УДК 691.32

МНОГОУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ГОМОГЕНИЗАЦИИ ЖЕСТКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГЕТЕРОГЕННОЙ СТРУКТУРЫ БЕТОННОГО КОМПОЗИТА

В. В. Кравченко

К. т. н., доцент кафедры технологии бетона и строительных материалов, Брестский государственный технический университет, Брест, Беларусь, e-mail: vvkravchenko@g.bstu.by

Реферат

Прогнозирование жесткостных характеристик бетона является нерешенной проблемой современной теории бетоноведения, что обусловлено его сложной гетерогенной структурой. Существующие подходы основаны на многоуровневом представлении его структуры и методах теории эффективной среды, принимая допущение о том, что все фазы бетонного композита обладают сферической формой и упругим поведением. В статье представлена усовершенствованная многоуровневая модель гомогенизации гетерогенной структуры бетонного композита, в основе которой лежит представление структуры цементного камня в виде воксельной модели, для которой применяют численные методы гомогенизации, позволяющие учитывать произвольную геометрическую форму фаз и нелинейное поведение фазы продуктов гидратации, а также итерационный подход на основе дифференциальной схемы теории эффективной среды при определении жесткостных характеристик бетонного композита, позволяющий наиболее полно учитывать особенности его структуры.

Ключевые слова: бетон, цементный камень, гетерогенная структура, многоуровневая схема, гомогенизация.

Введение

Существенное влияние на долговечность бетона оказывает процесс возникновения и развития в его структуре дефектов в результате внешнего силового воздействия или развития собственных деформаций усадки цементного камня в условиях различного рода ограничений, самым распространенным из которых являются заполнители для бетона. Для прогнозирования собственных деформаций бетона прежде всего необходимо получить представление о его жесткостных характеристиках, к которым относят модуль упругости Юнга, коэффициент Пуассона и др.

Определение жесткостных характеристик бетона является нерешенной проблемой современной теории бетоноведения, поскольку бетон, на первый взгляд, представляет классический композиционный материал, структуру которого можно представить в виде цементной матрицы (называемая в технической литературе – цементным камнем) с распределенными в ней включениями в виде зерен заполнителя. Однако цементная матрица сама является поликристаллическим композитом, структура которой формируется в процессе гидратации вяжущего. Другой ключевой особенностью цементного камня является то, что его основная фаза – гидросиликат кальция – обладает ярко выраженным вязкоупругим поведением, что является основной предполагаемой причиной ползучести в бетонных композитах.

Существующие подходы к определению жесткостных характеристик бетона включают две концепции [1]:

1) Структуру бетона представляют в виде многоуровневой (также называемой масштабной или иерархической, англ. – multiscale) схемы, получаемой разделением его структуры на отдельные гетерогенные уровни, определяемые морфологией фаз входящих в их состав.

2) На каждом гетерогенном уровне определяют так называемые эффективные характеристики, используя аналитическую гомогенизацию, включающей методы теории эффективной среды (англ. – Effective Medium Theory) [2] с последующей передачей информации от нижележащего гетерогенного уровня к вышележащему.

Для определения эффективного тензора жесткости ($\mathbb{C}_{eff}$) в методах аналитической гомогенизации используют следующую зависимость [3]:

$$\mathbb{C}_{\boldsymbol{eff}} = (\textstyle\sum_{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{f_r}\, \mathbb{C}_{\boldsymbol{r}} : \mathbb{A}_{\boldsymbol{r}}) : (\sum_{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{f_r}\, \mathbb{A}_{\boldsymbol{r}})^{-\mathbf{1}}, \qquad (1)$$

где $\mathbb{C}_r$ – тензор жесткости 4-го ранга -ой фазы ($r = 1,2,\ldots,n$); f_r – объемное содержание (концентрация) r-ой фазы в репрезентативном объеме; $\mathbb{A}_r$ – тензор 4-го ранга концентрации деформаций r-ой фазы; « : » – двойное скалярное произведение (свертка) тензоров.

В наиболее распространенных методах аналитической гомогенизации (например, Mori-Tanaka Model и Self-Consistent Model) тензор концентрации деформаций ($\mathbb{A}_r$) определяют из решения задачи Эшелби для эллипсоидного упругого включения (англ. – Eshelby's inclusion problem) [2].

В рамках представленного подхода существует достаточно большое количество расчетных моделей, в большинстве из которых для упрощения вычислений принято допущение, что все фазы бетонного композита на каждом из его гетерогенных уровней обладают сферической формой.

Это существенное допущение противоречит как модели микроструктуры цементного камня, по которой частицы твердой фазы, состоящей из зерен цемента и продуктов гидратации, скорее характеризуются произвольной геометрической формой, так и бетонного композита, в которой для зерен крупного заполнителя из горных пород, получаемых путем дробления, больше подходит эллипсоидная форма.

В статье рассмотрены основные принципы многоуровневой модели гомогенизации гетерогенной структуры бетонного композита, направленные на совершенствование существующих подходов к определению его эффективных жесткостных характеристик.

Многоуровневая схема бетонного композита

В данной работе принята трехуровневая схема бетонного композита, состоящая их трех гетерогенных уровней:

1) Уровень 1: продукты гидратации и негидратированный цемент, состоящий из клинкерных минералов.

2) Уровень 2: цементный камень, состоящий из продуктов гидратации и негидратированного цемента, образующих частицы твердой фазы, поровое пространство между которыми заполнено водой и газообразной фазой.

3) Уровень 3: бетон, состоящий из цементного камня, зерен заполнителя и транзитной зоны вокруг них.

Принципы гомогенизации структуры бетонного композита

Уровень 1

На данном уровне наиболее подходящим является метод Self-Consistent Model [2], который применяют для поликристаллических структур, не обладающих ярко выраженной фазой матрицы, что соответствует структуре продуктов гидратации и негидратированного цемента.

Уровень 2

Цементный камень обладает чрезвычайно сложной неоднородной структурой из частиц твердой фазы в виде зерен цемента и образующихся на их поверхности продуктов гидратации, обладающих произвольной геометрической формой и распределяемых в его объеме случайным образом, и порового пространства между ними, заполненного жидкой и газообразной фазой.

Гомогенизация характеристик такой структуры может быть выполнена методами численной гомогенизации, включающей метод на основе конечно-элементного анализа [4], и метод на основе быстрого преобразования Фурье [5], одно из преимуществ которых – не ограничение геометрической формой включений, в отличии от методов аналитической гомогенизации.

Основным препятствием к использованию данных методов является проблема репрезентативного объема цементного камня, представляемого в виде структурно-геометрической модели, называемой элементарной ячейкой (англ. – unit cell), содержащей данные не только о геометрических характеристиках фаз, но и их расположении в объеме, что является довольно сложной задачей для структуры цементного камня.

Эффективным решением обозначенной проблемы репрезентативного объема является представление структуры цементного камня в виде дискретной воксельной модели [6], преимуществом которой является возможность воспроизводить произвольную геометрическую форму включений в виде набора вокселов в заданной области анализируемого объема.

Для метода на основе конечно-элементного анализа на основе воксельной модели цементного камня генерируют конечно-элементную сетку, преобразованием каждого воксела может в шестигранный восьмиузловой изопараметрический конечный элемент (англ.– hexahedron) с тремя степенями свободы в каждом узле при определении перемещений и одной степенью свободы при определении напряжений. В методе на основе преобразования Фурье воксельную модель преобразуют в числовые массивы, содержащие значения механических характеристик, поэтому для данного метода не требуется конечно-элементная сетка, что является одним из его преимуществ.

Вариационная (слабая) формулировка для метода на основе конечно-элементного анализа может быть получена из принципа возможных перемещений [7]:

$$\int_\Omega \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\tilde{\boldsymbol{u}}) : \mathbb{C}(\boldsymbol{x}) : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\delta}\tilde{\boldsymbol{u}}) \boldsymbol{d\Omega} = -\int_\Omega \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} : \mathbb{C}(\boldsymbol{x}) : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\delta}\tilde{\boldsymbol{u}}) \boldsymbol{d\Omega}; \quad \forall(\tilde{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{\delta}\tilde{\boldsymbol{u}}) \in \boldsymbol{H}^{\boldsymbol{1}}(\boldsymbol{\Omega}), \tag{2}$$

где $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}$ – тензор 2-го ранга макроскопических деформаций, постоянных в любой точке репрезентативного объема Ω; $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ – тензор 2-го ранга микроскопических деформаций, обусловленных периодическими локальными флуктуациями $\tilde{\boldsymbol{u}}$, возникающих в репрезентативном объеме вследствие неоднородности фаз; $\boldsymbol{x}$ – радиус-вектор произвольной точки в репрезентативном объеме.

Базовым уравнением для метода на основе преобразования Фурье является уравнение Липпманна-Швингера [5]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \mathbb{\Gamma}_{\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{x}) * \boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x}), \tag{3}$$

где $\mathbb{\Gamma}_0$ – оператор (тензор 4-го ранга) Грина; $\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{x})$ – поляризационный тензор 2-го ранга, соответствующий напряжениям, возникающим вследствие неоднородности среды « $*$ » – операция свертки функций.

Уравнение (3) представляет собой нелинейное интегральное уравнение, для решения которого используют итерационные методы и преобразование Фурье для вычисления свертки функций:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\boldsymbol{k+1}}(\boldsymbol{w}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \hat{\mathbb{\Gamma}}_{\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{w}) : \hat{\boldsymbol{\tau}}^{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{w}), \tag{4}$$

где $\boldsymbol{w}$ – частота в пространстве Фурье; k – итерация линеаризации.

Методы численной гомогенизации позволяют также учитывать нелинейное поведение фазы продуктов гидратации, для которой напряженное-деформированное состояние описывается интегралом Стилтьеса [8].

Для решения этой задачи в методе на основе конечно-элементного анализа определяют еще одну линейную форму, добавляя ее к правой части вариационной постановки (2), в которой интеграл Стилтьеса представлен в численном виде, используя метод трапеций:

$$\begin{gathered}\boldsymbol{L}^{\boldsymbol{S}}(\boldsymbol{\delta}\tilde{\boldsymbol{u}}) = -\int_\Omega \left(\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{i-1}} + (\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{i-1}} + \boldsymbol{h}) : \mathbb{J}^{-\boldsymbol{1}}_{\boldsymbol{i,i-1/2}}\right) : \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\delta}\tilde{\boldsymbol{u}})\, \boldsymbol{d\Omega}; \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{hp}}; \\ \boldsymbol{h} = \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{i-1}}\left[\left(\mathbb{J}_{\boldsymbol{i,j-1/2}} - \mathbb{J}_{\boldsymbol{i-1,j-1/2}}\right) : \Delta\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{j}}\right],\end{gathered} \tag{5}$$

где Ω_{hp}, – подобласть конечно-элементной сетки, соответствующая фазе, продуктов гидратации.

В методе на основе преобразования Фурье она решается переопределением исходного выражения для поляризационного тензора, добавляя в него аналогичное численное представление интеграла Стилтьеса, получаемого методом трапеций:

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\tau}^{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{\sigma}^{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{i}} - \mathbb{C}_{\boldsymbol{0}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{i}} = \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{i-1}} + \Delta\boldsymbol{\sigma}^{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{i}} - \mathbb{C}_{\boldsymbol{0}} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{i}}; \\ \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{0}; \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{\boldsymbol{0}}_{\boldsymbol{i}} = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}; \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\Omega}_{\boldsymbol{hp}}; \\ \Delta\boldsymbol{\sigma}^{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{i}} = \left[\boldsymbol{\varepsilon}^{\boldsymbol{k}}_{\boldsymbol{i}} - \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{i-1}} - \sum_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{i-1}}\left(\mathbb{J}_{\boldsymbol{i,j-1/2}} - \mathbb{J}_{\boldsymbol{i-1,j-1/2}}\right) : \Delta\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{j}}\right] : \left(\mathbb{J}_{\boldsymbol{i,i-1/2}}\right)^{-\boldsymbol{1}}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{0},\end{gathered} \tag{6}$$

где Ω_{hp}, – подобласть воксельного объема, соответствующая фазе, продуктов гидратации.

Уровень 3

В современном представлении бетон – трехфазный композит, состоящий из цементного камня, зерен заполнителя и транзитной зоны цементного камня вокруг них. Однако заполнитель в большинстве случаев состоит из нескольких видов с разными жесткостными характеристиками (например, обычно его разделяют на мелкий и крупный заполнитель) в виде зерен различного размера и формы, в результате чего бетонный композит фактически является многофазовой системой.

Одним из наиболее эффективных подходов к определению жесткостных характеристик такой системы состоит в представлении ее в виде двухфазной композитной системы «матрица-включение».

Поскольку транзитная зона цементного камня образуется только на границе между зернами заполнителя и цементным камнем, ее можно рассматривать как неотъемлемую часть заполнителя в виде оболочки вокруг каждого зерна, вместе с ним образующее композитное включение – эффективную частицу. На данном уровне принято допущение, что зерна мелкого заполнителя рассматривают как сферические включения, а зерна крупного заполнителя – как эллипсоидные. Другое принятое допущение предполагает, что транзитная образует равномерный слой вокруг каждой частицы заполнителя, который пропорционален ее объему. Соответственно для определения эффективных жесткостных характеристик сферических эффективных частиц используют метод Generalized Self-Consistent model [2], а для эллипсоидных эффективных частиц – Mori-Tanaka Model [2].

В результате исходная система преобразуется к композитной системе «матрица – эффективные частицы». Далее применяют итерационный метод, по которому на каждой i-й итерации определяют эффективные жесткостные характеристики двухфазной композитной системы «матрица – эффективная частица i-го размера». Гомогенная среда с эффективными жесткостными характеристиками, определенными на i–й итерации, является фазой матрицы для i+1-й итерации. Соответственно эффективные жесткостные характеристики для композита в целом получают на последней итерации. Для первой итерации матрицей является – цементный камень. Количество итераций определяют из зернового состава заполнителя, которое подбирают таким образом, чтобы содержание каждой фракции не превышало 5 %, что обусловлено проблемой единичной концентрации включений (англ. – dilute concentration). Итерационное разделение позволяет исключить совместное влияние эффективных частиц разных фракций на напряженно-деформированное состояние композитной системы.

Для двухфазных композитных систем, в которых включение содержится в единичной концентрации, одним из наиболее подходящих методов для определения эффективных характеристик является дифференциальная схема (англ. – differential scheme) теории эффективной среды [2]:

$$\frac{d\mathbb{C}_{eff}}{dc} = \frac{1}{1-c}\left(\mathbb{C}_{inc} - \mathbb{C}_{eff}\right) : \mathbb{A}_{inc}, \tag{7}$$

где $\mathbb{C}_{inc}$ – тензор жесткости 4-го ранга i-ой эффективной частицы; $\mathbb{A}_{r}$ – тензор 4-го ранга концентрации деформаций i-ой эффективной частицы; с – концентрация эффективных частиц i-ой фракции.

Выводы

Представлена усовершенствованная многоуровневая модель гомогенизации гетерогенной структуры бетонного композита, в основе которой лежат следующие основные принципы:

1) Структуру цементного камня представляют в виде воксельной модели, для которой применяют численные методы гомогенизации, что позволяет учитывать произвольную геометрическую форму его фаз и нелинейное поведение фазы продуктов гидратации.

2) Для гомогенизации бетонного композита применяют итерационный подход на основе дифференциальной схемы теории эффективной среды, при котором количество итераций определяют из зернового состава заполнителя, подбирая их таким образом, чтобы содержание каждой фракции не превышало 5 %. Такой подход позволяет исключить совместное влияние частиц разных фракций на напряженно-деформированное состояние композитной системы.

Список использованных источников

1. Olivier, B. A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials / B. Olivier, F.-J. Ulm, E. Lemarchand // Cement and Concrete Research. – 2003. – Vol. 33, iss. 9. – P. 1293–1309. – DOI: 10.1016/S0008-8846(03)00039-5.

2. Dvorak, G. J. Micromechanics of Composite Materials / G. J. Dvorak. – New York : Springer Science & Business Media, 2012. – 460 p. – DOI: 10.1007/978-94-007-4101-0.

3. Zaoui, A. Continuum micromechanics: survey / A. Zaoui // Journal of Engineering Mechanics. – 2002. – Vol. 128, iss. 8. – P. 808–816. – DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(2002)128:8(808).

4. Yvonnet, J. Computational Homogenization of Heterogeneous Materials with Finite Elements / J. Yvonnet. – New York : Springer Cham, 2019. – 223 p. – DOI: 10.1007/978-3-030-18383-7.

5. Lucarini, S. FFT based approaches in micromechanics: fundamentals, methods and applications / S. Lucarini, M. V. Upadhyay, J. Segurado // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2022. – Vol. 30, iss. 023002. – P. 1–96. – DOI: 10.1088/1361-651X/ac34e1.

6. Кравченко, В. В. Моделирование микроструктуры цементного камня на основе воксельной модели / В. В. Кравченко // Вестник БрГТУ. – 2024. – № 1. – С. 14–18. – DOI: 10.36773/1818-1112-2024-133-1-14-18.

7. Michel, J. C. Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach / J. C. Michel, H. Moulinec, P. Suquet // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 1999. – Vol. 172, iss. 1–4. – P. 109–143. – DOI: 10.1016/S0045-7825(98)00227-8.

8. Bažant, Z. P. Creep and Hygrothermal Effects in Concrete Structures / Z. P. Bažant, M. Jirásek. – Dordrecht : Springer Science, 2018. – 918 p. – DOI: 10.1007/978-94-024-1138-6.