



مدل سازی عددی نفوذپذیری بتن مسلح به گرافن اکساید با استفاده از رویکرد تحلیل چندمقیاسی

مهنا صفرخانی، محمود نادری*

دانشگاه بین‌المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران.

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۹/۰۹/۱۵
بازنگری: ۱۴۰۰/۰۴/۱۶
پذیرش: ۱۴۰۰/۰۴/۱۹
ارائه آنلاین: ۱۴۰۰/۰۴/۲۸

کلمات کلیدی:

گرافن اکساید
دوام
تحلیل چندمقیاسی
بتن
نفوذپذیری

خلاصه: نفوذپذیری را می‌توان از عوامل مهم و تأثیرگذار بر دوام بتن دانست. در این مطالعه، از نانوذرات گرافن اکساید (GONPs) به منظور کاهش حجم نفوذ آب در بتن استفاده شده است. GONPs محصول لایه‌برداری شیمیایی گرافیت بوده و شامل طیف وسیعی از گروه‌های عاملی اکسیژن فعال می‌باشند. در این پژوهش به منظور مطالعه‌ی خواص انتقال بتن غیراشباع تقویت شده با GONPs از رویکرد تحلیل چندمقیاسی استفاده شده است. در مقیاس نانو، پارامترهای انتقال در کلسیم سیلیکات هیدراته‌ی تقویت شده با GONPs از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) تعیین می‌شوند. در مقیاس میکرو مدل‌سازی سیمان هیدراته انجام گرفته و مشخصه‌های نفوذپذیری آن مشخص می‌شود. در آخر و در مقیاس مزو، یک مدل سه فاز از بتن شامل سنگدانه، خمیر سخت شده‌ی سیمان و ناحیه‌ی انتقال بین دو سطح (ITZ) مدل‌سازی شده تا شبیه‌سازی جریان اشباع نشده تحت اثرات توأم مکش موئینه، فشار هیدرواستاتیک خارجی و گرانش انجام گیرد. به منظور صحت‌سنجی و تأیید قابلیت اطمینان مدل چندمقیاسی، نتایج عددی با داده‌های آزمایشگاهی انجام گرفته در این مطالعه جهت پیش‌بینی خواص انتقال آب در بتن اشباع نشده مقایسه شدند. مقایسه‌ی نتایج آزمایشگاهی و عددی نشان داد که روش پیشنهادی می‌تواند پیش‌بینی قابل قبولی از پارامترهای نفوذپذیری در بتن را ارائه دهد. نتایج مدل‌سازی عددی نیز نشان داد که اختلاط درصد بسیار کمی از GONPs ها می‌تواند به طور مؤثری از ورود مولکول‌های آب به بتن جلوگیری کند. در واقع با افزودن GONPs خواص انتقال بتن ارتقاء یافته که متعاقباً دوام آن نیز بهبود می‌یابد.

فشار اعمالی اشاره کرد.

۱- مقدمه

همزمان با پیشرفت تکنولوژی نانو، نانوفیبرهایی با عملکرد فوق‌العاده، نظیر نانولوله‌های کربنی و نانو صفحات گرافن اکساید (GONPs) تولید شده است که می‌توانند باعث بهبود عملکرد مواد بر پایه‌ی سیمانی در مقیاس نانو شوند. به عنوان مثال نانولوله‌های کربنی به عنوان افزودنی کامپوزیت‌های سیمانی علاوه بر بهبود مشخصه‌های مکانیکی ماتریس سیمانی از طریق کنترل ترک‌ها در مقیاس نانو [۴-۲]، می‌توانند باعث بهبود ساختار بتن در مقیاس میکرو و مشخصه‌های انتقال نیز شوند [۵]. در دهه‌های گذشته مطالعاتی نیز بر روی نانو ذرات گرافن اکساید با ضخامت یک اتم و ساختار دو بعدی انجام گرفته است [۶]. گرافن از مجموعه اتم‌های کربن سازمان‌یافته در شبکه‌های شش ضلعی تشکیل شده است [۷]. مطالعات نشان می‌دهد که این نانو ذرات فرایند هیدراسیون سیمان را بهبود بخشیده و بر روی ساختار حفرات در ماتریس تأثیر گذارند [۸ و ۹].

در طراحی سازه‌های بتنی علاوه بر مقاومت کافی، دوام نیز می‌بایست مدنظر طراحان قرار گیرد. به عبارت دیگر یک سازه‌ی بتنی باید بتواند تحت شرایط محیطی و در طول عمر مفید خود سرویس دهی کند. نفوذپذیری را می‌توان از مهم‌ترین پارامترها در کنترل مقاومت و دوام بتن دانست [۱]. بنابراین تعیین مشخصه‌های انتقال بتن به عنوان پارامترهایی که می‌توان به وسیله‌ی آن‌ها میزان سهولت و یا صعوبت عبور سیال از داخل بتن را به دست آورد، از اهمیت زیادی برخوردار است. از مکانیزم‌های مختلف انتقال آب در بتن می‌توان به نفوذ در اثر جذب سطحی یا مکش موئینه و نفوذپذیری تحت فشار بیرونی اشاره کرد. عوامل داخلی و خارجی می‌توانند بر میزان نفوذپذیری مواد بر پایه‌ی سیمانی تأثیرگذار باشند. عوامل داخلی تحت تأثیر فاکتورهایی مانند تخلخل، اتصال منافذ و وجود میکروترک‌ها در بتن هستند [۱]. از عوامل خارجی تأثیرگذار بر میزان نفوذپذیری مواد سیمانی می‌توان به



جدول ۱. ترکیب شیمیایی سیمان پرتلند تیپ II آبیک قزوین

Table 1. Chemical composition of OPC (%).

SO ₃	K ₂ O	Na ₂ O	MgO	CaO	Fe ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	SiO ₂	نوع ترکیب
۱/۸۹	۰/۶۸	۰/۳۷	۳/۲۲	۶۲/۲۸	۳/۸۶	۴/۷۶	۲۰/۷۹	درصد وزنی

مقیاس‌های ریز استخراج کرده و در مقیاس‌های بالاتر به کار برد، استفاده شده است. در این روش، مشخصه‌های به دست آمده در مقیاس پایین، به عنوان پارامترهای ورودی در مقیاس بالاتر استفاده می‌شوند [۱۳]. روند انجام این تحقیق به این شرح است؛ در ابتدا یک برنامه‌ی آزمایشگاهی برای بررسی تأثیر GONPs ها بر نفوذپذیری بتن و درصد تخلخل خمیر سیمان تدوین شد. در بخش بعدی مدل‌سازی عددی جریان اشباع نشده با مدنظر قرار دادن مکانیزم‌های مکش موئینه، فشار هیدرواستاتیک خارجی و گرانش انجام گرفت. برای این منظور سه مقیاس نانو، میکرو و مزو به کار گرفته شد. در مقیاس نانو مشخصه‌های انتقال کلسیم سیلیکات هیدراته $(CSH)_2$ به عنوان مؤلفه‌ی اصلی محصولات هیدراسیون از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعیین شد. در مقیاس میکرو مدل هیدراته‌ی سیمان با استفاده از نرم‌افزار μIC [۱۴] تهیه و جهت مدل‌سازی نفوذپذیری در نرم‌افزار المان محدود کامسول استفاده شد. در مقیاس بالاتر مدل موزوسکوپیک بتن سه فازي شامل سنگدانه، خمیر سخت شده‌ی سیمان و ناحیه‌ی انتقال بین دو سطح ITZ [۱۵] به منظور تعیین مشخصه‌های انتقال شبیه‌سازی شد. به منظور صحت‌سنجی، نتایج حاصل از تحلیل چند مقیاسی با نتایج آزمایشگاهی به دست آمده در این مطالعه مقایسه شدند.

۲- تجهیزات آزمایشگاهی، مدل‌سازی و فرضیات

۲-۱- مواد و روش ساخت

در این بخش یک برنامه‌ی آزمایشگاهی جهت بررسی تأثیر نانو ذرات گرافن‌اکساید بر روی نفوذپذیری بتن تدوین شده است. سیمان مورد استفاده در این پژوهش سیمان پرتلند نوع II کارخانه آبیک قزوین بوده که خصوصیات شیمیایی آن در جدول ۱ آورده شده است. آب شرب نیز به عنوان آب طرح اختلاط استفاده شد. نسبت آب به سیمان برای تمامی

پروژه‌ی انتقال آب در بتن اشباع نشده بسیار پیچیده بوده و ناهمگنی بتن نیز بر پیچیدگی این مسئله می‌افزاید. در چند دهه‌ی گذشته تلاش‌های زیادی برای دستیابی به ویژگی‌های انتقال، مونیتورینگ بر توزیع رطوبت و ارزیابی فاکتورهای تأثیرگذار در بتن در دو طبقه‌بندی آزمایشگاهی و عددی صورت پذیرفته است. از جمله‌ی این مدل‌ها می‌توان به مدل عددی ارائه شده بر پایه‌ی انتقال بولتزمن به منظور پیش‌بینی نفوذ در بتن غیراشباع تحت مکش موئینه اشاره کرد [۱۰]. نتایج حاصل از مدل عددی ارائه شده تطابق خوبی را با نتایج آزمایشگاهی نشان داد. همچنین به منظور حل مسائل انتشار هیدرولیکی در اثر جذب، رویکرد تحلیلی به وسیله شبکه بولتزمن ارائه شد [۱۱]. این مدل هم تطابق قابل قبولی با نتایج آزمایشگاهی انجام گرفته بر روی مواد سیمانی را نتیجه داد. بسیاری از این مدل‌ها بر روی انتقال غیراشباع در نمونه‌هایی با هندسه‌ی ساده کار کرده‌اند که اغلب برای جریان‌های سه بعدی ناکافی است. مطالعه‌ی توسط لی^۱ و همکاران بر روی نفوذپذیری بتن سه فازي و سه بعدی با استفاده از مدل‌سازی کامپیوتری و رابطه‌ی ریچاردز^۲ انجام گرفت. در این مدل اثرات مکش موئینه، فشار هیدرواستاتیک و گرانش در شبیه‌سازی در نظر گرفته شد. نتایج سطح تر شده و حجم نفوذ آب حاصل از شبیه‌سازی تطابق نزدیکی را با نتایج آزمایشگاهی نشان داد [۱۲].

با توجه به اهمیت نفوذپذیری در دوام بتن و نبود مطالعات در این زمینه بر روی بتن مسلح به گرافن‌اکساید و با توجه به اهمیت شبیه‌سازی‌های کامپیوتری در مطالعات آزمایشگاهی، در پژوهش حاضر شبیه‌سازی عددی انتقال آب در بتن اشباع نشده‌ی مسلح به گرافن‌اکساید به منظور بررسی تأثیر فشارهای هیدرواستاتیک و گرافن‌اکساید بر روی میزان نفوذپذیری بتن و همچنین بررسی مکانیزم انتقال آب انجام گرفته است. با توجه به ساختار پیچیده و ناهمگن بتن، در این پژوهش از روش‌های تحلیل چند مقیاسی به عنوان رویکردی که می‌توان خواص مواد را بر اساس جزئیات در

3 Calcium Silicate Hydrate
4 Interfacial Transition Zone

1 Li
2 Richard's



(ج) محلول گرافن اکساید

(ب) دستگاه حمام اولتراسونیک

(الف) نمونه‌های پودر گرافن اکساید توزین شده

شکل ۱. آماده‌سازی گرافن اکساید

Fig. 1. Preparation of GONPs: (a) GONPs powder, (b) Ultrasonic treatment, (c) GONPs solution.

ASTM [۱۸] و به این شرح انجام پذیرفت؛ در مخلوط‌های دارای نانو گرافن اکساید قبل از اختلاط این مواد با سنگدانه و سیمان در دستگاه اولتراسونیک حمامی، به مدت یک ساعت با آب طرح اختلاط پراکنش شد و مقدار بسیار کمی فوق روان کننده که با باردار کردن ذرات به پخش بهتر آن‌ها کمک می‌کند، به محلول اضافه و به مدت ۲ دقیقه هم خورد. در ادامه سنگدانه‌ها درون مخلوط‌کن ریخته شده و کاملاً با یکدیگر مخلوط شدند. سپس آب لازم برای رسیدن به حالت SSD به مخلوط اضافه گردید. در همین زمان سیمان و سپس مخلوط نانو گرافن اکساید نیز در حین اختلاط از دریچه‌ی مخلوط‌کن به مخلوط اضافه شد. پس از اختلاط کامل قالب‌گیری و عملیات ماله‌کشی انجام گرفته و قالب‌ها با گونی مرطوب پوشش داده شدند. در این آزمایش از قالب‌های مکعبی با ابعاد ۱۵۰×۱۵۰×۱۵۰ میلی‌متر استفاده شد. جزئیات طرح اختلاط نمونه‌های بتنی در جدول ۳ آورده شده است. خاطر نشان می‌شود میزان گرافن اکساید بر اساس درصد وزنی سیمان (bwoc) بیان شده‌اند.

۲-۲-۲- آزمون تعیین درصد تخلخل و جذب آب موئینه‌ی نمونه‌های خمیر سخت شده‌ی سیمان

از آن جایی که میزان تخلخل خمیر سخت شده‌ی سیمان به عنوان یکی از پارامترهای ورودی در شبیه‌سازی در مقیاس مزو مورد نیاز است، در این پژوهش پارامتر مذکور به روش معرفی شده در استاندارد ASTM

جدول ۲. مشخصات گرافن اکساید

Table 2. The properties of GONPs.

ضخامت (nm)	۱/۶
درصد خلوص	۹۹/۹٪
شکل ظاهری	پودر تیره رنگ

نمونه‌ها ثابت و برابر ۰/۵ در نظر گرفته شده و مقادیر گرافن اکساید از (۱/۱-۰)٪ وزنی سیمان متغیر است. همچنین از فوق روان کننده بر پایه‌ی پلی کربوکسیلات اصلاح شده محصول کارخانه‌ی پارسیکا به منظور پراکنش بهتر گرافن اکساید در محلول آبی به میزان ۰/۵٪ وزنی سیمان مورد استفاده قرار گرفت. مشخصه‌های اصلی گرافن اکساید را می‌توان در جدول ۲ مشاهده کرد. دانه‌بندی سنگدانه‌ها با حداکثر قطر ۱۹ میلی‌متر و با استفاده از دانه‌بندی فولر^۱ انجام شد [۱۵].

در این مطالعه، به منظور پراکنش بهتر گرافن اکساید در آب از تکنیک حمام اولتراسونیک و همچنین فوق روان کننده‌ها استفاده شد [۱۶ و ۱۷]. شکل ۱ مراحل آماده‌سازی محلول گرافن اکساید را نشان می‌دهد. پروسه‌ی آماده‌سازی و اختلاط نمونه‌ها مطابق با آیین‌نامه‌ی C31/C31M

1 by weight of cement

جدول ۳. طرح اختلاط نمونه‌های بتن برای آزمون نفوذپذیری

Table 3. Mix proportions of concrete specimens.

GONPs (% bwoc)	شن (kg/m ³)	ماسه (kg/m ³)	سیمان (kg/m ³)	Mix No.
۰	۹۰۰	۱۱۰۰	۴۵۵	کنترل
۰/۰۲۵	۹۰۰	۱۱۰۰	۴۵۵	۰/۰۲۵ وزنی سیمان
۰/۰۵	۹۰۰	۱۱۰۰	۴۵۵	۰/۰۵ وزنی سیمان
۰/۱	۹۰۰	۱۱۰۰	۴۵۵	۰/۱ وزنی سیمان

۲-۳- اندازه‌گیری نفوذپذیری به روش دستگاه "محفظه استوانه‌ای" اندازه‌گیری نفوذپذیری با روش‌های مرسوم نیاز به صرف زمان زیاد و تجهیزات گوناگون و با حجم بالا دارد. در این پژوهش بررسی نفوذپذیری با استفاده از دستگاه "محفظه‌ی استوانه‌ای" که روشی نوین برای اندازه‌گیری نفوذپذیری می‌باشد، انجام شده است. این روش که توسط نادری ابداع شد، روشی دقیق با کاربردی گسترده در تعیین میزان نفوذپذیری بتن و سایر مصالح ساختمان چه در محیط آزمایشگاه و چه در محل پروژه است [۱۹]. این دستگاه به نام دستگاه "Cylindrical chamber" در دنیا شناخته شده است. شکل ۲-ج-ه دستگاه محفظه‌ی استوانه‌ای را نشان می‌دهد. روند کار به این صورت است که پس از زدودن سطح نمونه از آلودگی توسط برس سیمی، صفحه‌ی زیرسری توسط چسب اپوکسی بر روی سطح نمونه چسبانده می‌شود. پس از سخت شدن چسب، دستگاه آزمایش بر روی صفحه‌ی زیر سری سوار شده و با چرخاندن دسته‌ی تنظیم فشار و پائین آمدن پیستون، فشار روی مقدار مورد نظر تنظیم می‌گردد. با گذشت زمان به دلیل وجود اصطکاک داخلی و خاصیت گران‌روی مایع از مقدار فشار کاسته می‌شود که با چرخاندن مجدد دسته‌ی تنظیم فشار می‌توان مقدار فشار را در طول آزمایش روی یک مقدار ثابت تنظیم کرد. مقدار نفوذ آب به بتن را می‌توان از طریق میکرومتر تعبیه شده بر روی دستگاه در زمان‌های مختلف قرائت کرد. مقدار حجم آب نفوذ کرده در نمونه در هر لحظه از طریق حاصل ضرب مقدار قرائت شده از میکرومتر در مساحت سطح مقطعی که فشار به آن وارد شده است، محاسبه می‌شود. در این مطالعه به منظور بررسی

اندازه‌گیری شد [۲۹]. در این روش اختلاف بین وزن غوطه‌وری و وزن خشک نمونه‌ها مطابق رابطه‌ی (۱) محاسبه گردید. برای انجام این آزمایش ابتدا نمونه‌ها به مدت ۲۴ ساعت در اون با دمای ۱۰۵ درجه سانتی‌گراد خشک شده و سپس وزن خشک غوطه‌وری آن‌ها در آب اندازه‌گیری شد.

$$f = \left[1 - \left(\frac{W_2 - W_1}{\rho_w V_s} \right) \right] \times 100 \quad (1)$$

در این رابطه f درصد تخلخل آزمون (٪)، W_2 وزن آزمون داخل آب (kg)، W_1 وزن نمونه در حالت خشک (kg)، V_s حجم نمونه (m³) و ρ_w دانسیته‌ی آب در دمای ۲۱ درجه سانتی‌گراد است. آزمایش تعیین درصد تخلخل بر روی نمونه‌های منشوری خمیر سخت شده‌ی سیمان با ابعاد ۱۶۰×۴۰×۴۰ میلی‌متر با نسبت آب به سیمان ۰/۵ و درصدهای متفاوت گرافن اکساید (۰/۰۲۵، ۰/۰۵ و ۰/۱ bwoc) انجام گرفت.

برای انجام آزمون جذب آب موئینه مطابق با EN480-5 نمونه‌های منشوری خمیر سیمان با ابعاد ۱۶۰×۴۰×۴۰ میلی‌متر مکعب در داخل اون در دمای ۵۰ °C خشک شده تا اختلاف وزن نمونه بیشتر از ۰/۱٪ نباشد [۳۲] (شکل ۲-الف). سپس، نمونه‌ها در داخل ظرف آب به نحوی که سه میلی‌متر از کف آن‌ها در داخل آب باشد قرار می‌گیرند (شکل ۲-ب). به منظور جلوگیری از تبخیر سطحی در طول آزمایش و کاهش خطا، نمونه‌ها با استفاده از پوشش پلاستیک پوشانده شدند.



(ب) آزمون جذب آب موئینه



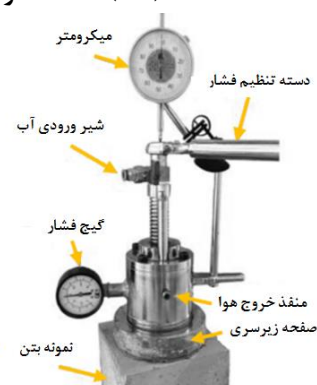
(الف) خشک کردن نمونه‌ها در اون



(ه) انجام آزمایش



(د) نمونه مکعبی بتن



(ج) اجزای مختلف دستگاه

شکل ۲. آزمون های جذب آب و نفوذپذیری

Fig. 2. Capillary absorption and penetration tests: (a) Drying the samples, (b) Capillary absorption test, (c) Different components of the device, (d) Cube concrete sample, (e) Penetration test setup.

و برعکس منتقل می‌شوند. در این روش خصوصیات محاسبه شده در یک مقیاس، به عنوان مثال در مقیاس نانو، به عنوان پارامترهای ورودی در مدل سازی مقیاس بالاتر، به عنوان مثال مقیاس میکرو، استفاده می‌شوند.

در مقیاس نانو، مشخصه‌های انتقال در کلسیم سیلیکات هیدراته به عنوان مؤلفه‌ی اصلی محصولات هیدراسیون و همچنین نمونه‌ی تقویت‌شده‌ی آن با نانو ذرات گرافن اکساید، از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و با استفاده از نرم‌افزار لمپس^۱ تعیین شد. در مقیاس میکرو مدل هیدراته‌ی سیمان شامل کلینکر، محصولات هیدراسیون و حفرات موئینه با استفاده از نرم‌افزار μIC [۱۴] تهیه و جهت شبیه‌سازی نفوذپذیری به نرم‌افزار المان محدود کامسول منتقل شد. در مقیاس بالاتر نیز مدل مزوسکوپیک بتن سه فازی شامل سنگدانه، خمیر سخت شده‌ی سیمان و ITZ به منظور تعیین مشخصه‌های

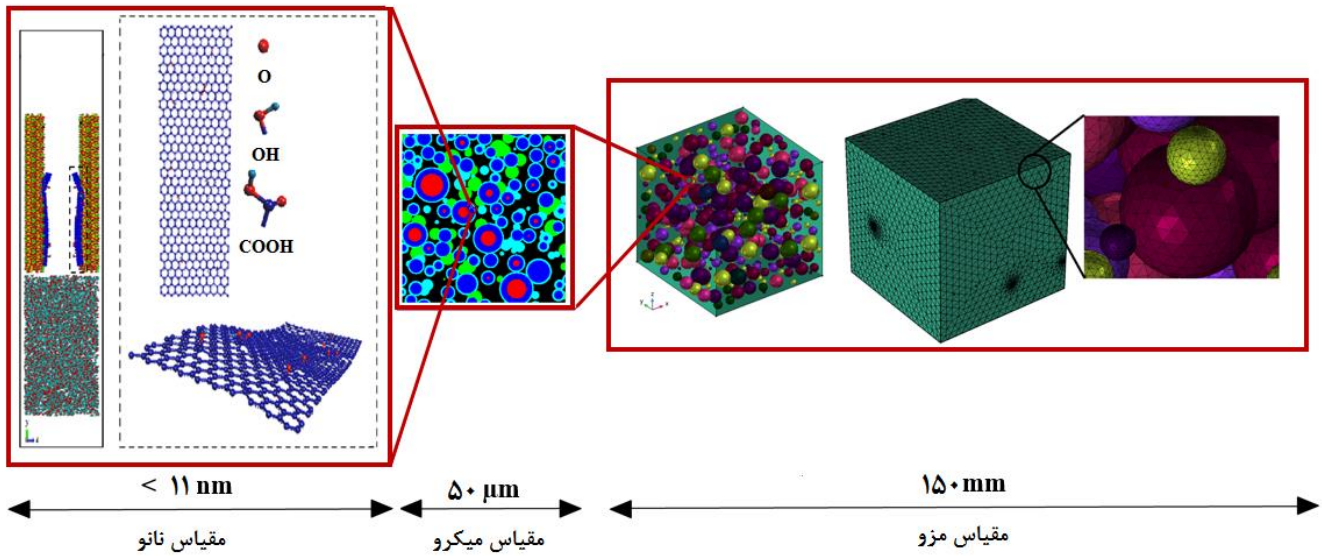
سطح تر شده و عمق نفوذ، بلافاصله پس از انجام آزمایش نمونه‌ها توسط جک فشاری به دو قسمت تقسیم شدند.

۲-۴- مدل‌سازی و فرضیات در شبیه‌سازی عددی و روش تحلیل چندمقیاسی

۲-۴-۱- تحلیل چندمقیاسی

برای درک بهتر مشخصات نفوذپذیری بتن به عنوان یک ماده با ساختاری ناهمگن و پیچیده، می‌بایست مشخصه‌های انتقال از مقیاس‌های پایین تا بالا مورد بررسی قرار گیرد تا پیش‌بینی درستی از نفوذپذیری این ماده به دست آید. روش‌های چندمقیاسی برای استخراج خواص مواد بر اساس جزئیات در مقیاس‌های ریز بسیار قدرتمند هستند. بنابراین به کارگیری این رویکردها برای درک بهتر خواص اشباع نشده‌ی بتن ضروری است. به طور کلی در تحلیل چندمقیاسی، اطلاعات از مقیاس پایین به مقیاس بالا

1 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)



شکل ۳. شکل شماتیک از مدل تحلیل چندمقیاسی

Fig. 3. Schematic model of multiscale approach.

که در آن Θ میزان حجم آب است. در نتیجه رابطه‌ی حاکم بر انتقال آب در محیط اشباع-غیراشباع که به معادله‌ی ریچاردز معروف است را می‌توان به شکل زیر نوشت [۱۲]:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \nabla \cdot [k(\theta) \nabla \phi] \quad (4)$$

فرم اشباع و پتانسیل معادله‌ی ریچاردز به شکل زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nabla \cdot [D(\theta) \nabla \theta] \quad (5)$$

$$C(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot [K(\theta) \nabla \phi] \quad (6)$$

$D(\theta)$ ($L^2 T^{-1}$) ضریب پراکنندگی هیدرولیکی غیراشباع و $C(\theta)$ (L^{-1}) تابع ظرفیت توسط روابط زیر محاسبه می‌شوند:

انتقال بتن شبیه‌سازی شد. شکل ۳ نمای شماتیک از مدل تحلیل چندمقیاسی را نشان می‌دهد. به منظور صحت‌سنجی، نتایج حاصل از تحلیل چندمقیاسی با نتایج آزمایشگاهی به دست آمده در بخش اول مقایسه شدند.

۲-۴-۲ مدل‌سازی نفوذپذیری و تئوری جریان غیراشباع

در تئوری جریان غیراشباع، فیزیک جریان آب توسط قانون دارسی توسعه‌یافته بیان می‌شود:

$$q = -K(\theta) \nabla \phi \quad (2)$$

که در آن q (LT^{-1}) سرعت جریان، $K(\theta)$ (LT^{-1}) نفوذپذیری غیراشباع، θ میزان آب کاهش یافته و θ (L) پتانسیل هیدرولیکی کل بوده که از رابطه‌ی $\phi = \psi + h_p + z$ به دست می‌آید. به طوری که ψ (L) هد موئینه، z (L) هد ارتفاع و h_p (L) هد فشار می‌باشد. با فرض غیرقابل تراکم بودن آب در شرایط کم فشار، قانون بقای جرم به شرح زیر قابل بیان است:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\nabla \cdot q \quad (3)$$

که در آن $I_1(L)$ متوسط عمق نفوذ تحت فشار هیدرواستاتیک اعمالی در مدت زمان نفوذ Δt بوده و f میزان تخلخل می‌باشد. در این مطالعه این پارامترها از طریق آزمایش تعیین می‌شوند.

هد موئینگی یک تابع وابسته به محتوای آب (θ) است. در این پژوهش، تابع $\psi(\theta)/K(\theta)$ توسط رابطه $D(\theta)/K(\theta)$ تعیین می‌شود [۱۲]. به طوری که در زمان اشباع بتن ($\theta = 1$) مقدار ψ برابر با صفر است. در نهایت پس از تعیین تمامی پارامترهای ذکر شده، می‌توان رفتار غیراشباع بتن را در مقیاس مزو شبیه‌سازی کرد.

۳- تحلیل و بررسی نتایج

۳-۱- نتایج مطالعات آزمایشگاهی

در این بخش به منظور تعیین ضریب نفوذپذیری خمیر سخت شده‌ی سیمان، K_s ، که به عنوان پارامتر ورودی در مدل‌سازی در مقیاس مزو مورد استفاده قرار می‌گیرد، آزمون نفوذپذیری بر روی نمونه‌های مکعبی خمیر سیمان با بعد ۱۵۰ میلی‌متر، با نسبت آب به سیمان ۰/۵ و درصدهای متفاوت گرافن اکساید (۰/۰۲۵، ۰/۰۵ و ۰/۱ bwoc) انجام گرفت. نمونه‌ها بلافاصله بعد از آزمون توسط جک فشاری به دو نیم تقسیم شدند. با مشاهده‌ی عمق نفوذ و به کارگیری رابطه‌ی (۱۲) ضریب نفوذپذیری محاسبه می‌شود. همچنین به منظور صحت‌سنجی رویکرد عددی ارائه شده، آزمون نفوذپذیری بر روی نمونه‌های مکعبی بتن کنترل و مسلح به گرافن اکساید با بعد ۱۵۰ میلی‌متر تحت اعمال فشارهای هیدرواستاتیک مختلف انجام شد. جزئیات بیشتر از مراحل آزمایش در مرجع [۳۰] موجود است. نتایج حجم نفوذ آب بر حسب میلی‌لیتر برای نمونه‌های کنترل و بتن مسلح به ۰/۱٪ وزنی سیمان گرافن اکساید تحت فشارهای هیدرواستاتیکی از (۰/۱۵-۰/۹۵) مگاپاسکال، در شکل ۴ آورده شده است. بر اساس نتایج به دست آمده، افزودن مقادیر کمی از گرافن اکساید می‌تواند منجر به کاهش حجم نفوذ آب در بتن در مقایسه با نمونه‌های کنترل شود. از دلایل این کاهش می‌توان به تأثیر گرافن اکساید در خاصیت پراکنندگی حفرات در سطح نانو ساختار بتن و متعاقب آن عدم اجازه‌ی نفوذ بیشتر مولکول‌های آب به ساختار اشاره کرد.

۳-۲- شبیه‌سازی عددی

۳-۲-۱- مقیاس نانو و مدل‌سازی نفوذپذیری کلسیم سیلیکات هیدراته مسلح به گرافن اکساید

ترکیب فازهای دو کلسیم سیلیکات و سه کلسیم سیلیکات با آب در فرایند هیدراسیون منجر به تولید ژل کلسیم سیلیکات هیدراته می‌شود. این

$$D(\theta) = K(\theta)/C(\theta), \quad C(\theta) = \frac{d\Theta}{d\phi} \quad (7)$$

پراکنندگی هیدرولیک $D(\theta)$ را می‌توان با استفاده از روش‌های تقریبی تعیین کرد. تحت شرایط ایزوترمال، پراکنندگی هیدرولیک معمولاً با یک تقریب از تابع نمایی بر حسب θ بیان می‌شود [۲۱ و ۲۰]:

$$D(\theta) = D_0 e^{n\theta} \quad (8)$$

که در آن n و $D_0 (L^2 T^{-1})$ ضرایب ثابت هستند. در واقع، n یک ضریب شکل بوده که فرم تابع پراکنندگی هیدرولیکی را نسبت به درجه‌ی اشباع شدگی θ تعیین می‌کند. برای مواد مقدار پارامتر شکل n بین ۶-۸ متغیر است [۲۱]. در این پژوهش، مقدار n ، ۶ فرض شده است. ثابت D_0 با استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود [۲۲ و ۲۱]:

$$D_0 = \frac{n^2 S^2}{(\Theta_s - \Theta_r)^2 \cdot [e^n (2n - 1) - n + 1]} \quad (9)$$

که در آن $S (L T^{-1/2})$ ضریب جذب بوده و از رابطه‌ی (۱۰) تعیین می‌شود. در واقع S شیب نمودار حجم آب نفوذی در برابر جذر زمان است.

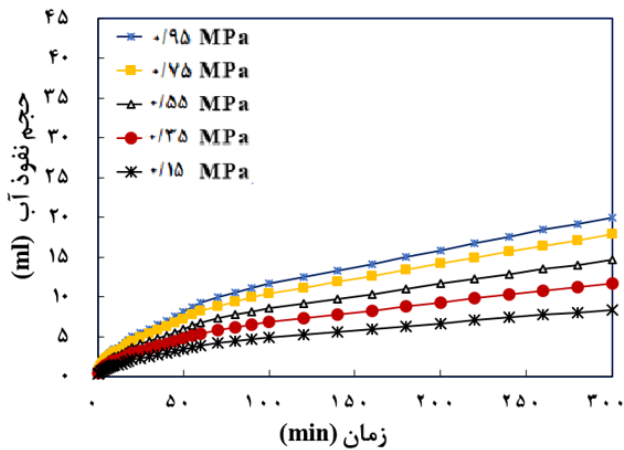
$$i = S \cdot t^{1/2} \quad (10)$$

هدایت هیدرولیک $K(\theta)$ را می‌توان توسط رابطه‌ی (۱۱)، که به طور گسترده در مسائل خاک برای تعیین مقاومت یک ماده‌ی متخلخل در برابر ورود آب مورد استفاده قرار می‌گیرد، بیان کرد [۲۳]:

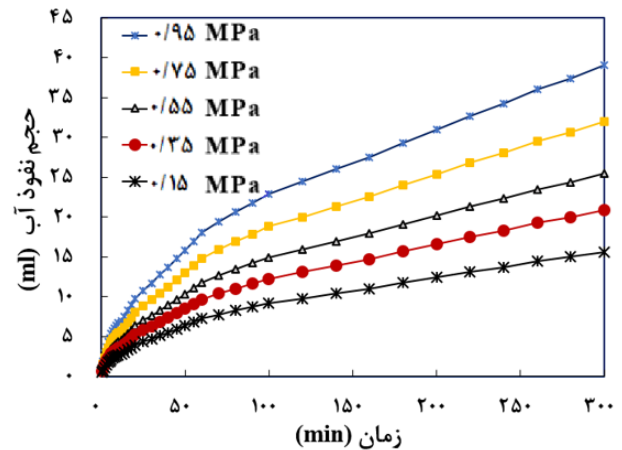
$$K(\theta) = K_s e^{\alpha(\theta-1)} \quad (11)$$

که در آن α ضریب تناسب است. K_s نیز به طور تقریبی از طریق معادله‌ی زیر قابل محاسبه است [۱۲]:

$$K_s = f l_1^2 / (2h_p \Delta t) \quad (12)$$



(ب) نمونه‌ی حاوی ۰/۱٪ وزنی سیمان گرافن‌اکساید



(الف) نمونه‌ی کنترل

شکل ۴. نمودار حجم آب نفوذی تحت فشار هیدرواستاتیک مختلف

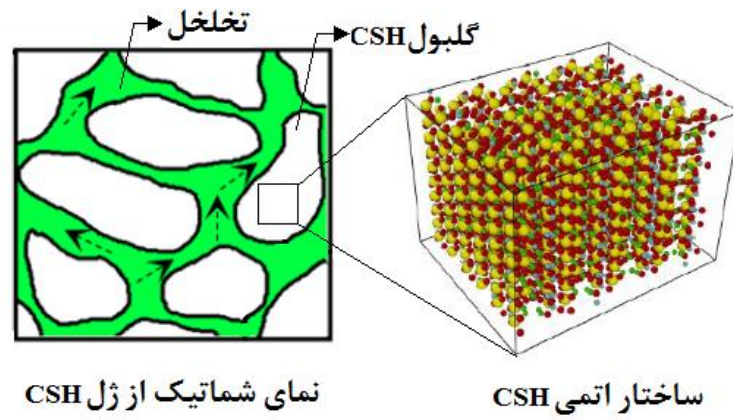
Fig. 4. (a) control specimen; (b) reinforced specimen by 0.1% bwoc GONPs. Cumulative water penetration volume of specimens under different hydrostatic pressure.

GONPs در سطح داخلی CSH در ورودی منفذ و به موازات محور Y قرار می‌گیرد. شکل ۵-ب مدل جذب آب موئینه‌ی کلسیم سیلیکات هیدراته‌ی مسلح به صفحات گرافن‌اکساید را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود بین دو چهار ضلعی CSH که بر اساس ساختار کریستالی توپر موریت ایجاد شده‌اند، یک کانال با عرض ۳/۵ نانومتر و طول حدود ۱۱ نانومتر وجود دارد. عرض منافذ انتخاب شده در محدوده‌ی اندازه‌ی منافذ ژل بوده که از ۰/۵ نانومتر تا ۱۰ نانومتر متغیر است [۲۸ و ۲۷]. همچنین طول در جهت X و Z به ترتیب ۲/۳ و ۷ نانومتر در نظر گرفته شده است [۲۵]. همان‌طور که در اکثر موارد شبیه‌سازی آب و یون در نانو ذرات بیان شده است، تعداد مولکول‌های آب مورد نیاز در منفذ بر اساس ارضای چگالی آب در شرایط محیط (۱ g/cm³) تعیین می‌شود.

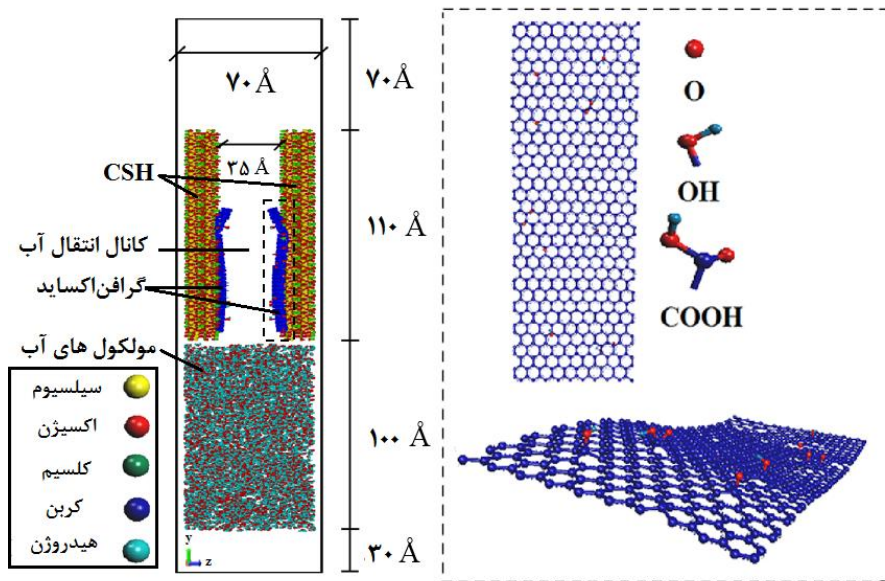
در مرحله‌ی بعد، توابع پتانسیل بین اتمی که مهم‌ترین قسمت شبیه‌سازی است، تعریف می‌شود. تابع پتانسیل یا میدان نیرو در واقع توصیف کننده‌ی یک سیستم فیزیکی است که در آن اتم‌های مجاور با نیروی بین اتمی در کنار هم قرار می‌گیرند. به بیانی دیگر پیوندهای شیمیایی، حاصل از شکل خاصی از برهم کنش بین اتم‌ها هستند. در واقع در روش دینامیک مولکولی اساس و بنیان صحت نتایج به انتخاب صحیح روابط برهم کنش الکترواستاتیکی و واندروالسی بستگی دارد. در این شبیه‌سازی، از میدان

ژل سخت و نانو دانه‌ای مؤلفه‌ی اصلی محصولات هیدراسیون بوده و (۶۰-۷۰) درصد از حجم سیمان هیدراته را تشکیل می‌دهد [۲۴ و ۲۵]. ژل کلسیم سیلیکات هیدراته از تجمع نانو ذرات بلوکی شکل، به نام گلبول‌ها ساخته شده‌اند [۲۶]. این گلبول‌ها ساختار کلی خمیر سخت شده‌ی سیمان را شکل داده و عامل خواص مکانیکی آن مانند انسجام و مقاومت هستند. نمای شماتیک از ژل کلسیم سیلیکات هیدراته در شکل ۵-الف نشان داده شده است. تاکنون محققان چندین ماده معدنی مختلف را معرفی نموده‌اند که خواص مکانیکی و ساختار مولکولی نزدیک به ژل کلسیم سیلیکات هیدراته را دارند. از جمله‌ی این مواد معدنی می‌توان به ساختارهای بلوری موادی مانند توپر موریت^۱ و جنایت^۲ اشاره کرد که دارای نزدیک‌ترین شباهت به این ژل هستند [۲۵]. در این پژوهش شبیه‌سازی ساختار کریستالی کلسیم سیلیکات هیدراته بر پایه‌ی ساختار توپر موریت ۱۱ Å انجام شده است [۲۵]. در ادامه به منظور شبیه‌سازی جذب آب در کلسیم سیلیکات هیدراته و ایجاد کانال، ساختار کریستالی به موازات جهت Y شکافته می‌شود. در واقع شبیه‌سازی جذب آب به صورت انتقال مولکول‌های آب در داخل کانال CSH ساده‌سازی می‌شود [۲۵]. در مرحله‌ی بعدی مدل‌سازی، صفحه‌ی

1 Tobermorite
2 Jennite



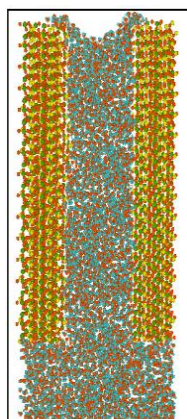
(الف) ژل کلسیم سیلیکات هیدراته



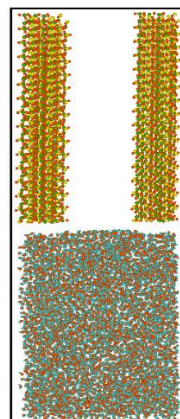
(ب) مدل جذب آب موئینه‌ی کلسیم سیلیکات هیدراته‌ی مسلح به صفحات گرافن اکساید

شکل ۵. ساختار جذب آب در مقیاس نانو

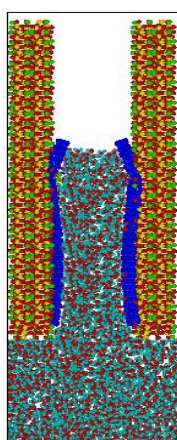
Fig. 5. Nanoscale water absorption structure: (a) CSH gel, (b) Capillary water adsorption model of CSH Reinforced by GONPs.



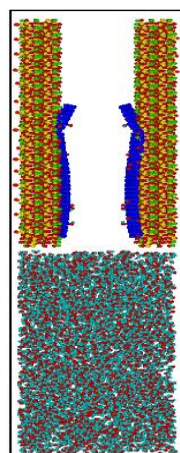
(ب) ژل کلسیم سیلیکات هیدراته در $t=3ns$



(الف) ژل کلسیم سیلیکات هیدراته در $t=0$



(د) ژل کلسیم سیلیکات هیدراته‌ی مسلح به گرافن اکساید در $t=3ns$



(ج) ژل کلسیم سیلیکات هیدراته‌ی مسلح به گرافن-اکساید در $t=0$

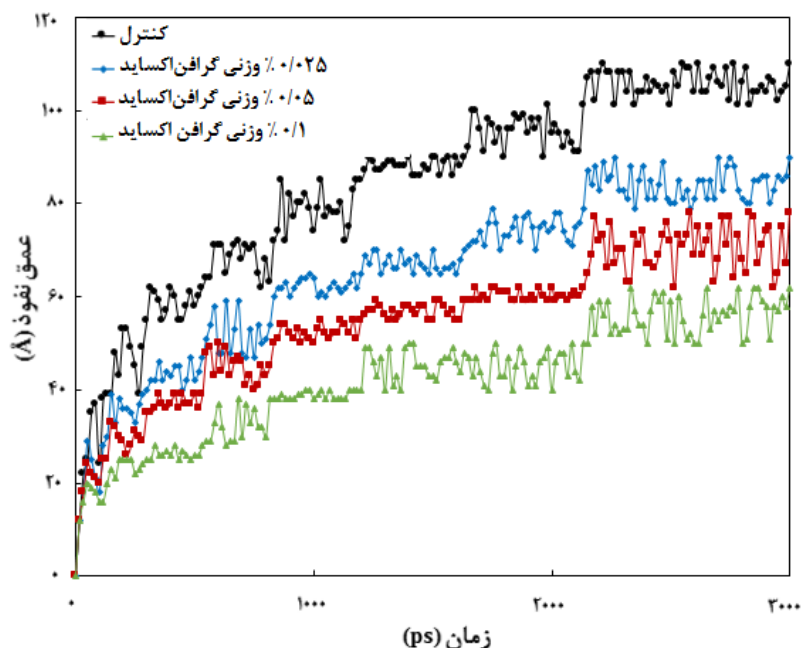
شکل ۶. انتقال آب در کانال کلسیم سیلیکات هیدراته

Fig. 6. Water transport in the CSH: (a) CSH gel at $t=0$, (b) CSH gel at $t=3ns$, (c) CSH gel reinforced by GONPs at $t=0$, (d) CSH gel reinforced by GONPs at $t=3ns$

بین امولسیون و کانال ژل قرار گرفت و ساختار بستر منجمد شد. به منظور متعادل‌سازی، سیستم به مدت $2 ns$ تحت هنگرد NVT (تعداد، حجم و دما) قرار داده شد [۲۵]. گام‌های زمانی بر روی $1 fs$ و درجه‌ی حرارت نیز بر روی $300 K$ تنظیم شد. سپس، بستر نامرئی آزاد شده تا امولسیون بتواند آزادانه در کانال حرکت کند. این عملیات به مدت $3000 ps$ تحت هنگرد NVT ادامه یافت. مسیرهای اتم‌ها برای آنالیز ساختاری و جنبشی هر $1 fs$ 100 ثبت شد [۲۵].

شکل ۶ تصویر حرکت آب در CSH و CSH مسلح به $1/1\%$ گرافن‌اکساید را بعد از $3 ns$ نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۶-ب

نیروی ClayFF برای شبیه‌سازی بر هم کنش اتم‌ها در ژل CSH استفاده شد [۲۵]. پارامترهای مربوط به بر هم کنش‌های بین مولکولی در این میدان نیرو از مرجع [۳۱] گرفته شده است. پارامترهای پتانسیل بین اتمی برای صفحات گرافن‌اکساید نیز از میدان نیروی CVFF گرفته شده، که به طور گسترده‌ای برای محاسبه‌ی ساختارهایی مانند مواد آلی با جرم مولکولی نسبتاً کوچک استفاده می‌شود [۲۵]. همچنین، پتانسیل لnard-جونز (۱۲-۶) برای ترکیب بین میدان نیروی ClayFF و CVFF به کار گرفته شده است [۲۵]. تمامی فرایندهای شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار لمپس انجام گردیده است. شبیه‌سازی به این شرح انجام پذیرفت؛ در ابتدا یک بستر نامرئی



شکل ۷. عمق نفوذ مولکول‌های آب در مقابل زمان در کانال ژل با درصدهای مختلف از GONPs

Fig. 7. Depth of penetration of water molecules versus time in gel channels with different dosages of GONPs

می‌شود. این مقدار می‌تواند توانایی حرکت اتم‌های مختلف در سیستم را نشان دهد و از این رو می‌توان مشخصات دینامیکی آن‌ها را محاسبه کرد. اندازه‌ی MSD توسط رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود [۲۵]:

$$MSD(t) = \langle |r_i(t) - r_i(0)|^2 \rangle \quad (13)$$

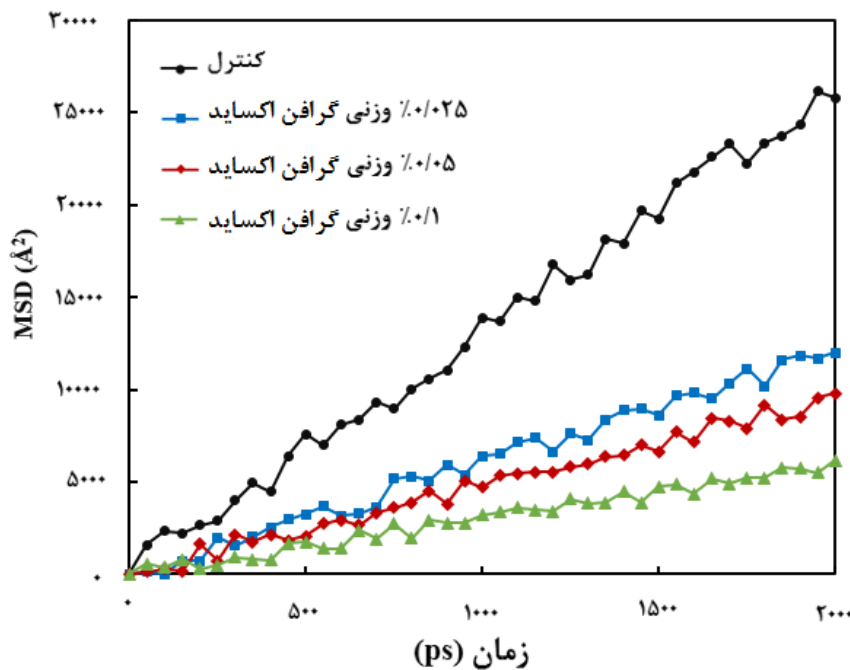
به طوری که $r_i(t)$ موقعیت اتم i را در زمان t و $r_i(0)$ موقعیت اولیه‌ی اتم، $\langle \rangle$ نشان دهنده‌ی میانگین و $||$ نمایانگر قدر مطلق است. همان‌طور که در شکل ۸ نشان داده شده است، MSD در CSH مقدار بیشتری داشته در حالی که مولکول‌های آب در منافذ CSH تقویت شده با ورق‌های GONPs کندتر حرکت می‌کنند. کاهش در میزان MSD در نمونه‌ی تقویت شده با ۰/۱٪ گرافن اکساید در مقایسه با نمونه‌ی کنترل ۰/۴۲٪ می‌باشد. دلایل این پدیده را می‌توان به این شرح توضیح داد؛ اولاً، اندرکنش بین مولکول‌های آب با افزودن GONPs ها از بین رفته و جذب موثینه تضعیف می‌شود و از طرف دیگر GONPs ها مانع انتقال مولکول‌های آب در داخل کانال می‌شوند.

مشاهده می‌شود، سطح آب حالت مقعر داشته و زاویه‌ی تماس بین آب و سطح CSH کمتر از ۹۰ درجه است که این موضوع نشان دهنده‌ی آبرگریز بودن سطح CSH می‌باشد. با توجه به شکل مشاهده می‌شود که در نمونه‌ی CSH، مولکول‌های آب تقریباً به قسمت فوقانی کانال رسیده‌اند. مطابق با شکل ۶-د که کانال نانومتری CSH با ورق GONPs پوشانده شده است، مولکول‌های آب به درون منافذ ژل CSH نفوذ کرده و پس از ۳ ns تقریباً ۶ نانومتر بالا می‌آیند.

نمودار عمق نفوذ مولکول‌های آب در منافذ نانومتری در ژل CSH با درصدهای متفاوت GONPs (یعنی ۰٪، ۰/۰۲۵٪، ۰/۰۰۵٪ و ۰/۰۱٪) در شکل ۷ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، عمق نفوذ مولکول‌های آب در منافذ ژل با گذشت زمان افزایش می‌یابد. در مقایسه با CSH، عمق نفوذ آب در مدل‌های حاوی نانو ذرات گرافن اکساید کمتر بوده و GONPs های متصل به منافذ ژل مانع انتقال مولکول‌های آب می‌شوند.

مقدار MSD¹ برای بیان میانگین مربع جابجایی یک ذره استفاده

1 Mean Square Displacement



شکل ۸. میانگین مربع جابجایی در نمونه‌ها

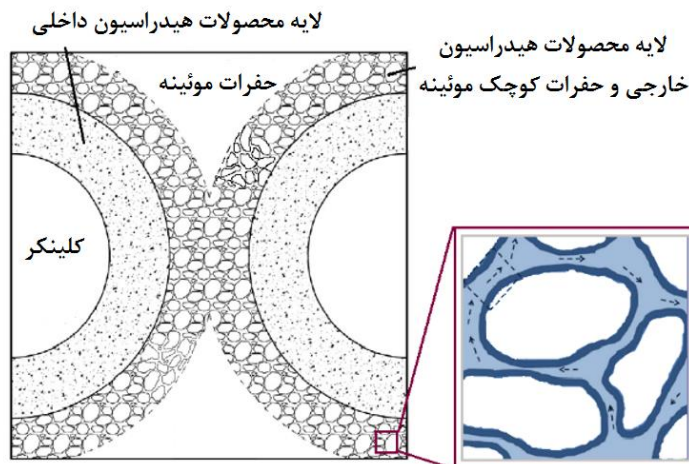
Fig. 8. Mean square displacement in samples

از طرفی ضریب انتقال در HD CSH بسیار کمتر از LD CSH است [۲۷]. از این رو، لایه‌های بیرونی CSH بدون شک نفوذپذیری بالاتری نسبت به لایه‌های محصولات هیدراسیون داخلی دارند. در سطح میکرو، با توجه به اینکه هسته‌های سیمانی هیدراته نشده و ذرات کریستال هیدراته با اندازه‌ی کوچک غیرقابل نفوذ فرض می‌شوند، مسیر انتقال در خمیر سخت شده‌ی سیمان را می‌توان شامل سه مرحله‌ی لایه‌ی داخلی (HD CSH)، منافذ بزرگ موئینه و لایه‌ی بیرونی (LD CSH) در نظر گرفت. شکل ۱۰ مدل هیدراته‌ی سیمان را نشان می‌دهد. مدل حاصل برای حل المان محدود به نرم‌افزار کامسول منتقل می‌شود. در این شبیه‌سازی فرم اشباع معادله‌ی ریچاردز، رابطه‌ی (۵)، در حل المان محدود به کار گرفته شده است. ابعاد نمونه‌ها ۵۰×۵۰ میکرومتر در نظر گرفته شده و از مش مثلثی با اندازه متغیر ۳۷/۳-۱۵/۰ میکرومتر استفاده شده است. همچنین به منظور ساده‌سازی از یک مدل سیمان هیدراته برای نمونه‌ها استفاده شده است. خواص انتقال در ناحیه‌ی لایه‌ی بیرونی ده برابر لایه‌ی داخلی و خواص انتقال در منافذ بزرگ موئینه ده برابر بیشتر از LD CSH فرض شده است. در شبیه‌سازی المان محدود، مقدار θ در مرز پائینی نمونه یک در نظر گرفته شده و سطوح دیگر

۳-۲-۲- مقیاس میکرو

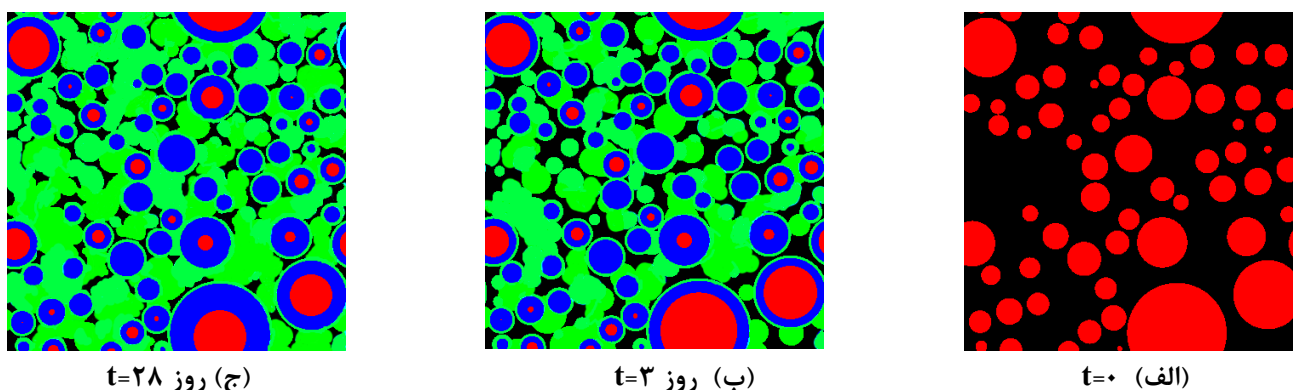
در این بخش، یک مدل هیدراسیون شیمیایی سینتیک ذرات [۱۴] به منظور شبیه‌سازی نفوذپذیری خمیر سخت شده‌ی سیمان در مقیاس میکرو در نظر گرفته شده است. در بخش قبل ساختار CSH توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر اساس کریستال توبرموریت مدل‌سازی شد. کوچک‌ترین ویژگی‌های میکروساختاری که در مدل‌سازی خصوصیات انتقال مواد بر پایه‌ی سیمان باید مورد توجه قرار گیرد شامل LD CSH و HD CSH^۲ ها هستند [۲۷]. ضرایب انتقال در LD CSH و HD CSH می‌توانند ثابت در نظر گرفته شوند [۲۷]. در مقیاس زیرمیکرو، لایه‌ی محصولات هیدراسیون داخلی ترکیبی از HD CSH، حفرات کوچک موئینه^۳ (SCPs) و فاز غیرقابل نفوذ (کریستال‌های هیدراته با اندازه نانو و سیمان باقی‌مانده بی‌اثر) بوده و لایه‌ی بیرونی ترکیبی از LD CSH و مسیرهای موئینه می‌باشد [۲۷]. شکل ۹ ساختار میکرو مسیر انتقال آب در سیمان هیدراته را نشان می‌دهد.

- 1 Low Density CSH
- 2 High Density CSH
- 3 Small Capillary Pores



شکل ۹. میکرو ساختار مسیر انتقال در سیمان هیدراته [۲۶]

Fig. 9. Transmission path in hydrated cement [26]



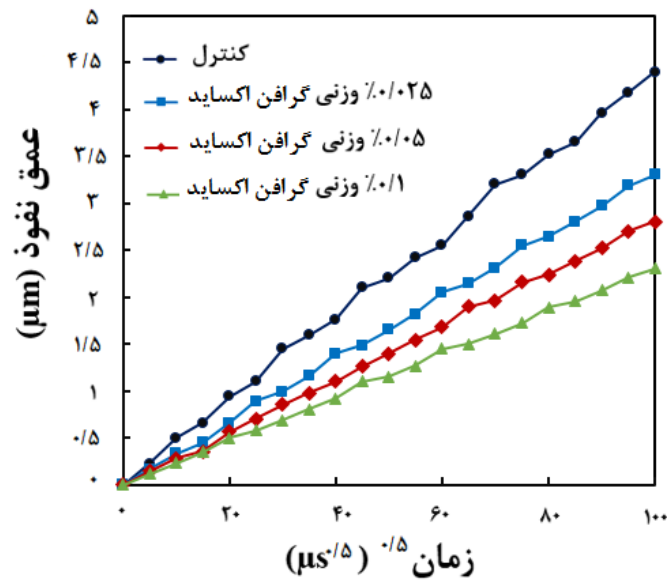
شکل ۱۰. مدل سیمان هیدراته (نواحی قرمز بخش غیرهیدراته‌ی سیمان، نواحی آبی محصولات هیدراسیون داخلی، نواحی سبز لایه‌ی CSH خارجی و نواحی سیاه مناطق بزرگ موئینه را نشان می‌دهند).

Fig. 10. Hydrated Cement Model (red areas indicate non-hydrated phase of cement, blue areas indicate internal hydration products, green areas represent the outer CSH layer, and black areas indicate large capillary areas.) (a) $t = 0$ day, (b) 3 days, (c) 28 days.

به دست آمد.

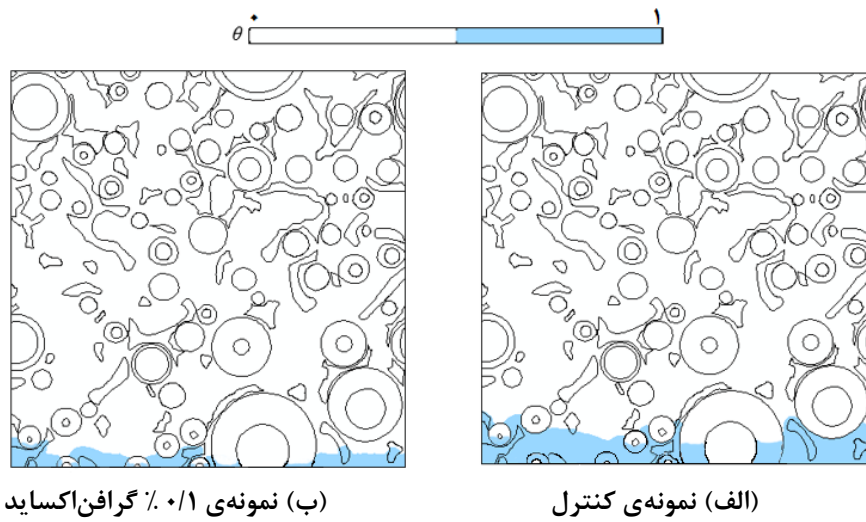
به منظور صحت‌سنجی روند شبیه‌سازی در این بخش، نمونه‌های منشوری با ابعاد $۴۰ \times ۴۰ \times ۱۶۰$ مدل‌سازی شده و تحت آزمون جذب موئینه قرار گرفتند. ضریب جذب مورد نیاز در این شبیه‌سازی از شیب گراف عمق نفوذ در برابر جذر زمان شکل ۱۱ گرفته شد. در نهایت شیب منحنی عمق نفوذ در برابر جذر زمان حاصل از نتایج عددی برای نمونه‌های منشوری با داده‌های آزمایشگاهی بخش قبل مقایسه شدند (شکل ۱۳). با توجه به

غیرقابل نفوذ هستند. مقدار اولیه‌ی آب، θ ، در نمونه‌های بتنی صفر است. شکل ۱۱ نمودار عمق نفوذ آب نسبت به جذر زمان پس از گذشت ۱۰۰۰۰ میکروثانیه را در نمونه‌ها نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل پیداست میزان نفوذ آب برای همه مخلوط‌های دارای GONPS نسبت به نمونه‌ی کنترل کم است. همان‌طور که در شکل ۱۲ مشاهده می‌شود، عمق نفوذ آب در نمونه‌ی کنترل بعد از گذشت ۱۰۰۰۰ میکروثانیه حدود $۴/۵$ میکرومتر و در نمونه‌ی حاوی $۰/۱\%$ گرافن‌اکساید حدود ۲ میکرومتر



شکل ۱۱. منحنی عمق نفوذ در مقابل جذر زمان

Fig. 11. Water penetration depth of hydrated cement specimens with different dosages of GONPs versus square of time.

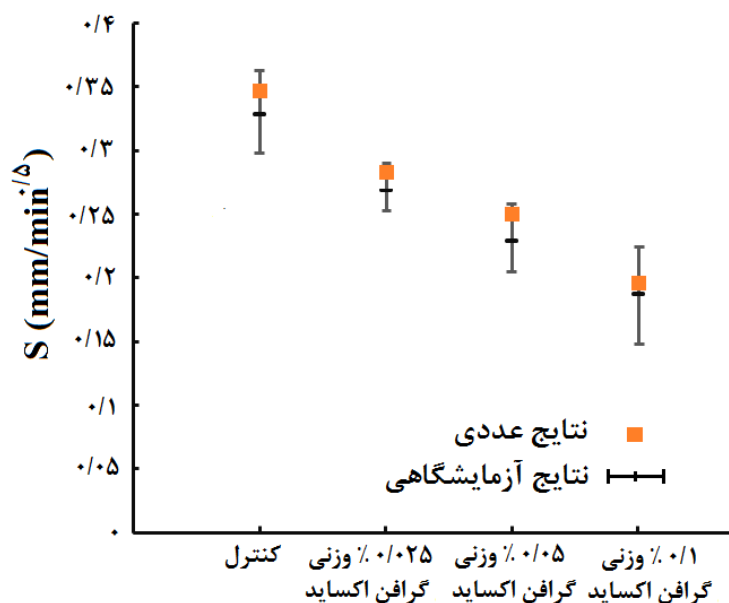


(ب) نمونه‌ی ۰.۱٪ گرافن اکساید

(الف) نمونه‌ی کنترل

شکل ۱۲. عمق نفوذ آب بعد از گذشت ۱۰۰۰۰ میکروثانیه

Fig. 12. Water penetration depth after 10,000 microseconds (a) Control specimen, (b) reinforced specimen by 0.1% bwoc GONPs.



شکل ۱۳. شیب منحنی عمق نفوذ در برابر جذر زمان نمونه های عددی و داده های آزمایشگاهی

Fig. 13. Slope of penetration depth curve versus time square of numerical samples and experimental data

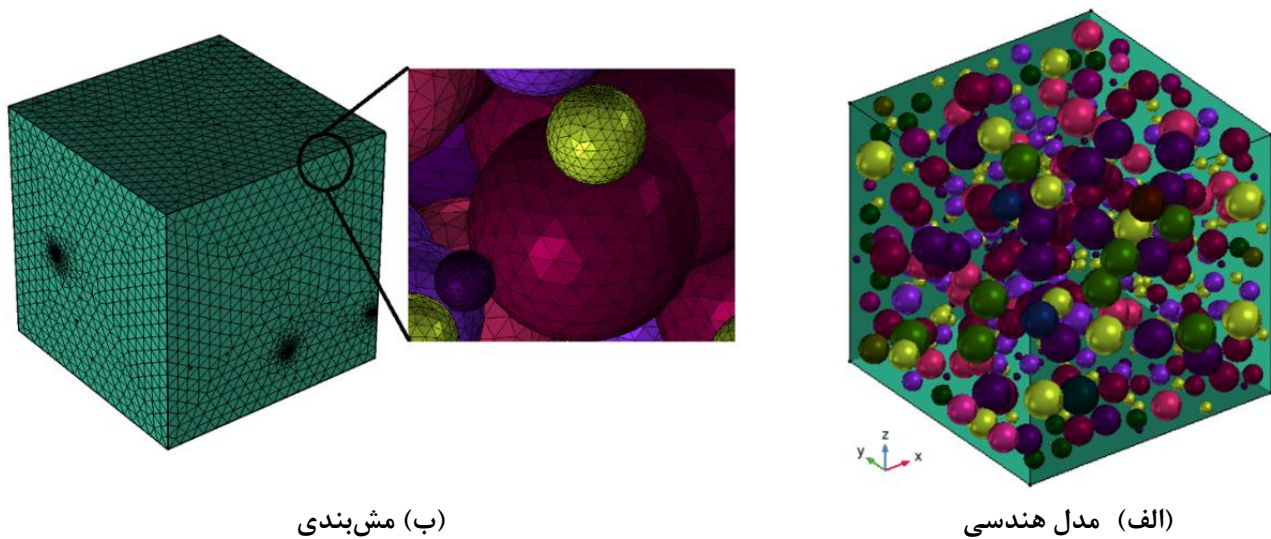
و اشباع محتوای حجمی آب، Θ_r و Θ_s ، مورد نیاز است. در واقع S شیب منحنی حجم نفوذ آب نسبت به جذر زمان به دست آمده از شبیه سازی میکرو است. با توجه به این که نمونه های آزمایشگاهی قبل از انجام آزمایش در اون خشک شدند، می توان Θ_r و Θ_s را به ترتیب صفر و برابر با مقدار تخلخل خمیر سخت شده ی سیمان، f ، در نظر گرفت [۱۲]. با داشتن مقادیر S ، Θ_r و Θ_s می توان $D(\theta)$ را از روابط (۸) و (۹) محاسبه کرد. پارامتر مهم دیگر برای خمیر سخت شده سیمان، نفوذپذیری اشباع نشده، $K(\theta)$ ، است که با استفاده از داده های آزمایشگاهی و به کارگیری رابطه ی (۱۱) با مقادیر متناظر K_s و α قابل محاسبه است. مقدار α و n به ترتیب برابر با $5/86$ و 6 در نظر گرفته شده اند [۱۲]. از آن جا که سنگدانه ها معمولاً متراکم تر و چگال تر از خمیر سیمان هستند، می توان این المان ها را غیرقابل نفوذ فرض کرده و ضرایب نفوذپذیری و پراکنندگی هیدرولیکی آن ها را صفر در نظر گرفت، $D(\theta)=K(\theta)=0$ [۱۲]. همچنین با توجه به تراکم پایین تر و تخلخل بالاتر ITZ، می توان فرض کرد که ضرایب نفوذپذیری و پراکنندگی هیدرولیکی در این ناحیه ده برابر بیشتر از خمیر سیمان است [۱۲]. در مدل مزوسکوپی، سنگدانه ها و خمیر سیمان به عنوان محیط

شکل ۱۳، مشاهده می شود که مدل سازی انجام گرفته می تواند پیش بینی قابل قبولی از مشخصات انتقال سیمان هیدراته ارائه دهد.

۳-۲-۳- مقیاس مزو

در این بخش از شبیه سازی، بتن به عنوان یک ماده ی کامپوزیت سه فاز ی مدل سازی شد. به منظور صحت سنجی با نتایج آزمایشگاهی، نمونه ها به صورت مکعبی و با ابعاد $150 \text{ mm} \times 150 \text{ mm} \times 150 \text{ mm}$ مدل شدند. برای ساده سازی از ذرات کروی برای مدل سازی سنگدانه ها استفاده شده و توزیع اندازه ی آن ها با استفاده از رابطه ی فولر مشخص شد. سنگدانه ها و ملات با المان Solid سه بعدی مدل شده در حالی که در ITZها از المان Shell Additional، یا به عبارتی المان رابط با ضخامت صفر استفاده شد [۱۲]. شکل ۱۴ مدل مزوسکوپی و المان محدود نمونه ی بتنی را نشان می دهد.

در این شبیه سازی فرم پتانسیل معادله ی ریچاردز، رابطه ی (۶)، به عنوان معادله ی حاکم در حل المان محدود به کار گرفته شد. به منظور تعیین ضریب پراکنندگی هیدرولیک خمیر سیمان، پارامتر جذب S و همچنین میزان اولیه



شکل ۱۴. مدل‌سازی المان محدود نمونه‌ی مکعبی بتن

Fig. 14. Finite element model of a concrete sample (a) Geometrical model; and (b) the mesh discretization of concrete specimen.

$$\begin{cases} C(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot [K(\theta) \nabla \phi] & \text{in cement paste} \\ d_i C_i(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla_{\tau} \cdot [d_i K_i(\theta) \nabla_{\tau} \phi] + f_m + f_a & \text{in ITZ} \\ \phi = h_p & \text{at the top boundary} \\ \frac{\partial \phi}{\partial \{n\}} = 0 & \text{at the impervious boundaries} \\ \phi|_{t=0} = \phi_0 = \psi_0 + z & \text{in cement paste and ITZ} \end{cases} \quad (15)$$

که در آن $\{n\}$ بردار واحد نرمال در مرز است. آنالیز دینامیکی بر روی مدل‌ها با استفاده از نرم‌افزار کامسول انجام شد. به منظور بررسی قابلیت اطمینان و کارایی رویکرد مدل‌سازی چند مقیاسی ارائه شده در این مقاله، سه سری از نمونه‌ها با مقادیر مختلف GONPs (۰/۲۵٪، ۰/۵٪ و ۰/۱٪ bwoc) مدل‌سازی و به صورت عددی مورد آزمایش قرار گرفتند. در نهایت نتایج حاصل با نتایج آزمایشگاهی انجام گرفته در این پژوهش مقایسه شدند. با توجه به توزیع تصادفی سنگدانه‌ها، پنج نمونه برای هر سری شبیه‌سازی شد. پارامترهای ماده‌ی خمیر سیمان مورد نیاز برای شبیه‌سازی عددی در جدول ۴ آورده شده است. با توجه به نتایج آزمون‌های نفوذپذیری و درصد تخلخل انجام گرفته در بخش قبلی و

متخلخل ایزوتروپیک در نظر گرفته می‌شوند، بنابراین جریان آب در این دو ناحیه توسط رابطه‌ی (۶) قابل بیان است. معادله‌ی حاکم بر انتقال در ITZ را می‌توان از طریق رابطه‌ی زیر بیان کرد [۱۲]:

$$d_i C_i(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla_{\tau} \cdot [d_i K_i(\theta) \nabla_{\tau} \phi] + f_m + f_a \quad (14)$$

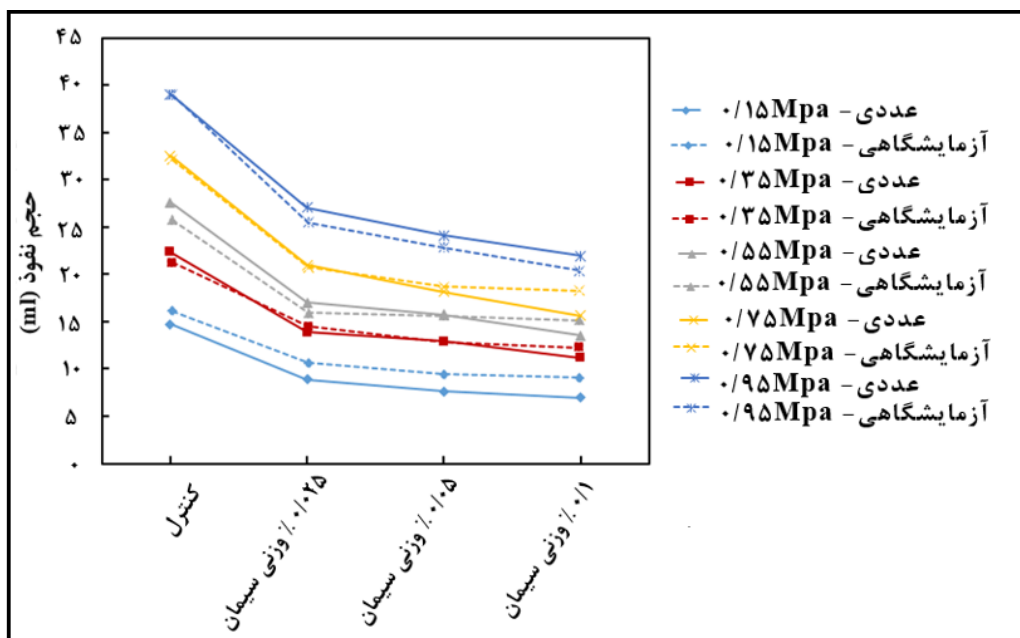
که در آن $K_i(\theta)$ (L T⁻¹) نفوذپذیری اشباع نشده‌ی ITZ و $C_i(\theta)$ (L⁻¹) تابع ظرفیت آن است. d_i (L) ضخامت هیدرولیک را نشان می‌دهد. ∇_{τ} (L⁻¹) اپراتور گرادیان در صفحه‌ی مماس ITZ است. f_a (L T⁻¹) و f_m (L T⁻¹) به ترتیب سرعت جریان ورودی به ITZ در جهت نرمال از سطح خمیر سیمان و سنگدانه‌ها است.

بعد از تعیین پارامترهای ورودی، شرایط مرزی و اولیه تعریف می‌شوند. مطابق با شرایط آزمایشگاهی، در شبیه‌سازی المان محدود مرز بالایی نمونه‌ها تحت فشار هیدرواستاتیک $\phi = h_p$ قرار دارند و سطوح دیگر غیرقابل نفوذ فرض می‌شوند. مقدار اولیه‌ی آب، θ ، در نمونه‌های بتنی صفر است. با توجه به شرایط مرزی و اولیه، معادلات نهایی که به صورت سه بعدی حل می‌شوند را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

جدول ۴. مشخصه‌های انتقال خمیر سخت شده‌ی سیمان

Table 4. Water transport properties of cement paste.

f	S (mm/min ^{1/2})	K_s (mm/min)	D_0 (mm ² /min)	
۰/۱۵۵	۰/۳۴	$۶/۲۵ \times 10^{-۵}$	۰/۰۳۹	کنترل
۰/۱۳	۰/۲۶	$۱/۱ \times 10^{-۵}$	۰/۰۳۲	۰/۰۲۵ وزنی سیمان
۰/۱۲	۰/۲۳	$۴/۵ \times 10^{-۶}$	۰/۰۲۷	۰/۰۰۵ وزنی سیمان
۰/۱۰۵	۰/۱۸	$۲/۶۵ \times 10^{-۶}$	۰/۰۲۳	۰/۰۱ وزنی سیمان



شکل ۱۵. نتایج آزمایشگاهی و عددی حجم نفوذ آب

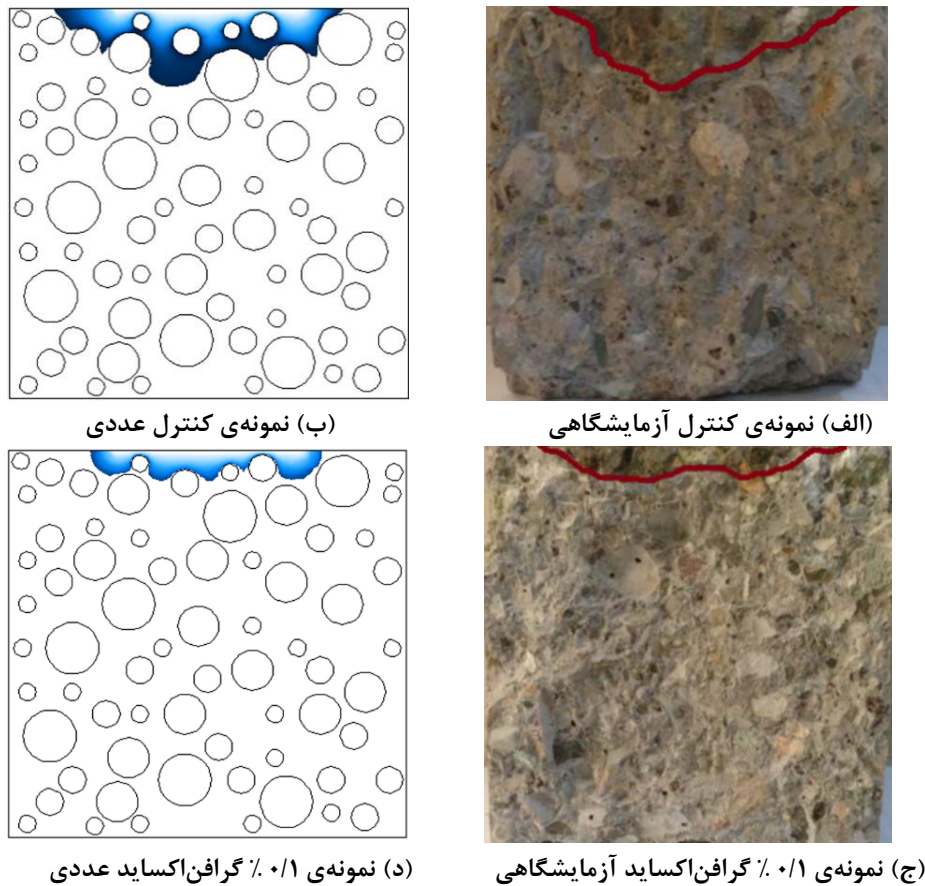
Fig. 15. Results of numerical and experimental models.

با مقایسه‌ی نتایج آزمایشگاهی حجم نفوذ آب با مقادیر متناظر در شبیه‌سازی عددی، تطابق نزدیکی با نتایج آزمایشگاهی مشاهده شد.

در ادامه روش پیشنهادی با مقایسه‌ی سطح تر شده در شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی موجود نیز اعتبارسنجی می‌شود. سطح تر شده‌ی واقعی و پیش‌بینی‌شده در نمونه‌ی کنترل و نمونه‌های تقویت شده با ۰/۱ درصد وزنی سیمان گرافن اکساید تحت فشار $p = 0.95 \text{ MPa}$ بعد از گذشت ۵

با استفاده از رابطه‌ی (۱۲)، مقدار K_s برای نمونه‌های خمیر سیمان محاسبه شد. زمان انجام آنالیز ۵ ساعت و با گام‌های زمانی یک دقیقه در نظر گرفته شد.

شکل ۱۵ نتایج عددی و آزمایشگاهی عمق نفوذ آب برای نمونه‌هایی با GONPs های ۰، ۰/۰۲۵، ۰/۰۰۵ و ۰/۰۱ درصد bwoc تحت فشارهای هیدرواستاتیک 0.15 MPa، 0.25 MPa، 0.55 MPa، 0.75 MPa و 0.95 MPa را نشان می‌دهد.



شکل ۱۶. سطح تر شده بعد از گذشت ۵ ساعت و تحت فشار ۰/۹۵ MPa

Fig. 16. Observation of wetting front at 5 h under the water pressure of 0.95 MPa: (a) control specimen-experimental; (b) control specimen-numerical; (c) GONPs-reinforced specimen with 0.1% bwoc-experimental; (d) GONPs-reinforced specimen with 0.1% bwoc-numerical.

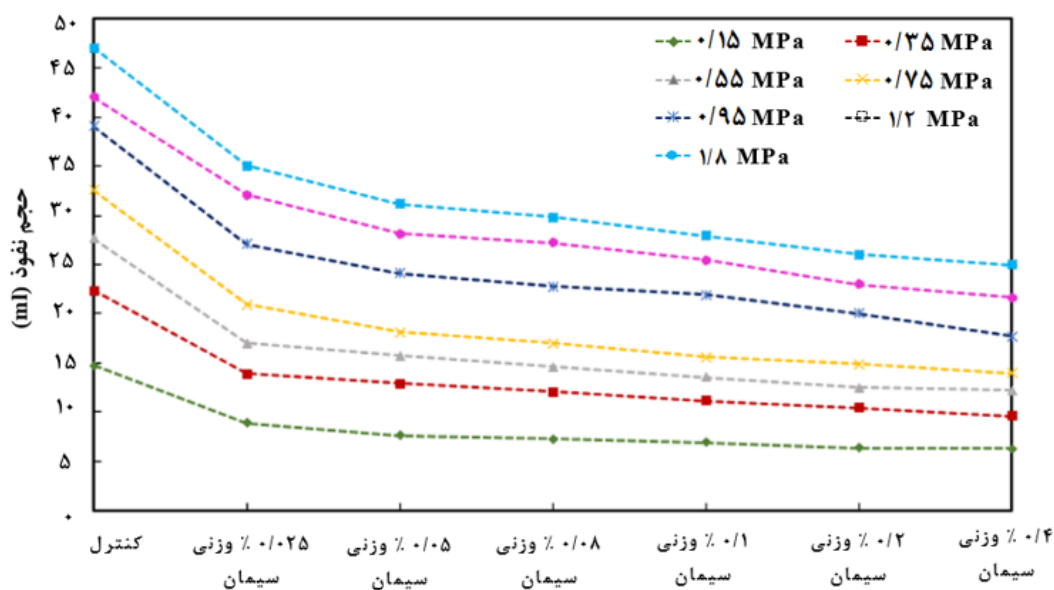
میزان نفوذ آب برای همه‌ی مخلوط‌های دارای GONPs تحت فشارهای مختلف هیدرواستاتیک نسبت به نمونه‌ی کنترل کم است. همچنین نتایج نشان می‌دهد که افزایش در میزان GONPs باعث کاهش بیشتر در حجم نفوذ می‌شود. همان‌طور که در شکل ۱۸ نشان داده شده است، افزودن bwoc ۰/۴ - ۰/۰۲۵٪ GONPs حجم نفوذ را بین ۲۵٪ تا ۵۷٪ کاهش می‌دهد.

در شکل ۱۹ نمودار حجم نفوذ آب در نمونه‌های بتنی کنترل و تقویت شده با GONPs در طی ۵ ساعت و تحت فشار هیدرواستاتیک ثابت ۰/۳۵ مگاپاسکال نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، روند تغییرات حجم نفوذ آب با زمان برای نمونه‌ی کنترل و نمونه‌های مسلح به گرافن اکساید تقریباً یکسان هستند. برای مخلوط کنترل، فرایند انتقال آب

ساعت در شکل ۱۶ نشان داده شده است. می‌توان مشاهده کرد که نتایج عددی با داده‌های آزمایشگاهی اختلاف ناچیزی دارد. خاطرنشان می‌شود که توزیع تصادفی سنگدانه‌ها، سطح تر شده را تحت تأثیر قرار می‌دهند. در نتیجه، مدل عددی ارائه شده برای پیش‌بینی فرایند انتقال آب در نمونه‌های بتنی ساده و مسلح به GONPs کارآمد است.

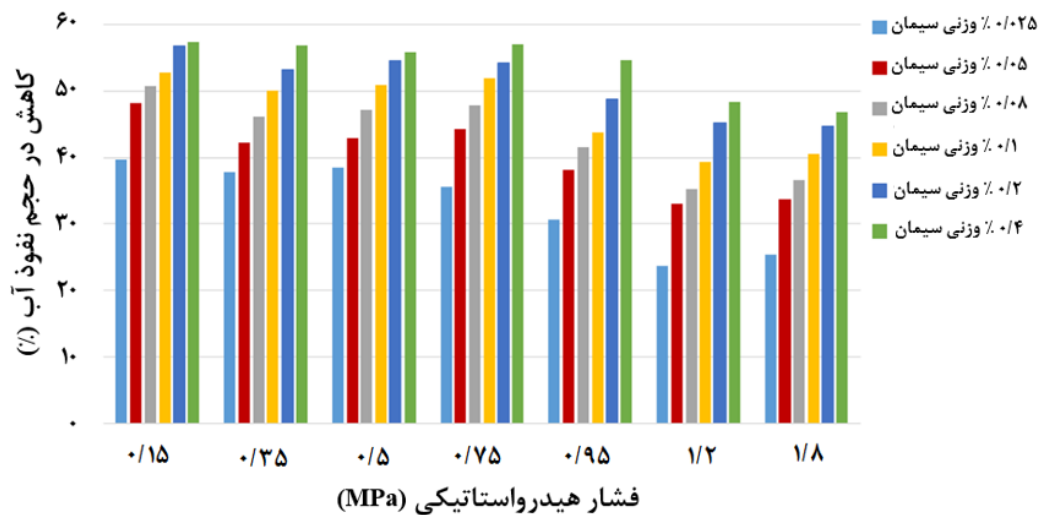
با توجه به کارایی مدل عددی پیشنهادی در پیش‌بینی رفتار انتقال آب در بتن غیراشباع، نمونه‌های دیگری با محدوده‌ی GONPs گسترده‌تر (۰/۰۵ ، ۰/۰۸ ، ۰/۱ ، ۰/۲ و ۰/۴ bwoc) و تحت فشارهای هیدرواستاتیک بالاتر (حداکثر ۱/۸ MPa) تحت آزمایش قرار گرفتند.

شکل ۱۷ حجم نفوذ آب در نمونه‌ها را پس از گذشت ۵ ساعت و تحت فشارهای مختلف هیدرواستاتیک نشان می‌دهد. می‌توان مشاهده کرد که



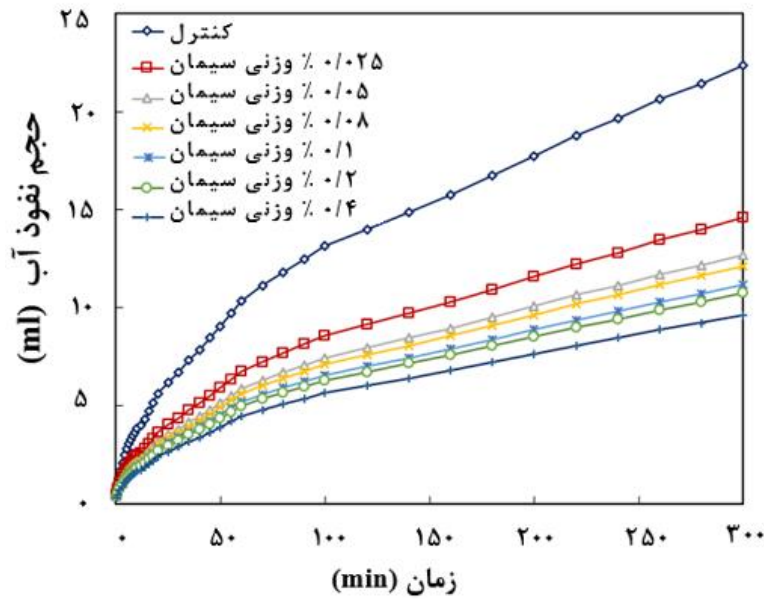
شکل ۱۷. حجم نفوذ آب بعد از گذشت ۵ ساعت در نمونه‌ها

Fig. 17. Penetration volume for specimens with different dosages of GONPs after 5 h and under different hydrostatic pressures



شکل ۱۸. کاهش در میزان حجم نفوذ تجمعی در نمونه‌ها با درصدهای مختلف گرافن اکساید و تحت فشارهای هیدرواستاتیک متفاوت اعمالی

Fig. 18. Decrease in penetration volume for specimens with different dosages of GONPs after 5 h and under different hydrostatic pressures.



شکل ۱۹. منحنی حجم نفوذ در مقابل زمان در نمونه‌های با درصد‌های متفاوت گرافن اکساید تحت فشار هیدرواستاتیک ثابت ۰/۳۵ مگاپاسکال

Fig. 19. Water penetration volume curve versus time in samples with different dosages of graphene oxide under constant hydrostatic pressure 0.35 MPa

۴- نتایج

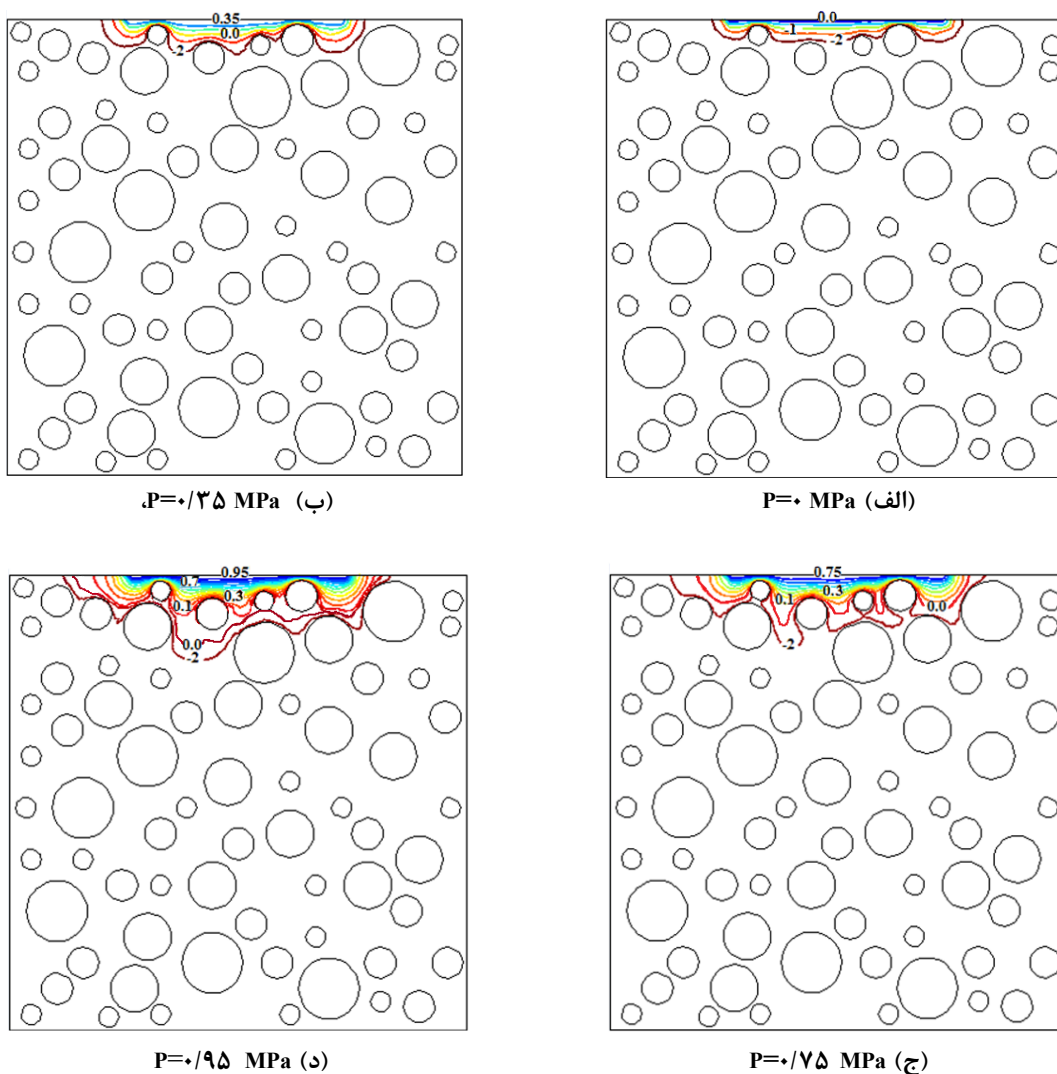
در این مقاله رویکرد تحلیل چندمقیاسی به منظور شبیه‌سازی جریان اشباع نشده در بتن مسلح به گرافن اکساید به کار گرفته شد. در مقیاس نانو مشخصه‌های انتقال در کانال CSH مورد ارزیابی قرار گرفت، در مقیاس میکرو شبیه‌سازی انتقال آب در سیمان هیدراته مدل‌سازی و تحلیل شد و در مقیاس مزو مدل سه فازی بتن به منظور شبیه‌سازی جریان اشباع نشده مدل‌سازی و مورد بررسی قرار گرفت. به منظور بررسی قابلیت اطمینان و کارایی رویکرد تحلیل چند مقیاسی ارائه شده در این مقاله، نتایج حاصل از مدل‌سازی‌های عددی با نتایج آزمایشگاهی انجام گرفته در این پژوهش مقایسه شدند. نتایج به شرح زیر است:

۱- با مقایسه‌ی سطح تر شده و حجم نفوذ آب در شبیه‌سازی عددی با داده‌های آزمایشگاهی موجود نشان داده شد که رویکرد تحلیل چند مقیاسی می‌تواند پیش‌بینی قابل قبولی از فرایند انتقال آب در بتن اشباع نشده را ارائه دهد.

۲- به دلیل از بین رفتن اندرکنش بین مولکول‌های آب و ژل کلسیم سیلیکات هیدراته و تضعیف شدن جذب موئینه با افزودن صفحات گرافن اکساید، مقادیر عمق نفوذ آب و MSD در نمونه‌ی تقویت شده

را می‌توان به دو مرحله تقسیم کرد. در ۷۰ دقیقه‌ی اول، حجم نفوذ آب به صورت خطی با زمان افزایش می‌یابد. سپس، سرعت نفوذ آب آرام شده و به تدریج از مرحله‌ی خطی خارج می‌شود و رابطه‌ی خطی دیگری با زمان اما با شیب کمتر را دنبال می‌کند. رویکرد انتقال آب در نمونه‌های حاوی گرافن اکساید، با نمونه‌ی کنترل یکسان بوده و تنها شیب نمودار در هر دو مرحله از شیب گراف نمونه‌های کنترل کمتر است. در واقع نرخ جریان در نمونه‌های مسلح به گرافن اکساید نسبت به نمونه‌های کنترل کمتر می‌باشد. این کاهش در نرخ جریان می‌تواند به دلیل بهبود ساختار بتن و تشکیل بتنی با حفرات ریزتر باشد.

توزیع هد فشار بر روی سطح مقطع مرکزی نمونه‌ی کنترل بعد از گذشت ۵ ساعت در شکل ۲۰ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در جهت حرکت آب، هد فشار به تدریج از حداکثر مقدار در مرز بالا به ۲ MPa کاهش می‌یابد. منطقه بین سطح بالا و فشار صفر منطقه‌ی اشباع و منطقه‌ی از فشار صفر تا فشار ۲- مگاپاسکال منطقه‌ی غیراشباع یا موئینه نامیده می‌شود. با افزایش فشار هیدرواستاتیکی اعمالی در مرز بالا، ضخامت ناحیه‌ی اشباع افزایش می‌یابد در حالی که از ضخامت ناحیه‌ی غیراشباع کاسته می‌شود.



شکل ۲۰. کانتور هد فشار در مقطع مرکزی نمونه‌ی کنترل بعد از گذشت ۵ ساعت تحت فشار هیدرواستاتیکی اعمالی

Fig. 20. Head pressure contour of control sample after 5 hours under applied hydrostatic pressure (a) P=0 MPa, (b) P=0.35 MPa, (c) P=0.75 MPa, (d) P=0.95 MPa

به نمونه‌های کنترل کمتر است.

کاهش یافته و مولکول‌های آب در منافذ CSH تقویت شده با ورق‌های GONPs کندتر حرکت می‌کنند.

۵- فهرست علائم

علائم انگلیسی

وزن نمونه در حالت خشک ، Kg	W_1
وزن نمونه داخل ، Kg	W_2
حجم نمونه، m^3	V_s
ضریب نفوذپذیری، mm/min	$K(\theta)$
ضریب پراکنندگی هیدرولیکی ، mm^2/min	$D(\theta)$

۳- نتایج شبیه‌سازی جریان آب در بتن اشباع نشده در مقیاس مزو نشان داد که تحت فشارهای مختلف هیدرواستاتیک میزان نفوذ آب برای همه مخلوط‌های دارای GONPs نسبت به نمونه‌ی کنترل کاهش داشته است. کاهش در میزان نفوذ آب را می‌توان به بهبود ساختار منافذ موئینه و موانع تشکیل شده توسط ذرات گرافن اکساید نسبت داد.

۴- به دلیل تأثیر گرافن اکسایدها در بهبود ساختار کامپوزیت و تشکیل بتنی با حفرات ریزتر، نرخ جریان در نمونه‌های مسلح به گرافن اکساید نسبت

- estimation of water penetration into unsaturated concrete, *Materials and Structures*, 32(5) (1999) 342-347.
- [11] C. Zhou, General solution of hydraulic diffusivity from sorptivity test, *Cement and Concrete Research*, 58 (2014) 152-160.
- [12] X. Li, S. Chen, Q. Xu, Y. Xu, Modeling the three-dimensional unsaturated water transport in concrete at the mesoscale, *Computers & Structures*, 190 (2017) 61-74.
- [13] M. Eftekhari, S. Mohammadi, Multiscale dynamic fracture behavior of the carbon nanotube reinforced concrete under impact loading, *International Journal of Impact Engineering*, 87 (2016) 55-64.
- [14] S. Bishnoi, K.L. Scrivener, μ ic: A new platform for modelling the hydration of cements, *Cement and Concrete Research*, 39(4) (2009) 266-274.
- [15] C. Li, J. Zheng, X. Zhou, M. McCarthy, A numerical method for the prediction of elastic modulus of concrete, *Magazine of Concrete Research*, 55(6) (2003) 497-505.
- [16] Y. Saez de Ibarra, J. Gaitero, E. Erkizia, I. Campillo, Atomic force microscopy and nanoindentation of cement pastes with nanotube dispersions, *Physica Status solidi (a)*, 203(6) (2006) 1076-1081.
- [17] B. Han, X. Guan, J. Ou, Application of ultrasound for preparation of carbon fiber cement-based composites, *Mater. Sci. Technol*, 17(3) (2009) 368-372.
- [18] C. ASTM, Standard practice for making and curing concrete test specimens in the field, in, (2012).
- [19] M. Naderi, Registration of Patent in Companies and industrial property Office, "Determination of concrete, stone, mortar, brick and other construction materials permeability with cylindrical chamber method.", in, Reg, (2010), (in Persian).
- [20] C. Hall, W.D. Hoff, Water transport in brick, stone and concrete, CRC Press, (2011).
- [21] C. Hall, Water sorptivity of mortars and concretes: a review, *Magazine of Concrete Research*, 41(147) (1989)51-61.
- [22] C. Leech, D. Lockington, P. Dux, Unsaturated
- [1] N. Banthia, A. Biparva, S. Mindess, Permeability of concrete under stress, *Cement and Concrete Research*, 35(9) (2005) 1651-1655.
- [2] R.K. Abu Al-Rub, B.M. Tyson, A. Yazdanbakhsh, Z. Grasley, Mechanical properties of nanocomposite cement incorporating surface-treated and untreated carbon nanotubes and carbon nanofibers, *Journal of nanomechanics and micromechanics*, 2(1) (2012) 1-6.
- [3] J. Bharj, Experimental study on compressive strength of cement-CNT composite paste, *Indian Journal of Pure & Applied Physics (IJPAP)*, 52(1) (2015) 35-38.
- [4] T. Manzur, N. Yazdani, M.A.B. Emon, Effect of carbon nanotube size on compressive strengths of nanotube reinforced cementitious composites, *Journal of Materials*, 2014 (2014) 1-8.
- [5] B. Han, Z. Yang, X. Shi, X. Yu, Transport properties of carbon-nanotube/cement composites, *Journal of Materials Engineering and Performance*, 22(1) (2013) 184-189.
- [6] Y. Zhu, S. Murali, W. Cai, X. Li, J.W. Suk, J.R. Potts, R.S. Ruoff, Graphene and graphene oxide: synthesis, properties, and applications, *Advanced materials*, 22(35) (2010) 3906-3924.
- [7] S. Stankovich, D.A. Dikin, G.H. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.J. Zimney, E.A. Stach, R.D. Piner, S.T. Nguyen, R.S. Ruoff, Graphene-based composite materials, *nature*, 442(7100) (2006) 282-286.
- [8] H. Cui, X. Yan, L. Tang, F. Xing, Possible pitfall in sample preparation for SEM analysis-A discussion of the paper "Fabrication of polycarboxylate/graphene oxide nanosheet composites by copolymerization for reinforcing and toughening cement composites" by Lv et al, *Cement and Concrete Composites*, 77 (2017) 81-85.
- [9] Z. Pan, L. He, L. Qiu, A.H. Korayem, G. Li, J.W. Zhu, F. Collins, D. Li, W.H. Duan, M.C. Wang, Mechanical properties and microstructure of a graphene oxide-cement composite, *Cement and Concrete Composites*, 58 (2015)140-147.
- [10] D. Lockington, J.-Y. Parlange, P. Dux, Sorptivity and the

- [28] H. Ma, Z. Li, Realistic pore structure of Portland cement paste: experimental study and numerical simulation, *Computers and Concrete*, 11(4) (2013) 317-336.
- [29] F. Montes, S. Valavala, L.M. Haselbach, A new test method for porosity measurements of portland cement pervious concrete, *Journal of ASTM international*, 2(1) (2005) 1-13.
- [30] M. safarkhani, M. Naderi, Experimental investigation on mechanical and water transport properties of cement composites containing graphene oxide, *Journal of Structural and Construction Engineering*, (2020), (in persian).
- [31] R. T. Cygan, J. J Liang, and A. G. Kalinichev, Molecular models of hydroxide, oxyhydroxide, and clay phases and the development of a general force field, *The Journal of Physical Chemistry B* 108, no. 4 (2004): 1255-1266.
- [32] EN, B., *Admixtures for concrete, mortar and grout-test methods-part 11: determination of air void characteristics in hardened concrete*. British Standards Institution: London, UK, (2005). 480-11.
- diffusivity functions for concrete derived from NMR images, *Materials and Structures*, 36(6) (2003) 413-418.
- [23] J. Davidson, L. Stone, D. Nielsen, M. Larue, Field measurement and use of soil-water properties, *Water Resources Research*, 5(6) (1969) 1312-1321.
- [24] Q. Ji, R.J.-M. Pellenq, K.J. Van Vliet, Comparison of computational water models for simulation of calcium-silicate-hydrate, *Computational Materials Science*, 53(1) (2012) 234-240.
- [25] W. Zhang, S. Li, D. Hou, Y. Geng, S. Zhang, B. Yin, X. Li, Study on unsaturated transport of cement-based silane sol coating materials, *Coatings*, 9(7) (2019) 427.
- [26] M.A. Qomi, K.J. Krakowiak, M. Bauchy, K.L. Stewart, R. Shahsavari, D. Jagannathan, D.B. Brommer, A. Baronnet, M.J. Buehler, S. Yip, and F.J. Ulm, Combinatorial molecular optimization of cement hydrates. *Nature communications*, 5(1) (2014) pp.1-10.
- [27] H. Ma, D. Hou, Y. Lu, Z. Li, Two-scale modeling of the capillary network in hydrated cement paste, *Construction and Building Materials*, 64 (2014) 11-21.

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

M. Safarkhani, M. Naderi, Numerical study on water penetration in graphene oxide reinforced concrete by the multiscale approach, *Amirkabir J. Civil Eng.*, 54(4) (2022) 1249-1272.

DOI: [10.22060/ceej.2021.19357.7145](https://doi.org/10.22060/ceej.2021.19357.7145)



