Source: Kravchenko V. Modeling of the Modulus of Elasticity of the Cement-Based Composite within Internal Curing. In: Contemporary Issues of Concrete and Reinforced Concrete: Collected Research Papers. Minsk. Institute BelNIIS. Vol. 9. 2017. pp. 250–278. https://doi.org/10.23746/2017-9-16

Кравченко Валентин Викторович, старший преподаватель, УО «Брестский государственный технический университет», Брест (Беларусь)

Valentin Kravchenko, senior lecturer, Brest State Technical University, Brest (Belarus)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЖЕСТКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЦЕМЕНТНЫХ КОМПОЗИТНЫХ СИСТЕМ В РАМКАХ КОНЦЕПЦИИ «ВНУТРЕННЕГО УВЛАЖНЕНИЯ»

MODELING OF THE MODULUS OF ELASTICITY OF THE CEMENT-BASED COMPOSITE WITHIN INTERNAL CURING

АННОТАЦИЯ

В материале статьи рассмотрены основные положения предлагаемой расчетной модели, позволяющей прогнозировать жесткостные характеристики цементных композитных систем в области низких водоцементных отношений, содержащих предварительно насыщенный пористый заполнитель в рамках концепции «внутреннего увлажнения». В основе предлагаемой модели лежит разделение структуры цементной композитной системы на элементарные гетерогенные уровни, на каждом из которых определяют ее эффективные жесткостные характеристики, используя методы гомогенизации теории эффективной среды и дифференциальной теории эффективной среды. Разделение цементной композитной системы на элементарные гетерогенные уровни представлено на ее многоуровневой схеме. Содержащийся в цементной композитной системе предварительно насыщенный пористый заполнитель выделен в отдельный гетерогенный уровень, что позволяет определять значения ее эффективных жесткостных характеристик при различных

составах композита, например, цементной композитной системы, состоящей из цементной матрицы и только пористого заполнителя. На жесткостные характеристики цементных композитных систем значительное влияние оказывают гранулометрический состав заполнителя и характеристики транзитной зоны, однако существующие методы гомогенизации, как правило, не в полной мере учитывают эти характеристики в своих решениях. Для определения эффективных жесткостных характеристик цементных композитных систем предложен последовательный способ их определения, основанный на методе новой дифференциальной теории эффективной среды. Предложенный способ позволяет учитывать как гранулометрический состав заполнителя, так и характеристики транзитной зоны при определении эффективных жесткостных характеристик. Представлены результаты верификации предлагаемой расчетной модели.

ABSTRACT

In this paper presents proposed model for predicting the modulus of elasticity of cement composite systems with low water/cement ratio within internal curing using presoaked lightweight aggregates are considered. The proposed model based is the separation of the microstructure composite into elementary heterogeneous levels, on each of which is determined aging elasticity, using methods of homogenization of the effective medium theory and the differential effective medium theory. The separation cement-based composite into elementary heterogeneous levels are representation in the multiscale scheme The presoaked lightweight aggregates contained in the cement-based composite is separated into a particular heterogeneous level, which makes possible to determine effective elastic modulus for different composite, for example, composite including cement paste and lightweight aggregate only. The elastic modulus of cement-based composite is significantly influenced by the varying size of the aggregate and the characteristics of the interfacial transition zone, however, the existing methods of homogenization, as a rule, do not fully take into account these parameters. For determine the effective elastic modulus of cement based composite, a step by step method

are proposed based on the new differential effective medium theory. The proposed method predicts with high accuracy of the effective elastic modulus with take into account both the varying size of the aggregate and the characteristics of the interfacial transition zone. Also presented the results of verification of the proposed model.

Ключевые слова: цементная матрица, бетонный композит, многоуровневая схема, гидратация цемента, порог перколяции.

Keywords: cement paste, concrete, multiscale scheme, cement hydration, percolation threshold.

ВВЕДЕНИЕ

В соответствии с терминологией ACI Committee 308 под «внутренним увлажнением» (англ.–internal curing) подразумевается процесс, при котором гидратация цемента происходит с участием дополнительной воды, доступной для реакций гидратации, но не являющейся частью воды затворения [1].

Количество дополнительной воды должно быть достаточным для заполнения объема обезвоженных пор цементного камня, образующихся в процессе гидратации, для предотвращения проявления процесса «самовысыхания» его структуры (англ.–self-desiccation).

В рамках концепции «внутреннего увлажнения» требуемое количество дополнительной воды резервируется в специальном компоненте, который служит в качестве так называемого «увлажняющего агента».

При изготовлении бетонной смеси «увлажняющий агент» распределяется в ее структуре, создавая таким образом внутренний источник воды, которая затем в процессе твердения бетона активно мигрирует в его поровую среду, заполняя водой образующиеся обезвоженные поры.

Наиболее часто в качестве «увлажняющего агента» используются мелкие фракции природных или искусственных легких пористых заполнителей, которые адсорбируют требуемое количество дополнительной воды в своей поровой структуре.

При расчете концентрации пористого заполнителя, который будет содержать необходимое количество дополнительной воды, в первую очередь следует ориентироваться на его характеристики водопоглощения, но при этом также необходимо принимать во внимание также жесткостные характеристики, поскольку жесткостные характеристики пористого заполнителя гораздо ниже, чем у плотного заполнителя.

При низком водоцементном отношении, а также при незначительном водопоглощении используемого пористого заполнителя его расчетная концентрация, необходимая для насыщения пор цементного камня дополнительной водой, может быть нерационально высокой с точки зрения получаемых жесткостных характеристик композита.

Таким образом, разработка расчетной модели для прогнозирования жесткостных характеристик цементных композитных систем, содержащих предварительно насыщенный пористый заполнитель, является актуальной задачей в рамках концепции «внутреннего увлажнения», позволяющая получить композит не только с внутренним увлажнением его структуры, но и с заданными жесткостными характеристиками.

МНОГОУРОВНЕВАЯ СХЕМА ЦЕМЕНТНОЙ КОМПОЗИТНОЙ СИСТЕМЫ

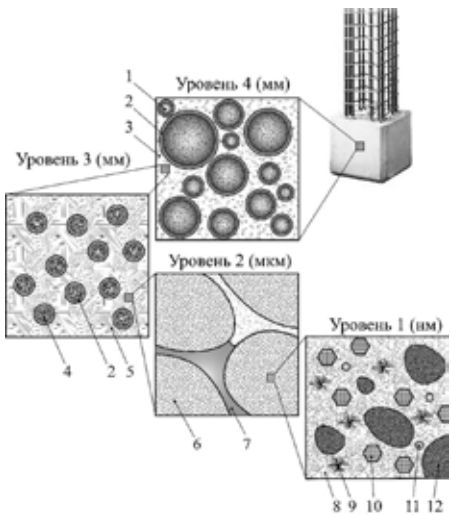
Цементные композитные системы относят к гетерогенным материалам со сложной микроструктурой, для которых оценка жесткостных характеристик эффективно решается с помощью различных методов гомогенизации характеристик, основанных на положениях механики сплошных сред. С этой целью рассматриваемую композитную систему обычно разделяют на элементарные гетерогенные уровни, на которых ее структура условно рассматривается как однородная, что позволяет при рассмотрении напряженно-деформированного состояния на элементарном гетерогенном уровне применять положения механики сплошных сред.

Многоуровневая схема, включающая описание или схематическое представление каждого гетерогенного уровня с указанием

размеров фаз, их идентификацию, морфологию и расположение получила название – представление композитной системы.

Принятое представление цементной композитной системы включает следующие гетерогенные уровни (рис. 1):

- уровень 1 – твердая фаза цементной матрицы, образованная продуктами реакций гидратации цемента: гидросиликатом кальция, гидроксидом кальция, эттрингитом, моносульфоалюминатом кальция, гидрогранатом катоитом, зернами непрореагировавшего цемента, гипса, а также при наличии – минеральных добавок;
- уровень 2 – цементная матрица, включает твердую фазу и капиллярную пористость;
- уровень 3 – цементная композитная матрица, включает цементную матрицу, транзитную зону и гранулы пористого заполнителя;
- уровень 4 – уровень бетонного композита, включает композитную цементную матрицу, транзитную зону и зерна плотного заполнителя.



1 – плотный заполнитель, 2 – транзитная зона, 3 – композитная цементная матрица, 4 – пористый заполнитель, 5 – цементная матрица, 6 – твердая фаза цементной матрицы, 7 – капиллярная пористость, 8–11 – продукты гидратации (гидросиликат кальция, гидроксид кальция, эттрингит, моносульфоалюминат кальция, гидрогранат катоит), 12 – зерна непрореагировавшего цемента

Рисунок 1. Представление цементной композитной системы

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЖЕСТКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НА УРОВНЕ ТВЕРДОЙ ФАЗЫ ЦЕМЕНТНОЙ МАТРИЦЫ

Основным продуктом гидратации цемента является гидросиликат кальция, имеющий слоистое строение, который принято называть цементным гелем. Структура цементного геля неоднородна и по данным [2] включает две разные морфологии, которые принято называть цементным гелем высокой и низкой плотности, имеющим различные физико-механические характеристики.

Поскольку цементный гель состоит из частиц низкой и высокой плотности, целесообразно предварительно определить эффективные жесткостные характеристики для всей фазы в целом. Аналогичную процедуру можно провести также в отношении фазы непрореагировавшего цемента, которая состоит из клинкерных минералов.

Таким образом, эффективные жесткостные характеристики на данном уровне можно определить поэтапно в следующей последовательности:

- определяют эффективные жесткостные характеристики цементного геля;
- определяют эффективные жесткостные характеристики непрореагировавшего цемента;
- определяют эффективные жесткостные характеристики твердой фазы цементной матрицы.

Для двухфазных композитных систем с морфологией структуры «матрица – включение» эффективные жесткостные характеристики могут быть определены методом Mori-Tanaka (MT) [3, 4]:

$$K_{\text{hom}} = K_m + \frac{f_{inc} \cdot \left(K_{inc} - K_m\right) \cdot K_m}{\left(1 - f_{inc}\right) \cdot \left(K_{inc} - K_m\right) \cdot \alpha + K_m}; \quad (1)$$

$$G_{\text{hom}} = G_m + \frac{f_{inc} \cdot \left(G_{inc} - G_m\right) \cdot G_m}{\left(1 - f_{inc}\right) \cdot \left(G_{inc} - G_m\right) \cdot \beta + G_m}, \quad (2)$$

где K_{hom} – эффективный модуль объемных деформаций композитной системы;

G_{hom} – эффективный модуль сдвига композитной системы;

K_m и K_{inc} – соответственно модуль объемных деформаций фазы матрицы и включения в композитной системе;

G_m и G_{inc} – соответственно модуль сдвига фазы матрицы и включения в композитной системе;

f_{inc} – объемная доля фазы включения в композитной системе, [–];

α и β – коэффициенты, учитывающие геометрическую форму фазы включения в композитной системе.

Для композитных систем, имеющих многофазную неупорядоченную структуру, фазы в которой распределены случайным образом, эффективные жесткостные характеристики рекомендуется определять методом Self-Consistent Scheme (SCS) [3, 4]:

$$K_{\text{hom}} = \sum_r f_r \cdot K_r \cdot \left(1 + \alpha \cdot \left(\frac{K_r}{K_0} - 1\right)\right)^{-1} \cdot \left[\sum_r f_r \cdot \left(1 + \alpha \cdot \left(\frac{K_r}{K_0} - 1\right)\right)^{-1}\right]^{-1}; \quad (3)$$

$$G_{\text{hom}} = \sum_r f_r \cdot G_r \cdot \left(1 + \beta \cdot \left(\frac{G_r}{G_0} - 1\right)\right)^{-1} \cdot \left[\sum_r f_r \cdot \left(1 + \beta \cdot \left(\frac{G_r}{G_0} - 1\right)\right)^{-1}\right]^{-1}, \quad (4)$$

где f_r объемная доля каждой r-ой фазы включения в композитной системе;

K_r и G_r – соответственно модуль объемных деформаций и модуль сдвига каждой r-ой фазы включения в композитной системе;

K_0 и G_0 – соответственно модуль объемных деформаций и модуль сдвига базовой среды композитной системы.

Для включения, имеющего сферическую форму, коэффициенты α и β определяются по зависимостям указанным в [3, 4].

Для определения эффективных жесткостных характеристик цементного геля применяют метод МТ на основе зависимостей (1) и (2), где в качестве матрицы выступают частицы цементного геля высокой плотности, а в качестве фазы включения – частицы цементного геля низкой плотности.

Для определения эффективных жесткостных характеристик фазы непрореагировавшего цемента применяют метод SCS, на основе зависимостей (3) и (4), где в качестве базовой среды

выступает фаза непрореагировавшего цемента, а в качестве фаз включения – его клинкерные минералы.

Для определения эффективных жесткостных характеристик твердой фазы цементной матрицы применяют метод SCS, на основе зависимостей (3) и (4), где в качестве базовой среды выступает твердая фаза цементной матрицы, а в качестве фаз включения – продукты, образованные в ходе реакций гидратации, непрореагировавший цемент, гипс и минеральные добавки.

Объемную долю продуктов гидратации, клинкерных минералов, гипса и минеральных добавок определяют на основании стехиометрических расчетов по уравнениям химических реакций в принятой модели гидратации цемента. Объемная доля цементного геля низкой плотности в общем объеме цементного геля определяют по методике [2].

Модуль сдвига и модуль объемных деформаций для каждой фазы включения определяют по следующим зависимостям:

$$K = \frac{E}{3 \cdot (1 - 2 \cdot \nu)}; G = \frac{E}{2 \cdot (1 + \nu)}, \quad (5)$$

где K – модуль объемных деформаций;

G –модуль сдвига;

E – модуль упругости;

ν – коэффициент Пуассона.

Значения модуля упругости и коэффициента Пуассона для каждой отдельной фазы принимают:

- для портландцементных клинкерных минералов – по данным [4–6];
- для гипса – по данным [7];
- для однокальциевого алюмината – по данным [8];
- для продуктов гидратации – по данным [9–11];
- для минеральных добавок (зола уноса, микрокремнезем, метакаолин) – по данным [12–14].

МОДЕЛЬ ГИДРАТАЦИИ ЦЕМЕНТА

Принятая модель гидратации цементных систем основана на положениях моделей гидратации цементных систем, предложенных в работах [2, 7, 15, 16].

Процесс гидратации цементных систем в принятой модели описывается следующими химическими реакциями, приведенными в табл. 1.

Таблица 1

Модель гидратации цементных систем

Состав цементной системы	Стадия		Химическая реакция	Источник
Портландцемент–вода	–	1	$2 \cdot C_3S + 10{,}6 \cdot H \rightarrow C_{3,4}S_2H_8 + 2{,}6 \cdot CH$	[2]
	–	2	$2 \cdot C_2S + 8{,}6 \cdot H \rightarrow C_{3,4}S_2H_8 + 0{,}6 \cdot CH$	[2]
	1	3	$C_3A + 3 \cdot C\bar{S}H_2 + 26 \cdot H \rightarrow C_6A\bar{S}_3H_{32}$	[2]
	2	4	$2 \cdot C_3A + C_6A\bar{S}_3H_{32} + 4 \cdot H \rightarrow 3 \cdot C_4A\bar{S}H_{12}$	[2]
	3	5	$C_3A + CH + 12 \cdot H \rightarrow C_4AH_{13}$	[2]
	–	6	$C_4AF + 10 \cdot H \rightarrow C_3AH_6 + CH + 2 \cdot FH_3$	[7]
+Глиноземистый цемент	–	7	$3 \cdot CA + 9 \cdot H \rightarrow C_3AH_6 + 2 \cdot AH_3$	[15]
+Пуццолановые минеральные добавки	–	8	$2 \cdot S + 3 \cdot CH \rightarrow C_3S_2H_3$	[16]
	–	9	$2 \cdot A + 3 \cdot CH + 9 \cdot H \rightarrow C_3AH_6 + AH_3$	[16]

Для прогнозирования степени гидратации портландцементных клинкерных минералов используется модель, предложенная в работе [17] и получившая развитие в работе [18]. Для прогнозирования степени гидратации однокальциевого алюмината используется модель, предложенная в работе [19].

Используя модель гидратации цемента, можно определить фазовый состав структуры цементной системы в произвольный момент времени, который обычно представляется в виде диаграммы фазовых переходов (рис. 2).

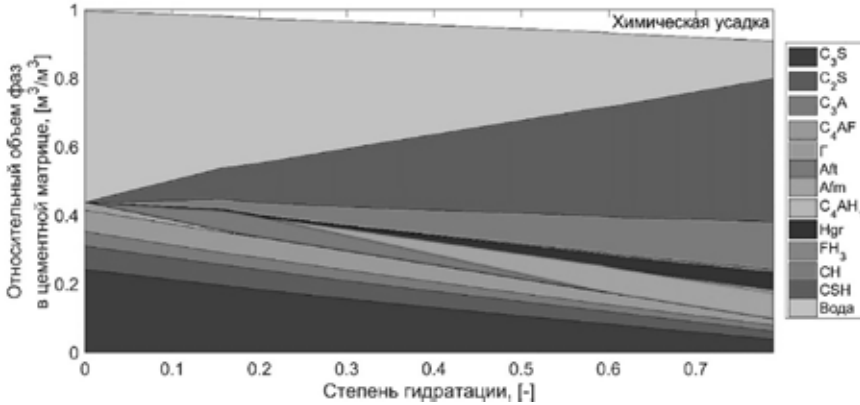


Рисунок 2. Диаграмма фазовых переходов в системе «портландцемент – вода» при В/Ц=0,4 и температуре твердения 20 °С (время твердения 0..100 сут., определено по исходным данным [20])

ПОРОГ ПЕРКОЛЯЦИИ ТВЕРДОЙ ФАЗЫ ЦЕМЕНТНОЙ МАТРИЦЫ

Порог перколяции отражает состояние, когда между частицами твердой фазы начинают появляться первые контакты, что обуславливает формирование начальной жесткости структуры цементной матрицы. В общем случае порог перколяции зависит от водоцементного отношения.

Однако при определении эффективных жесткостных характеристик твердой фазы цементной матрицы методом SCS порог перколяции не учитывается, что приводит к некорректным результатам расчета эффективных жесткостных характеристик, когда ниже порога перколяции, твердая фаза цементной матрицы будет обладать значительными жесткостными характеристиками.

Для корректировки эффективных жесткостных характеристик можно применить следующую математическую модель, предложенную в работе [21]:

$$K_s = \begin{cases} K_s' \cdot \left(\dfrac{\alpha - \alpha_{per}}{\alpha_{\max} - \alpha_{per}} \right)^{\frac{2}{3}}, & \alpha > \alpha_{per} \\ 0, & \alpha < \alpha_{per} \end{cases}; \; G_s = \begin{cases} G_s' \cdot \left(\dfrac{\alpha - \alpha_{per}}{\alpha_{\max} - \alpha_{per}} \right)^{\frac{2}{3}}, & \alpha > \alpha_{per} \\ 0, & \alpha < \alpha_{per} \end{cases}, \quad (6)$$

где K_s, G_s – соответственно эффективный модуль объемных деформаций и сдвига твердой фазы цементной матрицы;

K_s', G_s' – соответственно эффективный модуль объемных деформаций и сдвига твердой фазы цементной матрицы, определенный методом SCS;

α – степень гидратации цементной системы в произвольный момент времени;

α_{max}, α_{per} – соответственно максимальная степень гидратации и порог перколяции.

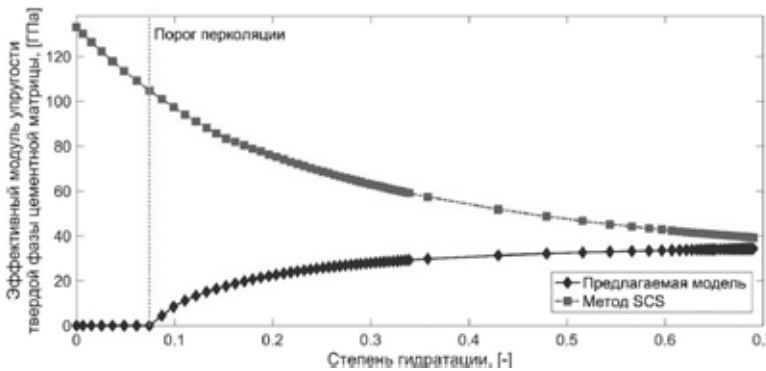


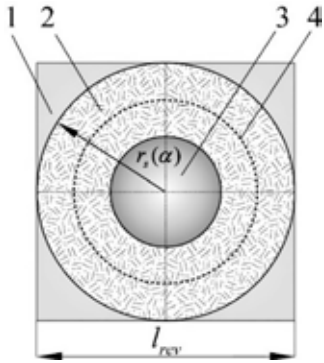
Рисунок 3. Изменение эффективного модуля упругости твердой фазы цементной матрицы в процессе твердения при В/Ц=0,35 (время твердения 0..28 сут., определено по исходным данным [22])

Для определения порога перколяции твердой фазы цементной матрицы необходимо рассмотреть геометрическую модель ее структуры.

Геометрическая модель структуры цементной матрицы основана на упорядоченном расположении зерен цемента в единице ее объема, при которой зерна располагаются друг от друга на одинаковом расстоянии, равном длине ребра элементарной кубической ячейки цементной матрицы.

Элементарная кубическая ячейка цементной матрицы – кубическая ячейка, в центре которой располагается зерно цемента, имеющее сферическую форму. В начальный момент времени зерно цемента полностью окружено водой затворения. В процессе

гидратации вокруг зерна цемента образуется сферическая оболочка из продуктов гидратации (рис. 4).



1 – вода затворения, 2 – зерно цемента,
3 – твердая фаза цементной матрицы,
4 – начальная граница зерна цемента

Рисунок 4. Элементарная кубическая ячейка цементной матрицы

В процессе гидратации относительный объем твердой фазы цементной матрицы, исходя из принятой геометрической модели ее структуры, составит:

$$V_s = \frac{4 \cdot \pi \cdot r_s^3}{3 \cdot l_{rev}^3} \tag{7}$$

где r_s – радиус сферы твердой фазы;

l_{rev} - длина ребра кубический ячейки.

Условием перколяции твердых фаз в цементной матрице, исходя из принятой геометрической модели ее структуры, является следующее равенство:

$$r_s(\alpha_{per}) = \frac{1}{2} \cdot l_{rev}, \tag{8}$$

Подставляя (17) в (16) получим, что относительный объем твердой фазы цементной матрицы в момент перколяции составит:

$$V_s(\alpha_{per}) = \frac{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot l_{rev}\right)^3}{l_{rev}^3} = \frac{\pi}{6}. \tag{9}$$

Значение порога перколяции можно определить путем решения следующего уравнения относительно значения α_{per}:

$$V_s(\alpha_{per}) = \sum_k V_{hp,k}(\alpha_{per}) + \sum_n V_{cl,n}(\alpha_{per}) + V_{gyp}(\alpha_{per}) + \sum_m V_{add,m}(\alpha_{per}) = \frac{\pi}{6}, \quad (10)$$

где V_{gyp} – относительный объем гипса в цементной матрице;

$V_{add,m}$ – относительный объем m-ой минеральной добавки в цементной матрице.

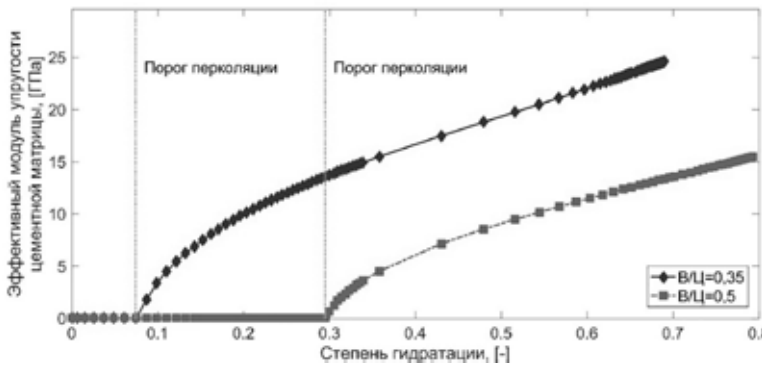


Рисунок 5. Изменение эффективного модуля упругости цементной матрицы в процессе твердения на основе предлагаемой модели (время твердения 0..28 сут., определено по исходным данным [22])

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЖЕСТКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НА УРОВНЕ ЦЕМЕНТНОЙ МАТРИЦЫ

В процессе гидратации капиллярная пористость цементной матрицы будет частично заполнена жидкой фазой – водой затворения и дополнительной водой, полученной в процессе внутреннего увлажнения, и частично газообразной фазой, образованной в процессе «самовысыхания» ее структуры.

При определении эффективных жесткостных характеристик цементную матрицу можно рассмотреть с позиции двух отдельных

состояний – насыщенного, где капиллярные поры полностью заполнены водой, – и ненасыщенного – где капиллярные поры полностью заполнены газообразной фазой. По данным [23] можно считать, что давление газообразной фазы, заполняющей полые капиллярные поры цементной матрицы, не оказывает влияние на ее жесткостные характеристики. Это означает, что при расчете эффективных характеристик цементной матрицы в ненасыщенном состоянии можно принять, что значения модуля объемных деформаций и сдвига капиллярной пористости равны нулю.

Используя метод МТ, на основе зависимостей (1) и (2), проведя соответствующие преобразования, получаем следующие зависимости для определения эффективных характеристик цементной матрицы в ненасыщенном состоянии:

$$K_{cm,d} = K_s \cdot \left[1 - \frac{\varphi_c}{1 - \alpha \cdot (1 - \varphi_c)}\right]; G_{cm,d} = G_s \cdot \left[1 - \frac{\varphi_c}{1 - \beta \cdot (1 - \varphi_c)}\right], \quad (11)$$

где $K_{cm,d}$ и $G_{cm,d}$ – соответственно модуль объемных деформаций и модуль сдвига цементной матрицы в ненасыщенном состоянии;

φ_c – относительный объем капиллярной пористости в цементной матрице.

Для определения жесткостных характеристик пористых сред, насыщенных жидкостью или газом, применяют положения теории пороупругости. В соответствии с положениями теории пороупругости эффективные характеристики цементной матрицы в насыщенном состоянии определяются по следующим зависимостям [23]:

$$K_{cm,u} = K_{cm,d} + b^2 \cdot M; G_{cm,u} = G_{cm,d}, \quad (12)$$

где $K_{cm,u}$ – модуль объемных деформаций цементной матрицы в насыщенном состоянии;

$G_{cm,u}$ – модуль сдвига цементной матрицы в насыщенном состоянии;

b, M – соответственно коэффициент и модуль Biot.

Основное допущение, используемое в модели эффективной двухфазной среды, состоит в предположении о независимости модуля сдвига двухфазной среды от свойств жидкости или газа, заполняющего поровое пространство.

Коэффициент и модуль Biot определяются следующим зависимостям [23]:

$$b = 1 - \frac{K_{cm,d}}{K_s}; \frac{1}{M} = \frac{b - \varphi_c}{K_s} + \frac{\varphi_c}{K_w}, \quad (13)$$

где K_w – модуль объемных деформаций воды.

После определения эффективных жесткостных характеристик цементной матрицы с позиции каждого отдельного состояния определяют эффективные жесткостные характеристики цементной матрицы в процессе гидратации методом SCS на основе зависимости (3), где в качестве базовой среды выступает цементная матрица, а в качестве фаз включения – цементная матрица в ненасыщенном и насыщенном состоянии.

Объемные доли цементной матрицы в ненасыщенном и насыщенном состоянии определяют исходя из степени насыщения капиллярных пор влагой, которую определяют из условия термодинамического равновесия в поровой структуре цементной матрицы на основе модели геометрической модели пор, предложенной в работе [24].

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЖЕСТКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НА УРОВНЕ КОМПОЗИТНОЙ ЦЕМЕНТНОЙ МАТРИЦЫ

Цементная композитная система состоит из трех фаз – цементной матрицы, включения в виде гранул пористого заполнителя и тонкого слоя оболочки цементной матрицы, окружающей каждое включение. Такую оболочку цементной матрицы принято называть транзитной зоной. Цементная матрица в этой оболочке отличается более пористым строением, чем основная масса цементной матрицы, соответственно жесткостные характеристики этой оболочки также будут отличаться от характеристик основной

матрицы. Учитывая отличие жесткостных характеристик транзитной зоны вследствие своего строения, данный слой цементной матрицы обычно выделяется в отдельную фазу цементной композитной системы.

Для рассматриваемой трехфазной композитной системы эффективные жесткостные характеристики определяются в рамках концепции New DEMT [25], в следующей последовательности:

– определяют жесткостные характеристики эффективной частицы – включения, состоящего из гранулы пористого заполнителя и слоя транзитной зоны цементной матрицы вокруг гранулы пористого заполнителя;
– определяют жесткостные характеристики цементной композитной системы, состоящей из цементной матрицы и эффективных частиц.

Для определения жесткостных характеристик эффективной частицы используется метод Generalized Self-Consistent Scheme [25].

В рамках концепции «внутреннего увлажнения» пористый заполнитель предварительно насыщают водой, следовательно, его поровая структура будет частично заполнена водой, остальная часть – воздухом. При определении жесткостных характеристик эффективной частицы необходимо предварительно определить эффективный объемный модуль пористого заполнителя, так как вода, находящаяся в его порах, оказывает влияние на его жесткостные характеристики. Эффективный объемный модуль пористого заполнителя определяется методом SCS, используя зависимость (3), где в качестве базовой среды выступает пористый заполнитель, а в качестве фаз включения – пористый заполнитель в насыщенном и ненасыщенном состоянии.

Объемные доли пористого заполнителя в ненасыщенном и насыщенном состоянии определяют в зависимости от начального количества дополнительной воды, содержащейся в пористом заполнителе и количества дополнительной воды, мигрирующей в поровую структуру цементной матрицы.

Эффективные жесткостные характеристики цементной композитной матрицы определяют посредством аналитических решений дифференциальных уравнений метода New DEMT [25]:

$$K_{cmc} = \varphi_{cm}^{-k} \cdot K_{cm}; G_{cmc} = \varphi_{cm}^{-g} \cdot G_{cm}, \quad (14)$$

где K_{cmc} и G_{cmc} – соответственно эффективный модуль объемных деформаций и модуль сдвига цементной композитной цементной матрицы;

φ_{cm} – относительный объем цементной матрицы в композитной цементной матрице;

k и g – коэффициенты, учитывающие геометрическую форму эффективных частиц.

Относительный объем цементной матрицы, а также коэффициенты k и g определяют по зависимостям, приведенным в [25].

Значение эффективного модуля упругости цементной композитной матрицы определяют по следующей зависимости:

$$E_{cmc} = \frac{9 \cdot K_{cmc} \cdot G_{cmc}}{3 \cdot K_{cmc} + G_{cmc}}, \quad (15)$$

где $E_{cm,c}$ – эффективный модуль упругости цементной композитной системы.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЖЕСТКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НА УРОВНЕ БЕТОННОГО КОМПОЗИТА

Учитывая схожесть строения гетерогенных уровней цементной композитной матрицы и бетонного композита, эффективные жесткостные характеристики на уровне бетонного композита могут быть определены в аналогичной последовательности, как для цементной композитной матрицы.

Следует отметить, что уравнения (14) справедливы для определения эффективных жесткостных характеристик цементных композитных систем, содержащих эффективные частицы только одной определенной фракции. В реальной структуре цементных композитных систем содержится множество фракций эффективных частиц. Для решения данной проблемы авторы модели New DEMT рекомендуют применять усредненные коэффициенты $\overline{k}$ и $\overline{g}$ [25]:

$$\overline{k} = \sum_i k_i \cdot c_{p,i}; \overline{g} = \sum_i g_i \cdot c_{p,i}, \quad (16)$$

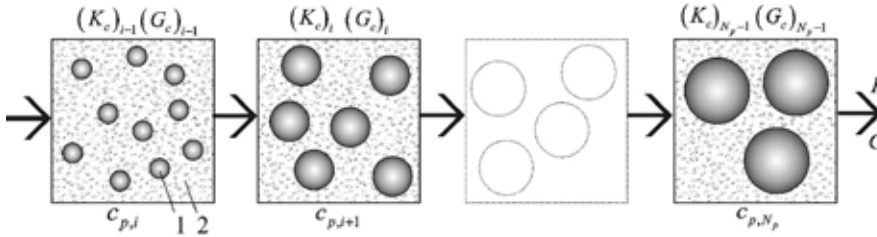
где k_i и g_i – коэффициенты, определяемые для эффективных частиц i-ой фракции, [–];

$c_{p,i}$ – объемная концентрация эффективных частиц i-ой фракции в общем объеме эффективных частиц, [–].

Однако применение усредненных коэффициентов $\overline{k}$ и $\overline{g}$ не является оптимальным решением, поскольку на значения эффективных жесткостных характеристик будет оказывать сильное влияние метод их определения. Предлагаемые авторами модели New DEMT зависимости для определения коэффициентов k и g фактически основаны на методе гомогенизации, предложенным W. Voigt.

Исходя из этого факта, для определения значений коэффициентов k и g вполне можно применить любой другой существующий метод гомогенизации, что в конечном итоге приведет к получению значений эффективных жесткостных характеристик в довольно широком диапазоне. Более рациональным является подход, представляющий собой последовательный способ, в котором на каждом i-ом этапе определяются эффективные жесткостные характеристики бетонного композита, содержащего концентрацию i-ой фракции эффективных частиц на основе уравнений (14). На следующем $(i+1)$-ом этапе эффективная среда, полученная на предыдущем i-ом этапе, используется как фаза матрицы при определении эффективных жесткостных характеристик бетонного композита, содержащего концентрацию $(i+1)$-ой фракции эффективных частиц.

Окончательные значения эффективных жесткостных характеристик бетонного композита будут получены на последнем этапе, когда значение i станет равным общему количеству фракций эффективных частиц N_p, содержащихся в (рис. 6). Полученные таким способом значения эффективных жесткостных характеристик не будут зависеть от усредненных коэффициентов k и g, поскольку на каждом отдельном этапе применяются коэффициенты k_i и g_i, соответствующие i-ой фракции эффективных частиц.



1 – композитное включение, 2 – композитная цементная матрица

Рисунок 6. Схема предлагаемого последовательного способа в методе New DEMT

Значения эффективных жесткостных характеристик бетонного композита на i-ом этапе определяют по аналитическим решениям дифференциальных уравнений метода New DEMT [25]:

$$\begin{cases} (K_c)_i = (K_c)_{i-1} \cdot \left[(\varphi_{cmc})_i \right]^{-k_i} \\ (G_c)_i = (G_c)_{i-1} \cdot \left[(\varphi_{cmc})_i \right]^{-g_i} \end{cases}, \text{ при } i > 1; \quad \begin{cases} (K_c)_i = K_{cmc} \\ (G_c)_i = G_{cmc} \end{cases}, \text{ при } i = 1. \quad (17)$$

где $(K_c)_i$ и $(G_c)_i$ – соответственно эффективный объемный модуль упругости и модуль сдвига бетонного композита на i-ом этапе;

$(\varphi_{cmc})_i$ – относительный объем цементной композитной матрицы в бетонном композите на i-ом этапе.

Окончательные значения эффективных характеристик K_c и G_c определяют на последнем этапе:

$$\begin{cases} K_c = (K_c)_{N_p} \\ G_c = (G_c)_{N_p} \end{cases}, \quad (18)$$

где N_p – количество фракций эффективных частиц в бетонном композите, соответствующее количеству фракций плотного заполнителя.

Коэффициенты k_i и g_i на i-ом этапе определяют по следующим зависимостям

$$\begin{cases} k_i = f\left(\left(K_p\right)_i, \left(K_c\right)_{i-1}, \left(G_c\right)_{i-1}\right) \\ g_i = f\left(\left(G_p\right)_i, \left(K_c\right)_{i-1}, \left(G_c\right)_{i-1}\right) \end{cases}, \text{ при } i > 1; \tag{19}$$

$$\begin{cases} k_i = f\left(\left(K_p\right)_i, K_{cmc}, G_{cmc}\right) \\ g_i = f\left(\left(G_p\right)_i, K_{cmc}, G_{cmc}\right) \end{cases}, \text{ при } i = 1. \tag{20}$$

где $(K_p)_i$ и $(G_p)_i$ соответственно объемный модуль упругости и модуль сдвига эффективной частицы на i-ом этапе.

Относительный объем композитной цементной матрицы на i-ом этапе определяют по следующей зависимости:

$$\left(\varphi_{cmc}\right)_i = 1 - V_{agg} \cdot c_{agg,i} \cdot \left(\frac{b_{agg,i}}{a_{agg,i}}\right)^3, \tag{21}$$

где V_{agg} – относительный объем плотного заполнителя в бетонном композите;

$c_{agg,i}$ – объемная концентрация плотного заполнителя i-ой фракции в общем объеме плотного заполнителя;

$b_{agg,i}$ – радиус эффективной частицы i-ой фракции;

$a_{agg,i}$ – радиус зерен i-ой фракции плотного заполнителя.

ВЕРИФИКАЦИЯ ПРЕДЛАГАЕМОЙ МОДЕЛИ

Верификация предлагаемой модели выполнена путем сопоставления значений, полученных посредством предлагаемой модели, со значениями, полученными по результатам экспериментальных исследований [22, 26–28], на основе их исходных данных. Верификация предлагаемой модели выполнена на уровне бетонного композита по показателю эффективного модуля упругости.

Характеристики применяемых цементов приведены в таблице 2.

Таблица 2

Характеристики применяемых цементов

Источник	Плотность, г/см³	Удельная поверхность зерен, см²/г	Химический состав,%						
			SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	П.П.П
[22]	3,15	3450	20,68	5,16	3,02	62,42	4,71	2,42	1,36
[26]	3,15	3850*	20	4,7	3,2	64	1,4	3,3	2,1
[27]	3,14	3340	20,5	5,7	2,9	64,5	1,27	2,15	1,89
[28]	3,15*	3850*	–	–	–	–	–	–	–

Продолжение таблицы 2

Источник	Минералогический состав, %				Наличие минеральных добавок	
	C_3S	C_2S	C_3A	C_4AF	Вид	Количество, %
[22]	–	–	–	–	–	–
[26]	–	–	–	–	Зола уноса	20
[27]	–	–	–	–	–	–
[28]	55*	15*	10*	12*	Микрокремнезем	8

* Номинальное значение, применяемое при отсутствии сведений в исходных данных.

Для определения минералогического состава цемента, исходя из его химического состава, использовалась модель R. Bogue [29].

Характеристики применяемых минеральных добавок приведены в таблице 3.

Таблица 3

Характеристики применяемых минеральных добавок

Источник	Вид	Плотность, г/см³	Химический состав, %						
			SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	П.П.П
[26]	Зола уноса	2,37	62,8	18,5	4,4	5,2	–	0,6	0,7
[28]	Микрокремнезем	2,22*	96*	0,1*	–	0,1*	–	–	3,8*

* Номинальное значение, применяемое при отсутствии сведений в исходных данных.

Составы бетонного композита, характеристики применяемого мелкого, крупного и пористого заполнителя приведены в таблице 4.

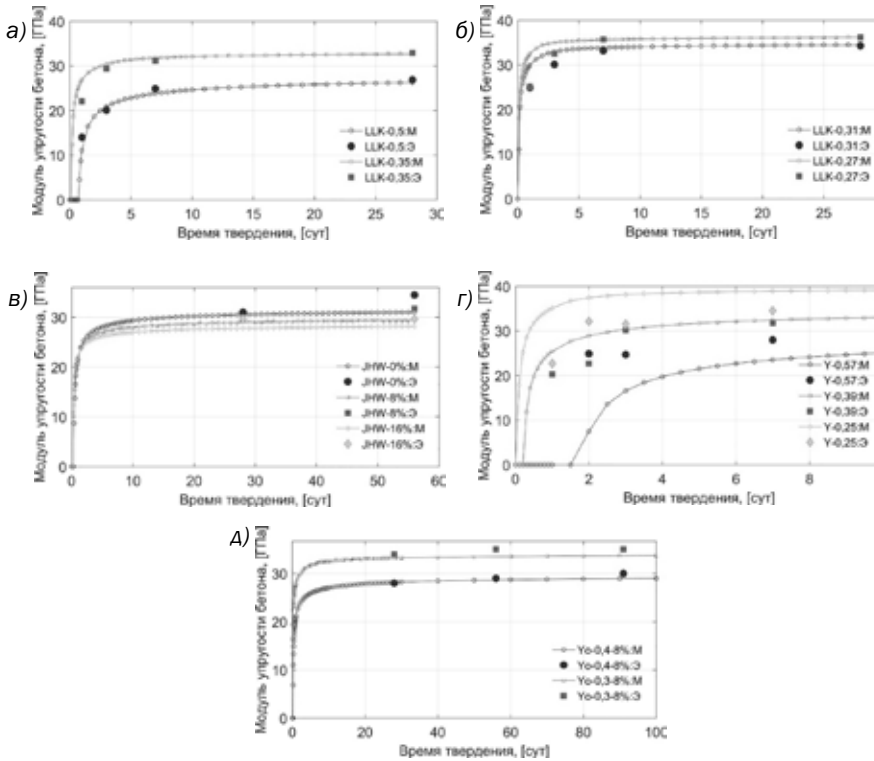
Таблица 4

Составы бетонного композита, характеристики применяемого мелкого, крупного и пористого заполнителя

Источник	Обозначение состава	В/Ц	Расход компонентов, кг/м³					Плотность зерен, кг/м³		
			ПЦ*	В*	МЗ*	КЗ*	ПЗ*	МЗ	КЗ	ПЗ
[22]	LLK-0,5	0,5	370	185	754	969	–	2510	2640	–
	LLK-0,35	0,35	450	158	672	1061				
	LLK-0,31	0,31	500	155	626	1074				
	LLK-0,27	0,27	550	148	617	1060				
[26]	JHW-0%	0,42	270	142	885	1030	0	2620	2650	1740
	JHW-8%	0,42	270	142	748	1030	137			
	JHW-16%	0,42	270	142	611	1030	274			
[27]	Y-0,57	0,57	290	165	812	1030	–	2560	2730	–
	Y-0,39	0,39	434	169	790	933				
	Y-0,25	0,25	680	170	694	818				
[28]	Yo-0,4–8%	0,4	432	186	477	940	141	2630	2740	1820
	Yo-0,3–8%	0,3	432	139	514	1014	152			
[22]	25	–	2,74	–	–	44**	57**	–		
	20									
[26]	25	12,5	2,62	–	18,5	55**	58**	17,4**		
[27]	20	–	3,36	–	–	49**	66**	–		
[28]	12,5	–	2,6	3,6	21	56**	67**	18,2**		

* ПЦ – портландцемент, В – вода, МЗ и КЗ – соответственно мелкий и крупный заполнитель, НК – наибольшая крупность зерен.

** Номинальное значение, применяемое при отсутствии сведений в исходных данных.



М – результаты, полученные по предлагаемой модели,
Э – экспериментальные данные

Рисунок 7. Изменение модуля упругости бетона в процессе твердения по данным [22] (*а, б*), [26] (*в*), [27] (*г*), [28] (*д*)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена расчетная модель для определения жесткостных характеристик цементных композитных систем в области низких водоцементных отношений, содержащих предварительно насыщенный пористый заполнитель. В основе предлагаемой модели лежит разделение структуры цементной композитной системы на элементарные гетерогенные уровни, на каждом из

которых определяют ее эффективные жесткостные характеристики, используя методы гомогенизации теории эффективной среды и дифференциальной эффективной среды.

Для определения эффективных жесткостных характеристик на уровне цементной композитной матрицы и бетонного композита предложен последовательный способ их определения методом New DEMT.

Выполненная верификация предлагаемой модели показала удовлетворительную сходимость результатов, полученных на основе предлагаемой модели с результатами экспериментальных данных.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Kovler K., Jensen O. M. *Internal Curing of Concrete*. State-of-the-Art Report. RILEM Publications. 2007. 161 p.
2. Tennis P. D., Jennings H. M. A model for two types of calcium silicate hydrate in the microstructure of Portland cement pastes. *Cement and Concrete Research*. 2000. No. 30(6). pp. 855–863.
3. 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*. 2003. No. 33(9). pp. 1293–1309.
4. Ulm F-J., Constantinides F., Heukamp H. Is concrete a poromechanics materials? – A multiscale investigation of poroelastic properties. *Materials and Structures*. 2004. No. 37(1). pp. 43–58.
5. Acker P. Micromechanical Analysis of Creep and Shrinkage Mechanisms. *International Conference on Creep, Shrinkage and Durability Mechanics of Concrete and other Quasi-Brittle Materials Procedings*. 2001. pp. 15–25.
6. Velez K., Maximiliena S., Damidot D., Fantozzi G., Sorrentino F. Determination by nanoindentation of elastic modulus and hardness of pure constituents of Portland cement clinker. *Cement and Concrete Research*. 2001. No. 31(4). pp. 555–561.

7. Bentz D. *A Three-Dimensional Cement Hydration and Microstructure Development Modelling Package*. Internal Report. National Institute of Standards and Technology. 2005. 226 p.
8. Hussain A., Mehmood S., Rasool M. N., Aryal S., Rulis P., Ching W. Y. Electronic structure, mechanical, and optical properties of $CaO \bullet Al_2O_3$ system: a first principles approach. *Indian Journal of Physics*. 2016. No. 90(8). pp. 917–929.
9. Hajilar S. *Nano-Scale Investigation of Mechanical Characteristics of Main Phases of Hydrated Cement Paste*. Dissertation thesis. University of Massachusetts. 2015. 127 p.
10. Manzano H. *Atomistic Simulation studies of the Cement Paste Components*. Dissertation thesis. Universidad del País Vasco. 2009. 230 p.
11. Vandamme M. Ulm F. J., Fonollosab P. Nanogranular packing of C–S–H at substochiometric conditions. *Cement and Concrete Research*. 2010. No. 40(1). pp. 14–26.
12. Němeček J., Šmilauer V., Kopecký L. Nanoindentation characteristics of alkali-activated aluminosilicate materials. *Cement and Concrete Composites*. 2011. No. 33(2). pp. 163–170.
13. Hu C., Zongjin L. Property investigation of individual phases in cementitious composites containing silica fume and fly ash. *Cement and Concrete Composites*. 2015. No. 57. pp. 17–26.
14. Kim J., Fan T., Taha M. Homogenization Model Examining the Effect of Nanosilica on Concrete Strength and Stiffness. *Journal of the Transportation Research Board*. 2010. No. 2141. pp. 28–35.
15. Филимонова, Н. В. Моделирование структуры и собственных деформаций расширяющихся сульфоалюминатных цементных систем: дис. … канд. технич. наук: 05.23.05 / Н. В. Филимонова. – Брест, 2006. – 223 с.
16. Papadakis V. G. Experimental investigation and theoretical modeling of silica fume activity in concrete. *Cement and Concrete Research*. 1999. No. 29(1). pp. 79–86.
17. Parrot L. J., Killoh D. C. Prediction of cement hydration. *British ceramic proceedings*. 1984. No. 35. pp. 41–53.

18. Lothenbach B., Saout G., Gallucci E., Scrivener K. Influence of limestone on the hydration of Portland cements. *Cement and Concrete Research*. 2008. No. 38(6). pp. 848–860.
19. Ukrainczyk N. Kinetic modeling of calcium aluminate cement hydration. *Chemical Engineering Science*. 2010. No. 65(20). pp. 5605–5614.
20. Tazawa E., Miyazawa S. Prediction Model for Autogenous shrinkage of concrete with different type of cement. *Procedings 4th International Seminar on Self-Desiccation and Its Importance in Concrete Technology*. 2005. pp. 125–139.
21. Rostasy F.S., Gutsch A., Laube M. Creep and relaxation of concrete at early ages – experiments and mathematical modeling. *Procedings 5th International RILEM Symposium*. 1993. pp. 453–458.
22. Lee H. K., Lee K. M., Kimy B. G. Autogenous shrinkage of high-performance concrete containing fly ash. *Magazine of Concrete Research*. 2003. No. 55(6). pp. 507–515.
23. Coussy O. *Poromechanics*. Chichester: John Wiley & Sons. 2004. 312 p.
24. Maekawa K., Ishida T., Kishi T. *Multi-Scale Modeling of Structural Concrete*. New York, London: CRC Press. 2008. 658 p.
25. Garboczi E. J., Berryman J. G. Elastic moduli of a material containing composite inclusions: Effective medium theory and finite element computations. *Mechanics of Materials*. 2001. No. 33(8). pp. 455–470.
26. Jones W. A., House M. W., Weiss W. J. *Internal curing of high performance concrete using lightweight aggregates and other techniques*. Technical Report. Purdue University. 2014. 129 p.
27. Yoshitake I., Rajabipour F., Mimura Y., Scanlon A. A Prediction Method of Tensile Young's Modulus of Concrete at Early Age. *Advances in Civil Engineering*. 2012. No. 2012. pp. 1–10.
28. Youssef D. *The use of lightweight sand for internal curing and its effect on performance of HPC used for concrete infrastructures*. Dissertation thesis. Université de Sherbrooke. 2013. p. 110.
29. Bogue R. H. Calculation of the Compounds in Portland Cement. *Industrial & Engineering Chemistry Analytical Edition*. 1929. No. 1(4). pp. 192–197.

REFERENCES

1. Kovler K., Jensen O. M. *Internal Curing of Concrete*. State-of-the-Art Report. RILEM Publications. 2007. 161 p.
2. Tennis P. D., Jennings H. M. A model for two types of calcium silicate hydrate in the microstructure of Portland cement pastes. *Cement and Concrete Research*. 2000. No. 30(6). pp. 855–863.
3. 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*. 2003. No. 33(9). pp. 1293–1309.
4. Ulm, F-J., G. Constantinides F., Heukamp H. Is concrete a poromechanics materials? – A multiscale investigation of poroelastic properties. *Materials and Structures*. 2004. No. 37(1). pp. 43–58.
5. Acker P. Micromechanical Analysis of Creep and Shrinkage Mechanisms. *Procedings International Conference on Creep, Shrinkage and Durability Mechanics of Concrete and other Quasi-Brittle Materials*. 2001. pp. 15–25.
6. Velez K., Maximiliena S., Damidot D., Fantozzi G., Sorrentino F. Determination by nanoindentation of elastic modulus and hardness of pure constituents of Portland cement clinker. *Cement and Concrete Research*. 2001. No. 31(4). pp. 555–561.
7. Bentz D. *A Three-Dimensional Cement Hydration and Microstructure Development Modelling Package*. Internal Report. National Institute of Standards and Technology. 2005. 226 p.
8. Hussain A., Mehmood S., Rasool M. N., Aryal S., Rulis P., Ching W. Y. Electronic structure, mechanical, and optical properties of $CaO{\cdot}Al_2O_3$ system: a first principles approach. *Indian Journal of Physics*. 2016. No. 90(8). pp. 917–929.
9. Hajilar S. *Nano-Scale Investigation of Mechanical Characteristics of Main Phases of Hydrated Cement Paste*. Dissertation thesis. University of Massachusetts. 2015. 127 p.
10. Manzano H. *Atomistic Simulation studies of the Cement Paste Components*. Dissertation thesis. Universidad del País Vasco. 2009. 230 p.

11. Vandamme M. Ulm F. J., Fonollosab P. Nanogranular packing of C–S–H at substochiometric conditions. *Cement and Concrete Research*. 2010. No. 40(1). pp. 14–26.
12. Němeček J., Šmilauer V., Kopecký L. Nanoindentation characteristics of alkali-activated aluminosilicate materials. *Cement and Concrete Composites*. 2011. No. 33(2). pp. 163–170.
13. Hu C., Zongjin L. Property investigation of individual phases in cementitious composites containing silica fume and fly ash. *Cement and Concrete Composites*. 2015. No. 57. pp. 17–26.
14. Kim J., Fan T., Taha M. Homogenization Model Examining the Effect of Nanosilica on Concrete Strength and Stiffness. *Journal of the Transportation Research Board*. 2010. No. 2141. pp. 28–35.
15. Filimonova N. V. *Modelirovanie struktury i sobstvennyh deformatsiy rasshiryayu* **shch***ihsya sulfoalyuminatnyh tsementnyh system* [Modeling of the structure and deformations of expansive sulphoaluminous cement systems]. Dissertation thesis. Brest State Technical University. 2006. 223 p. (rus)
16. Papadakis V. G. Experimental investigation and theoretical modeling of silica fume activity in concrete. *Cement and Concrete Research*. 1999. No. 29(1). pp. 79–86.
17. Parrot L. J., Killoh D. C. Prediction of cement hydration. *British ceramic proceedings*. 1984. No. 35. pp. 41–53.
18. Lothenbach B., Saout G., Gallucci E., Scrivener K. Influence of limestone on the hydration of Portland cements. *Cement and Concrete Research*. 2008. No. 38(6). pp. 848–860.
19. Ukrainczyk N. Kinetic modeling of calcium aluminate cement hydration. *Chemical Engineering Science*. 2010. No. 65(20). pp. 5605–5614.
20. Tazawa E., Miyazawa S. Prediction Model for Autogenous shrinkage of concrete with different type of cement. *Procedings 4th International Seminar on Self-Desiccation and Its Importance in Concrete Technology*. 2005. pp. 125–139.
21. Rostasy F.S., Gutsch A., Laube M. Creep and relaxation of concrete at early ages – experiments and mathematical modeling. *Procedings 5th International RILEM Symposium*. 1993. pp. 453–458.

22. Lee H. K., Lee K. M., Kimy B. G. Autogenous shrinkage of high-performance concrete containing fly ash. *Magazine of Concrete Research*. 2003. No. 55(6). pp. 507–515.
23. Coussy O. *Poromechanics*. Chichester: John Wiley & Sons. 2004. 312 p.
24. Maekawa K., Ishida T., Kishi T. *Multi-Scale Modeling of Structural Concrete*. New York, London: CRC Press. 2008. 658 p.
25. Garboczi E. J., Berryman J. G. Elastic moduli of a material containing composite inclusions: Effective medium theory and finite element computations. *Mechanics of Materials*. 2001. No. 33(8). pp. 455–470.
26. Jones W. A., House M. W., Weiss W. J. *Internal curing of high performance concrete using lightweight aggregates and other techniques*. Technical Report. Purdue University. 2014. 129 p.
27. Yoshitake I., Rajabipour F., Mimura Y., Scanlon A. A Prediction Method of Tensile Young's Modulus of Concrete at Early Age. *Advances in Civil Engineering*. 2012. No. 2012. pp. 1–10.
28. Youssef D. *The use of lightweight sand for internal curing and its effect on performance of HPC used for concrete infrastructures*. Dissertation thesis. Université de Sherbrooke. 2013. p. 110.
29. Bogue R. H. Calculation of the Compounds in Portland Cement. *Industrial & Engineering Chemistry Analytical Edition*. 1929. No. 1(4). pp. 192–197.

Статья поступила в редколлегию 05.12.2017.