УДК 691.32

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ПОДХОД НА ОСНОВЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ ЖЕСТКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЦЕМЕНТНОГО КАМНЯ С УЧЕТОМ ЕГО НЕЛИНЕЙНОГО ПОВЕДЕНИЯ

В.В. Кравченко
Брестский государственный технический университет, г. Брест, Республика Беларусь
e-mail: vvkravchenko@g.bstu.by

Существующие методы подходы для оценки эффективных жесткостных характеристик цементного камня в основном рассматривают его через призму упругого поведения. Однако ключевая фаза цементного камня – гидросиликат кальция демонстрирует ярко выраженное вязкоупругое поведение. В этом случае задача оценки эффективных характеристик цементного камня становится довольно сложной, поскольку напряженно-деформированное состояние при вязкоупругом поведении описывают с использованием принципа суперпозиции в форме интеграла Стилтьеса, который не имеет аналитического решения.

В статье представлен возможный способ решения вышеуказанной проблемы с использованием численной гомогенизация на основе преобразования Фурье.

Ключевые слова: *цементный камень, гомогенизация, преобразование Фурье, вязкоупругое поведение.*

COMPUTATIONAL APPROACH BASED ON FOURIER TRANSFORM FOR ESTIMATING THE EFFECTIVE STIFFNESS CHARACTERISTICS OF CEMENT PASTE UNDER VISCOELASTIC BEHAVIOR

V. Kravchenko
Brest State Technical University, Brest, Republic of Belarus
e-mail: vvkravchenko@g.bstu.by

Existing methods for estimating the effective stiffness characteristics of cement paste primarily consider it through a prism of elastic behavior. However, the key phase of cement paste – calcium silicate hydrate exhibits distinctly viscoelastic behavior. In this case, estimating the effective characteristics of cement paste becomes quite complex, as the stress-strain state in viscoelastic behavior is described using the principle of superposition in the form of the Stieltjes integral, which lacks an analytical solution.

The article proposed an approach to solving the aforementioned problem using numerical homogenization based on Fourier transform.

Keywords: *cement paste, homogenization, Fourier transform, viscoelastic behavior.*

Введение. Бетон – это композитный материал, состоящий из трех фаз: цементной матрицы (в технической литературе, называемой цементным камнем), зерен заполнителя и транзитной зоны, образующуюся вокруг них. Ключевая роль в формировании механических характеристик бетона, среди которых важное значение имеют жесткостные характеристики принадлежит цементному камню. Определение жесткостных характеристик цементного камня является актуальной задачей для прогнозирования напряженно-деформирования состояния бетона в целом.

Следует учитывать, что цементный камень сам по себе является композиционным материалом, обладающим чрезвычайно сложной структурой, включающей твердую, жидкую и газообразную фазы, образующиеся в процессе гидратации вяжущего, и распределяемых в его объеме случайным образом. Ему также присущи вязкоупругие свойства, проявляющиеся преимущественно за счет основной структурной составляющей – гидросиликата кальция, что оказывает значительное влияние на механические характеристики бетона.

Природа цементного камня обуславливает тот факт, что прогнозирование его жесткостных характеристик является сложной задачей. Одним из существующих в настоящее время подходов для решения данной задачи – применение методов гомогенизации характеристик, основанных на замене неоднородной структуры композита, эквивалентной гомогенной средой, обладающей усредненными, или так называемыми эффективными характеристиками.

Методы гомогенизации характеристик композитов можно разделять на две группы: аналитические (также называемые – методы теории усредненного поля, англ. – Mean Field Theory) [1] и численные [2; 3].

В настоящее время для прогнозирования жесткостных характеристик цементного камня, как и бетона в целом, широко распространены аналитические методы [4; 5]. Однако их применение для гомогенизации прогнозирования жесткостных характеристик цементного камня сопровождается рядом существенных допущений:

1) геометрическая идеализация – геометрическая форма всех фаз цементного камня рассматривается как сферическая;

2) допущение об аддитивности напряженно-деформированного состояния – не учитывается взаимное влияние полей деформаций и напряжений между фазами;

3) линейное поведение материала – не учитывается нелинейное поведение фазы гидросиликата кальция.

Численные методы, включающие два метода на основе конечно-элементного анализа и преобразования Фурье, предлагают более универсальный подход, позволяющий устранить вышеуказанные допущения аналитических методов. При этом метод на основе преобразования Фурье обладает рядом преимуществ по сравнению с методом на основе конечно-элементного анализа.

В статье показан подход к определению эффективных жесткостных характеристик цементного камня на основе преобразования Фурье, учитывающий нелинейное поведение фазы гидросиликата кальция.

Теоретическая часть. Важным отличием численной гомогенизации от аналитической является физический репрезентативный объем материала, который воспроизводит пространственное распределение фаз в его объеме, что позволяет учитывать сложную геометрию фаз, их морфологию и взаимодействие.

Гомогенизация на основе преобразования Фурье основана на репрезентативном объеме в виде воксельной модели, представляющей собой совокупность кубических элементов – вокселей. Каждому вокселю сопоставляют локальные свойства той фазы, которую он аппроксимирует в пространстве репрезентативного объема. Такое представление позволяет учитывать сложную геометрию и взаимодействие фаз без геометрической идеализации и допущения об аддитивности напряженно-деформированного состояния.

В данной работе используется воксельная модель цементного камня, представленная в [6].

Теоретической основой гомогенизации на основе преобразования Фурье является классическое уравнение равновесия теории упругости (при отсутствии объемных сил):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(x) = 0; \ \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{C}(x) : \boldsymbol{\varepsilon}(x), \tag{1}$$

где $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})$ – тензор напряжений 2 ранга в произвольной точке с радиусом-вектором $\boldsymbol{x}$;

$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x})$ – тензор деформаций 2 ранга;

$\mathbb{C}(\boldsymbol{x})$ – тензор жесткости 4 ранга;

«:» – двойное скалярное произведение тензоров.

Ключевой шаг – введение однородной базовой среды (также называемой опорной, англ. – Reference Medium) с постоянным тензором жесткости $\mathbb{C}^0$. Это позволяет переписать конститутивное $\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) = \mathbb{C}(x) : \boldsymbol{\varepsilon}(x)$ соотношение через так называемое поляризационное соотношение:

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) = [\mathbb{C}^0 + \mathbb{C}(x) - \mathbb{C}^0] : \boldsymbol{\varepsilon}(x) = \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(x) + \boldsymbol{\tau}(x) ; \boldsymbol{\tau}(x) = [\mathbb{C}(x) - \mathbb{C}^0] : \boldsymbol{\varepsilon}(x), \tag{2}$$

где $\boldsymbol{\tau}(x)$ – поляризационный тензор напряжений 2 ранга.

Подставляем уравнение (2) в уравнение равновесие (1) получаем:

$$\nabla \cdot [\mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}(x) + \boldsymbol{\tau}(x)] = 0. \tag{3}$$

Уравнение (3) эквивалентно интегральному уравнению Липпманна-Швингера для поля деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}(x)$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle - \mathbb{\Gamma}^0 * \boldsymbol{\tau}(x) \tag{4}$$

где $\langle \boldsymbol{\varepsilon} \rangle$ – тензор макроскопической деформации 2 ранга, усредненной в репрезентативном объеме;

$\mathbb{\Gamma}^0$ – тензорный оператор Грина (англ. – Green's operator) для однородной базовой среды;

«*» – операция свертки.

Уравнение Липпманна-Швингера (4), представляющее собой нелинейное интегральное уравнение в пространстве деформаций $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x})$, содержит операцию свертки.

Для решения данного уравнения используют:

1) итерационные методы для последовательного решения системы нелинейных уравнений поля деформаций, дискретизированного по воксельной сетке;

2) преобразование Фурье, в котором операция свертки сводится к поэлементному умножению спектров в Фурье-пространстве:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}(\boldsymbol{\xi}) = \bar{\boldsymbol{\varepsilon}} - \hat{\mathbb{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \hat{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) \tag{5}$$

где $\boldsymbol{\xi}$ – частота в пространстве Фурье.

Для переходов между пространствами применяют алгоритм быстрого преобразования Фурье (англ. – FFT).

Важным преимуществом численного подхода является возможность учитывать нелинейное поведение фаз в репрезентативном объеме, что практически невозможно при использовании аналитической гомогенизации.

Наиболее часто вязкоупругое поведение описывают интегралом Стилтьеса, численное представление которого можно выразить, используя метод трапеций [7]:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i = \sum_{j=1}^{i} \frac{1}{2}\left(\mathbb{J}(t_i, t_j) + \mathbb{J}(t_i, t_{j-1})\right) : \left(\boldsymbol{\sigma}(t_j) - \boldsymbol{\sigma}(t_{j-1})\right) = \sum_{j=1}^{i} \mathbb{J}_{i,j-1/2} : \Delta\boldsymbol{\sigma}_j, \tag{6}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ – тензор деформаций 2 ранга на i-ом временном интервале;

$\mathbb{J}$ – тензор податливости 4 ранга, соответствующий деформации в момент времени t_i, вызванной воздействием в момент времени t_j;

t_j и t_{j-1} – время, соответствующее началу и концу j-ого временном интервала.

Данное численное представление интеграла Стилтьеса можно интегрировать в выражение для поляризационного тензора на i-ом временном интервале:

$$\boldsymbol{\tau}_i = \boldsymbol{\sigma}_i + \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}_i = \boldsymbol{\sigma}_{i-1} + \Delta\boldsymbol{\sigma}_i + \mathbb{C}^0 : \boldsymbol{\varepsilon}_i, \tag{7}$$

где $\Delta\boldsymbol{\sigma}_i$ – тензор 2 ранга приращения напряжения на i-ом временном интервале, который выражают из численного представления интеграла Стилтьеса (6) в следующей форме [7]:

$$\Delta\boldsymbol{\sigma}_i = \left[\boldsymbol{\varepsilon}_i - \boldsymbol{\varepsilon}_{i-1} - \sum_{j=1}^{i-1}\left(\mathbb{J}_{i,j-1/2} - \mathbb{J}_{i-1,j-1/2}\right) : \Delta\boldsymbol{\sigma}_j\right] : \left(\mathbb{J}_{i,i-1/2}\right)^{-1}. \tag{8}$$

Эффективные компоненты (упругие константы) тензора жесткости ($\mathbb{C}^{eff}$) определяют из следующего соотношения:

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \mathbb{C}^{eff} : \langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle, \tag{9}$$

где $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$ – тензор макроскопических напряжений 2 ранга, усредненных в репрезентативном объеме, определяемый как:

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \frac{1}{V}\int_V \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x})dV = \frac{1}{n_{vox}}\sum_k(\mathbb{C}_k : \boldsymbol{\varepsilon}_k), \tag{10}$$

где V – репрезентативный объем;

n_{vox} – общее количество вокселей в воксельной сетке;

$\mathbb{C}_k$ – тензор жесткости 4 ранга в k-ом в вокселе;

$\boldsymbol{\varepsilon}_k$ – тензор деформаций 2 ранга в k-ом в вокселе.

Для определения эффективных компонент тензора жесткости используют шесть единичных состояний тензора макроскопических деформации 2 ранга:

$$\langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle^0 = \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}; \langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle^1 = \begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 1 & 0\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}; \langle\boldsymbol{\varepsilon}\rangle^2 = \begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix}; \text{ и т.д.}$$

Заключение. В статье описан предлагаемый подход к оценке эффективных жесткостных характеристик цементного камня при вязкоупругом поведении. Он расширяет базовую схему гомогенизации на основе преобразования Фурье, вводя в уравнение Липпмана–Швингера численное представление интеграла Стилтьеса, выражающего принцип суперпозиции.

Этот подход имеет ряд преимуществ по сравнению с гомогенизацией на основе МКЭ, выражающихся прежде всего в простоте реализации, когда достаточно изменить выражение для тензора поляризации, чтобы учесть вязкоупругое поведение цементного камня.

Однако эффективность подхода существенно зависит от выбора итерационных алгоритмов и свойств базовой среды, что определяет скорость, сходимость и устойчивость схемы решения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Dvorak, G. J. Micromechanics of Composite Materials / G. J. Dvorak. – New York: Springer Science & Business Media, 2012. – 460 p. DOI: https://doi.org/10.1007/978-94-007-4101-0.
2. Yvonnet J. Computational Homogenization of Heterogeneous Materials with Finite Elements / J. Yvonnet. – New York, 2019. – 223 p. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-18383-7.
3. 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. 2021. № 30(22). P. 1–97. DOI: https://doi.org/10.1088/1361-651X/ac34e1.
4. Bernard, O. Multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials / O. Bernard, F.-J. Ulm, E. A Lemarchand // Cement and Concrete Research. 2003. № 33(9). P. 1293–1309. DOI: https://doi.org/10.1016/S0008-8846(03)00039-5.
5. Pichler, C. A multiscale micromechanics model for the autogenous-shrinkage deformation of early-age cement-based materials / C. Pichler, R. Lackner, H. A. Mang // Engineering Fracture Mechanics. 2007. Vol. 74. Issue 1-2. P. 34-58. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2006.01.034.
6. Кравченко В. В. Моделирование микроструктуры цементного камня на основе воксельной модели / В. В. Кравченко // Вестник БрГТУ. 2024. № 1(133). С. 14–18. DOI: https://doi.org/10.36773/1818-1112-2024-133-1-14-18.
7. Bažant, Z. P. Creep and Hygrothermal Effects in Concrete Structures. Springer / Z. P. Bažant, M. Jirásek. – Dordrecht, 2018. – 918 p. DOI: https://doi.org/10.1007/978-94-024-1138-6.