

## РАЗРАБОТКА НАУЧНО ОБОСНОВАННЫХ СТРУКТУРНО-МЕХАНИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ БЕТОННОГО КОМПОЗИТА ДЛЯ ПРОГНОЗА ОСНОВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК СВОЙСТВ ВЫСОКОКАЧЕСТВЕННЫХ БЕТОНОВ С УЧЕТОМ СОБСТВЕННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ

Тур Виктор Владимирович, доктор технических наук, профессор, проректор по научной работе, Брестский государственный технический университет

Филимонова Наталья Викторовна, кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Брестский государственный технический университет

### Введение

В развитии технологий современных бетонов большое значение приобретают теоретические методы исследования и прогнозирования основных технологических и эксплуатационных характеристик цементных систем.

Показательным примером эволюции подходов к изучению строительных материалов является новое направление, развиваемое сегодня как комплекс экспериментальных исследований, описательной теории и математического программирования – «вычислительное материаловедение». По данным *Garboczi E.J. и др.* [16] начало компьютерному моделированию структуры и свойств строительных материалов было положено рядом исследований в области физики аморфных материалов (полупроводников) на атомном уровне еще в 60-70-х годах прошлого столетия.

В 1984 г. появились первые работы по моделированию структуры и свойств бетона, выполненные *Wittmann F.H. и др.*, а позднее, в 1986 г, *Jennings* и *Johnson* представили вероятностную 3D-модель гидратационного развития мономинеральной ( $S_3C$ ) цементной системы [18].

Темпы развития вычислительного материаловедения долгое время сдерживались ограниченными возможностями компьютерной техники. Для воспроизведения сложных алгоритмов структурообразования цементного камня не хватало скоростных процессоров и достаточно емких устройств памяти. Только благодаря прогрессу компьютерных технологий вычислительное материаловедение приобрело статус самостоятельного научного направления, которое сегодня демонстрирует высокую эффективность в исследованиях материалов с неупорядоченной структурой и ярко выраженным вероятностным характером структурообразования.

Особого внимания среди моделей цементных систем различного уровня заслуживают модели *T. Ishida, K. Maekawa* и др. [7,8], *Bernard O., Ulm Fr.-J., Lemarchand E.* [6], модель *NIST* [5,18]. Их общей чертой являются иерархичность: модели позволяют прогнозировать характеристики бетона (а в ряде случаев и железобетонных конструкций) на основании предварительного моделирования параметров структуры и свойств цементного камня.

Несмотря на широкий спектр задач, решаемых с применением перечисленных моделей, до настоящего времени серьезной проблемой в практике строительства остается регулирование и устранение последствий усадки бетона.

Привлекательным, с точки зрения решения рассматриваемой проблемы, является применение расширяющихся вяжущих, способных увеличивать начальный объем структуры даже при твердении в условиях внешнего ограничения.

Наиболее эффективными расширяющимися добавками признаны сульфатоалюминатные композиции [2,3]. Управляя минералогическим составом сульфатоалюминатных композиций можно получать самые разнообразные цементы и бетоны на их основе: от бетонов с компенсированной усадкой до напрягающих бетонов. Вместе с тем, назначить оптимальный минералогический состав сульфатоалюминатной композиции очень сложно, так как расширяющиеся структуры чутко реагируют на изменение внешних факторов неполным развитием деформаций расширения или саморазрушением. Известным недостатком расширяющихся структур является также потеря достигаемых деформаций во времени вследствие усадки или перекристаллизации продуктов гидратации. В общем случае результат совместного влияния минералогии портландцемента, тонкости помола, дозировки добавки, водоцементного отношения, температуры твердения, режима увлажнения и прочих факторов пока не удается прогнозировать на основании существующих опытных данных.

В связи с этим для применения сульфатоалюминатных расширяющихся цементов на практике необходимо иметь надежные методы прогнозирования характеристик бетонов на их основе с учетом возможного влияния различных внешних факторов.

В данной работе представлены некоторые возможности применения существующих методов моделирования структуры цементных бетонов для решения задач прогнозирования собственных деформаций цементных систем.

На сегодняшний день достигнуты определенные результаты в реализации начального этапа – в построении модели структуры и свойств цементного камня, предназначенной в перспективе для прогнозирования собственных деформаций бетона с учетом некоторых технологических факторов (В/Ц, температуры, влажности среды).

#### **Основные положения модели**

Модель базируется на известных представлениях о механизме структурообразования расширяющихся цементных систем. Коротко эти представления сводятся к следующему, рис. 1.

Структура цементного камня развивается при взаимодействии двух параллельных процессов: *расширения* и *набора прочности*. Расширение вызвано взаимодействием минералов сульфатоалюминатной фазы цемента с образованием сложной соли – этtringита. Этtringит кристаллизуется на поверхности алюминатных фаз топохимически и, накапливаясь, образует вместе с алюминатны-

ми частицами активно растущие комплексы. Параллельно протекает процесс гидратации силикатных минералов, что обуславливает развитие прочности цементного камня. Скорости процессов набора прочности и расширения активных комплексов должны быть определенным образом согласованы, так как от этого зависит внешняя деформация цементного камня. Если прочный силикатный каркас формируется недостаточно быстро по отношению к скорости расширения активных центров, цементный камень разрушается. Если же скорость набора прочности высока, собственная жесткость структуры становится мощным ограничением для роста активных центров. В этом случае деформации расширения цементного камня отсутствуют.

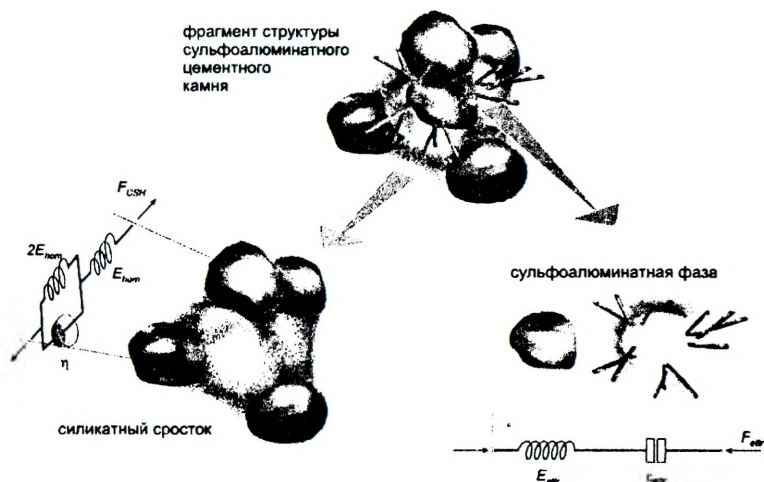


Рисунок 1 – Физическая и реологические модели структуры сульфатоалюминатной цементной системы

По мнению авторов работы [9], продукты реакций сульфатоалюминатной и силикатной фаз не образуют между собой прочных контактов срастания. Поэтому в расширяющейся цементной системе можно выделить две параллельно развивающиеся и механически взаимодействующие составляющие – активные центры и пассивный силикатный каркас, рис. 1. При этом общая деформация цементного камня зависит от деформации активных центров (этtringита) и жесткостных характеристик обоих составляющих. Расчет деформаций и напряжений в рассматриваемой системе базируется на реологических моделях, представленные на рисунке 1.

### 1.1 Базовая реологическая модель цементной матрицы

В базовой реологической модели активные центры (алюминатные частицы с оболочкой этtringита) смоделированы упругим элементом (см. рис.1) и

элементом, не имеющим жесткости, но изменяющимся в объеме. Этот элемент характеризует величину свободной деформации активных центров. Прочностной силикатный каркас наделен вязкоупругими свойствами (см. рис.1), преобладающими в период наиболее интенсивной гидратации и расширения цементного камня. Полученные две цепочки реологических моделей соединены параллельно, что обеспечивает совместность их деформаций (рис.2).

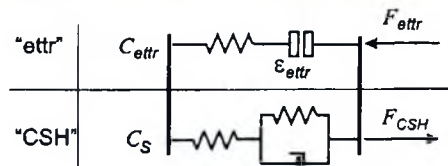


Рисунок 2 – Базовая реологическая модель структуры расширяющегося цементного камня

Поскольку в гидратирующей расширяющейся цементной системе все внутренние усилия, вызванные накоплением объема этtringита (в модели – удлинением ветви «ettr», рис. 2), взаимоуравновешены, деформация цементного камня определяется на основании условия равновесия  $F_{ettr} = F_{CSH}$ , из которого следует:

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_{ettr}}{1 + \frac{C_S}{C_{ettr}(1 + \varphi)}}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_{ettr}$  – деформация этtringита,  $C_{ettr}$ ,  $C_S$  – жесткости сульфоалюминатной и силикатной структур,  $\varphi$  – коэффициент, характеризующий запаздывание упругих деформаций относительно приложенных напряжений.

Согласно ф. (1), для расчета деформации цементного камня необходимо определить жесткости компонентов сульфоалюминатной и силикатной структур  $C_{ettr}$ ,  $C_S$  и величину деформаций активного элемента  $\varepsilon_{ettr}$  в реологической модели структуры.

Решение этой задачи имеет определенную систему предпосылок.

Так, формирование жесткости структуры обусловлено химическим взаимодействием минералов цементного клинкера с водой. Чем больше степень гидратации цемента (т.е. чем полнее цемент реагирует с водой), тем выше прочность и жесткость структуры.

Деформация активного комплекса также зависит от количества образующихся продуктов гидратации. Кроме того, величина деформации активного компонента зависит от геометрических параметров структуры (дисперсности частиц, параметров пористости).

Наконец, результат – деформация расширения цементного камня, – зависит от особенностей внутреннего механического взаимодействия двух рассматриваемых структур.

Все эти явления тесно взаимосвязаны. Поэтому подход к моделированию структуры и деформаций цементной системы должен быть комплексным, охватывающим химический, геометрический, механический аспекты твердения.

### 1.2 Химическое моделирование

Для определения жесткостей, изменения объема этtringита и характеристик пористости необходимо знать историю преобразования фазового состава структуры в процессе твердения.

Гидратационное развитие структуры моделируется на основании химических реакций, характерных для основных минералов цементного клинкера [2-4, 9-11]. Для каждой реакции устанавливаются: кинетические параметры, объемный эффект реакции, механизм и возможность протекания реакции. Именно на этом этапе моделирования учитывается влияние на процесс гидратации таких внешних факторов как температура и влажность окружающей среды. Так, например, при изменении температуры корректируются кинетические параметры реакций (на основании уравнения Аррениуса) [6]. Роль влажности учитывается при расчете количества воды, доступной для гидратации.

Обобщенной характеристикой фазового состава является диаграмма фазовых переходов, получаемая в результате моделирования гидратационного развития структуры. Диаграмма служит основным источником исходных данных для определения деформации активных центров и жесткостных характеристик.

### 1.3 Геометрическое моделирование. Расчет деформации этtringита

При построении геометрической модели цементной системы приняты допущения, касающиеся в основном формы, гранулометрии и способа упаковки цементных частиц: 1) цемент, затворенный водой, рассматривается как совокупность моноразмерных частиц сферической формы, расположенных на равном расстоянии друг от друга согласно правилам кубической упаковки; 2) размер частицы рассчитывается исходя из удельной площади поверхности цемента; 3) свойства цементной матрицы могут быть описаны при рассмотрении репрезентативной кубической ячейки, размер которой определяется с учетом В/Ц.

Из совместного рассмотрения химической и геометрической моделей определяют момент схватывания и свободную деформацию активных центров  $\epsilon_{citr}$  [12].

### 1.4 Структурно-механическое моделирование .

#### Расчет жесткостей элементов реологической модели

Силикатный сросток цементного камня, а также растущие сульфалоуминатные центры многокомпонентны. Поэтому их жесткости  $C_{citr}$ ,  $C_s$  рассчитываются как гомогенизированные (усредненные) характеристики с учетом жесткостей и объемного содержания частиц клинкера, геля С-S-H, кристаллов этtringита и пр. Задача гомогенизации физико-механических характеристик решается с применением положений механики композитных материалов. В осно-

ву расчета положена двухуровневая структурная модель цементного камня – «матрица – включение», предложенная авторами работы [6].

### 1.5 Развитие структуры во времени. Задача о согласовании скоростей процессов расширения и набора прочности

Период наиболее интенсивного расширения сульфоалюминатной системы сопровождается частичным разрушением первичной структуры цементного камня и постоянным обновлением силикатных связей.

Для моделирования развития структуры во времени базовая реологическая модель деформаций, представленная на рис.2, усовершенствована с применением основных положений теории солидификации (*solidification theory*) или теории упрочняющегося материала [13]. Согласно положениям теории солидификации процессы расширения и набора прочности смоделированы добавлением к базовой реологической модели новых ветвей, характеризующих соответственно приращение сульфоалюминатной и силикатной фаз (обозначенных на рис. 2 как «еттр» и «CSH»). При этом накопление вынужденных деформаций отражено последовательным присоединением дополнительных ветвей, набор прочности – параллельным, рис. 3. Количество добавляемых ветвей зависит от скорости гидратации цемента и определяется на основании диаграммы фазовых переходов.

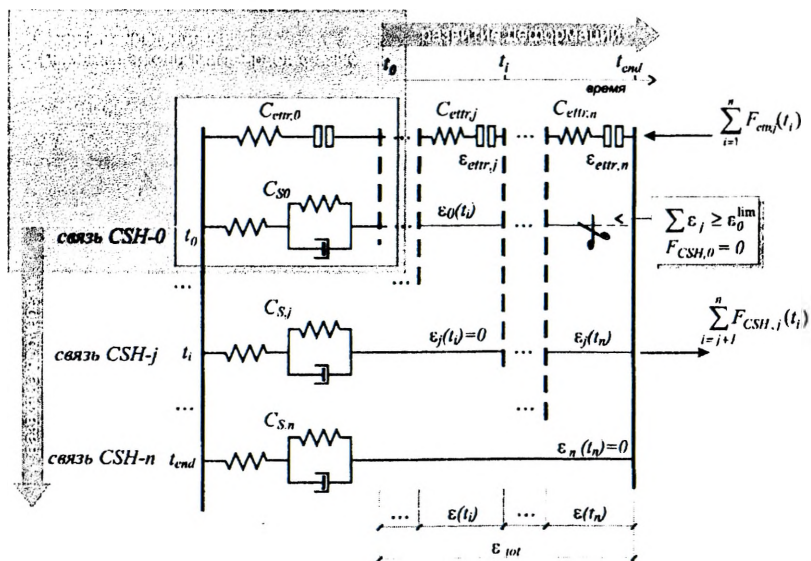
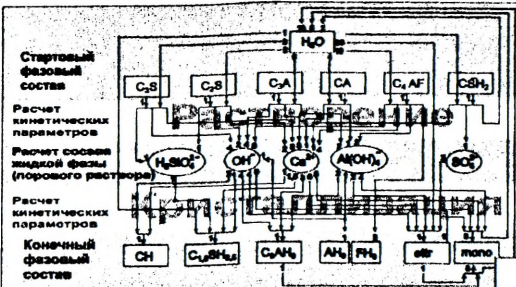


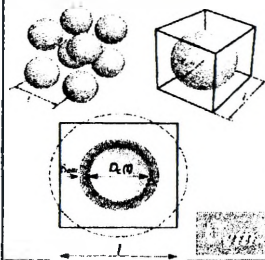
Рисунок 3 – Реологическая модель расширяющегося цементного камня в общем виде

# ОБЩЕННАЯ МОДЕЛЬ

## Химия

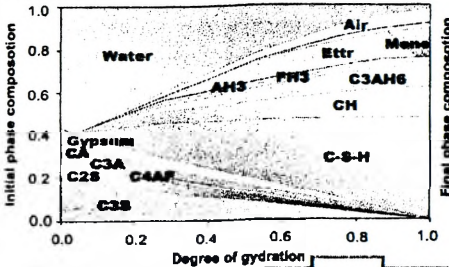
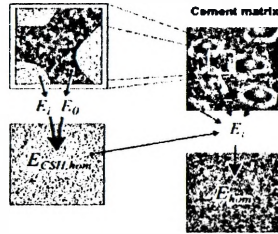


## Геометрия



## Механика

Расчет модуля упругости



## РЕЗУЛЬТАТЫ

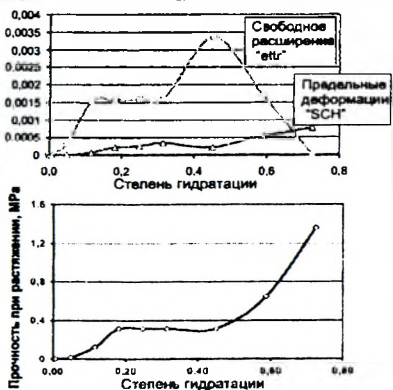
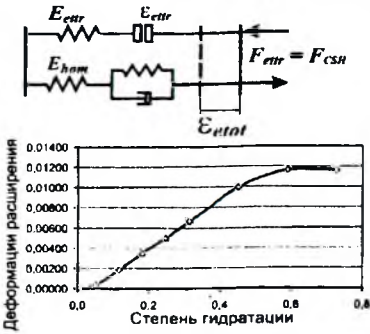


Рисунок 4 – Обобщенная модель структуры и собственных деформаций сульфоалюминатной цементной системы

Некоторые связи, образованные силикатными сростками, могут разрушаться при достижении предельной деформации (если  $\sum \epsilon_i > \epsilon_{CSH}^{lim}$ ). Соответст-

венно уменьшается общая жесткость и прочность структуры. Так моделируются характерные для напрягающего цемента спады прочности, часто наблюдаемые в экспериментах на стадии структурообразования.

Для расчетной схемы, представленной на рисунке 3, уравнения равновесия сил, выраженные через деформации, имеют вид:

$$\sum_{i=1}^n C_{стр,i} [\varepsilon_{стр,i}(t_i) - \varepsilon(t_i)] = \frac{C_{s0}}{1 + \varphi_0} \sum_{i=1}^n \varepsilon(t_i) + \frac{C_{s1}}{1 + \varphi_1} \sum_{i=2}^n \varepsilon(t_i) + \dots + \frac{C_{s(n-1)}}{1 + \varphi_{n-1}} \cdot \varepsilon_n \quad (2)$$

Приращения деформаций за соответствующие интервалы времени определяются последовательным решением уравнений типа (2) относительно  $\varepsilon_n$  (а для промежуточных связей – относительно  $\varepsilon_i$ ). Общая деформация цементного камня рассчитывается как сумма приращений  $\varepsilon_i$ :

$$\varepsilon_{tot} = \sum_i \varepsilon_i \quad (3)$$

Следует обратить внимание на то, что для практических целей деформации цементного камня следует рассчитывать в условиях внешнего механического ограничения. То есть, принимая во внимание наличие заполнителя и арматуры, условия равновесия для модели, представленной на рис. 3, следует записывать с учетом внешней приложенной силы.

Обобщенная схема расчетной модели деформаций расширения твердеющей сульфоалюминатной цементной системы представлена на рис. 4. Там же приведены некоторые результаты расчета свободных деформаций расширения и прочностных характеристик цементного камня.

### Заключение

Сравнительный анализ экспериментальных и расчетных данных, полученных с применением предложенной расчетной модели [12,14], позволил заключить: модель успешно воспроизводит развитие физико-химических и механических процессов структурообразования и адекватно отражает их роль в развитии деформаций. Следует отметить, что комплексный подход к моделированию структурообразования позволяет решать с использованием данной модели задачи, касающиеся не только характеристик расширения и прочности. На основании модели могут быть рассчитаны характеристики пористости и спрогнозированы деформации усадки, параметры проницаемости и долговечности. Кроме того, разработанная модель позволяет контролировать процессы структурообразования при наличии физико-механического взаимодействия с внешней средой. К примеру, внешнее механическое ограничение, в роли которого могут выступать заполнители или арматура, или вклад усадочных явлений, могут быть учтены добавлением к реологической модели внешнего усилия. Это открывает перспективы в прогнозировании связанных деформаций цементного камня (деформаций бетонов и растворов), а также в определении величины самонапряжения железобетонных конструкций [14].



## СПИСОК ЦИТИРОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Bertero, V.V. Curing Effect on Expansion and Mechanical Behavior of Expansive Cement Concrete // *J. ACI.* – 1987. – vol. 64, N 2. – P. 84–96.
2. Красильников, К.Г., Никитина, Л.В., Лапшина, А.И. Структура и деформативные свойства расширяющихся цементов // Структура, прочность и деформация бетона: Сб. тр./ Под ред. А.А. Гвоздева. – Москва: Стройиздат, 1972. – С. 129–133.
3. Михайлов, В.В., Литвер, С.Л. Расширяющие и напрягающие цементы и самоуплотняющиеся конструкции. – М.: Стройиздат, 1974. – 389 с.
4. Katrin Bollmann. Ettringitbildung in nicht wärmebehandelten Betonen. DISS. zur Erlangung des akademischen Grades Dokt.-Ing. / 31. Mai 2000.
5. Bentz, D.P. Three-Dimensional Computer Simulation of Portland Cement Hydration and Microstructure Development, *J. Am. Ceram. Soc.*, 80 [1] 3-21 (1997).
6. Bernard, O., Ulm, F.J., Lemarchand, E. A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials // *Cement and Concrete Research*, Vol. 33, 2003. – pp. 1293-1309.
7. Maekawa, K., Ishida, T., Kishi, T. Multi-scale modeling of concrete performance integrated material and structural mechanics. // *Journal of Advanced Concrete Technology*, 2003, vol. 1. – pp. 91-126.
8. Kishi, T. and Maekawa, K.: Multi-component model for hydration heating of Portlandcement, *Concrete Library of JSCE*, No.28, pp. 97-115, 1996.
9. Шейкин, А.Е., Чеховский, Ю.В., Бруссер, М.И. Структура и свойства цементных бетонов. – М., 1979. – 344 с., ил.
10. Constantiner, D., Farrington, S.A. Review of the Thermodynamic Stability of Ettringite Cement, *Concrete and Aggregates, CCAGDP*, No.1, June 1999.
11. Constantinides, G., F.-J. Ulm. The effect of two types of C-S-H on the elasticity of cement-based materials: results from nanoindentation and micromechanical modeling, *Cement and Concrete Research*.
12. Филимонова, Н.В., Тур, В.В. Приложения к расчету базовых параметров обобщенной модели расширяющейся цементной системы // Вестник БГТУ. Архитектура и строительство. – 2006 г. – №1.
13. Bažant, Z.P., A.B. Hauggaard, S. Baweja, Fr.-J. Ulm. Microprestress-Solidification Theory for Concrete Creep. *Journal of Engineering Mechanics – Nov.* 1997.
14. Тур, В.В., Филимонова, Н.В. Обобщенная модель собственных деформаций расширяющейся цементной системы / Строительная наука и техника. №1. – Мн. – 2006 г.
15. Philimonova, N. Theoretical assumption for computer simulation of expansive cement microstructure development // *Proceeding of the International Conference "Construction and Architecture"*/ Edited by Khrustalev B.M., Leonovich S.N., V. Schneider. – Minsk, 2003. – pp.121-139

16. E.J. Garboczi and D.P. Bentz. Computer Simulation and Percolation Theory Applied to Concrete. NIST, 1999.

17. Bentz, D.P., Garboczi, E.J., and Martys, N.S. "Application of Digital-Image-Based Models to Microstructure, Transport Properties, and Degradation of Cement-Based Materials," in *The Modelling of Microstructure and Its Potential for Studying Transport Properties and Durability*, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, 167-185, 1996.

18. <http://ciks.cbt.nist.gov> – сайт «лаборатории виртуальных цементов и бетонов» (*Virtual Cement and Concrete Testing Laboratory*).