差	2.98	8.27	1.26	2.16
中央値	-9.40	-21.2	-9.19	-13.0

図-13 最小応力分布 (W/C=60% 材齢 91 日)



	全体	UH	C-S-H	CH
平均	-10.5	-30.3	-12.4	-17.4
標準偏差	9.26	17.2	6.31	9.15
中央値	-10.3	-28.1	-12.2	-17.1

図-14 最小応力分布 (W/C=80% 材齢 28 日)

W/Cの小さいモデルでは、未反応セメントが応力負担をして、C-S-Hにかかる負荷が少ないと考えられる。つまり、セメント量の多い高強度コンクリートでは未水和セメントが応力を負担しその構造を保っていると考えられ、未水和セメントを多く残存させることが強度を増加させる手段の一つであることがこの計算モデルから示唆された。

W/C=80%材齢 28 日のモデルに関しては、C-S-Hにも大きな応力が作用していることから、多くの空隙の存在により組織を形成する骨格部分 (C-S-H) への負担が大きいため、C-S-H の強度がいずれの水セメント比でも同

様であると仮定すると強度が低下する原因となると考えられる。

## 5. 結論

本研究ではセメントペースト硬化体の反射電子像から 3 次元イメージを構築し、それに均質化法を適用するしマクロな弾性係数の推定を試み、以下の結論を得た。

- (1) 2次元の反射電子像から 3次元イメージを構築し、それに均質化法を適用することによりマクロな弾性係数を推定する手法を構築することができた。しかし、推定値は実測値よりも高い値を示したため、今後高解像度の画像を取得する必要があることが示された。
- (2) NISTモデルによる弾性係数の推定結果と本研究で提案するモデルによる推定結果はほぼ同様の値であったが、均質化法を適用した本モデルではマクロな異方性の検討とマイクロモデルの応力分布の両方が評価できることから、NISTモデルに対する優位性がある。
- (3) 本モデルにより硬化体内部の主応力を解析した結果、水セメント比が低い試料において未水和セメント相に高応力が集中しており、C-S-H への応力負担が高水セメント比よりも低いことが示唆された。

## 参考文献

- 1) O. Bernard, F.J. Ulm, E. Lemarchand: A multiscale micromechanics C-S-Hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials, *Cement and Concrete Research*, Vol.33, pp.1293-1309, 2003
- 2) C.-J. Haecker et.al: Modeling the linear elastic properties of Portland cement paste, *Cement and Concrete Research*, Vol.35, pp. 1948-1960, 2005
- 3) 永井学志, 山田貴博, 和田 章: 三次元実画像データに基づくコンクリート材料の有限要素解析手法, *日本建築学会構造系論文集*, NO.509, pp.77-85, 1998
- 4) 寺田賢二郎, 菊池昇: 均質化法入門, 丸善株式会社, 2003
- 5) E.J. Garboczi: Finite Element and Finite Difference Programs for Computing the Linear Elastic and Elastic Properties of Digital Images of Random Materials *National Institute of Standards and Technology, Internal Report 6269*, 1998
- 6) 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, *コンクリート工学年次論文集*, Vol.30, pp.591-596, 2008