УДК 691.542

DOI 10.52928/2070-1683-2024-39-4-18-24

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЛАГИ В ПОРОВОЙ СРЕДЕ ЦЕМЕНТНОГО КАМНЯ В РАННЕМ ВОЗРАСТЕ

канд. техн. наук В.В. КРАВЧЕНКО (Брестский государственный технический университет) vvkravchenko@g.bstu.by

Существующие подходы к моделированию распределения свободной влаги в поровой структуре цементного камня основаны на уравнении Ричардса, основным параметром которого является коэффициент фильтрации влаги. Для его численного определения необходимы зависимости, связывающие величину капиллярного давления с количеством влаги в поровой среде. На практике для этого наиболее часто используют феноменологические уравнения ван Генухтена. Такой подход не является оптимальным, поскольку для таких феноменологических моделей необходимо экспериментальное обеспечение с целью подбора (установления) необходимых параметров.

В данной статье предложено вместо феноменологических уравнений ван Генухтена использовать условие термодинамического равновесия в поровой среде на основе распределения пор цементного камня по размерам, зависящего от единственного структурного параметра, приблизительная оценка которого может быть получена из вычислительных моделей развития микроструктуры цементного камня, что позволяет не прибегать к трудоемким экспериментальным исследованиям для подбора необходимых параметров.

Ключевые слова: цементный камень, фильтрация влаги, диффузия водяного пара, капиллярное давление, распределение пор по размерам.

Введение. Цементный камень является ключевой фазой композитов на основе цемента, оказывающей существенное влияние на их физико-механические характеристики. В классическом представлении цементный камень – композит, характеризующийся чрезвычайно сложной и неоднородной пористой структурой, формирующейся в процессе гидратации.

С момента образования начальной жесткости цементного камня, в его полностью заполненных водой затворения порах начинают возникать пространства, заполненные газообразной фазой, являющиеся следствием потребления свободной воды из поровой среды на реакции гидратации. Появление газообразной фазы в поровой среде цементного камня приводит к возникновению капиллярного давления, сопровождающегося снижением относительной влажности и являющегося одним из основных факторов, обуславливающих такой вид собственных деформаций, как усадка. В зависимости от водоцементного отношения и условий твердения проявляется либо воздушная усадка (характерная для высоких значений водоцементного отношения и условий твердения, при которых наблюдается физико-химическое взаимодействие с окружающей средой), либо аутогенная усадка (характерная для низких значений водоцементного отношения).

Развитие усадки в условиях ограничения, например, зерен заполнителя в свою очередь является основной причиной возникновения микротрещин в структуре цементного камня в процессе гидратации.

Моделирование распределения свободной влаги в поровой структуре цементного камня позволяет определять основные параметры термодинамического состояния в поровой среде цементного камня (например, количество влаги в определенной точке его объема, относительную влажность, значение капиллярного давления и др.), которые являются данными, необходимыми для прогнозирования основных механизмов, обуславливающих возникновение и развитие усадки в его структуре, являясь, таким образом, одной из актуальных задач в теории бетоноведения.

В данной статье представлена модель распределения влаги в поровой среде цементного камня, основанная на уравнении Ричардса, для которого ключевые параметры определяют исходя из условия термодинамического равновесия в поровой среде, используя вероятностную модель распределения пор по размерам.

Математическая модель. Большинство из существующих моделей распределения влаги в поровой среде цементного камня основаны на уравнении Ричардса, описывающем фильтрацию влаги в ненасыщенных почвах. Оно может быть представлено в нескольких формах, базовая из которых имеет следующий вид [1]:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{q} + S = 0, \tag{1}$$

где θ – относительное содержание влаги, м³/м³;

 \vec{q} – плотность потока влаги, 1/с;

S -сток влаги, 1/c;

t – время, с.

Рассматривая цементный камень как изотропный материал, уравнение (1) применительно к его поровой среде можно записать в следующей одномерной форме:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D(\theta) \frac{\partial\theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial\theta_{hyd}}{\partial t} = 0, \tag{2}$$

где $D(\theta)$ – коэффициент фильтрации влаги в ненасыщенной поровой среде, м²/с;

 $\frac{\partial \theta_{hyd}}{\partial t}$ – потребление влаги на реакции гидратации, (м³/м³)/с.

Применительно к поровой среде цементного камня, механизм фильтрации влаги включает два термодинамических процесса: фильтрацию жидкости, обусловленную законом Дарси ($D_l(\theta)$), и диффузию водяного пара, обусловленную первым законом Фика ($D_v(\theta)$) [2].

Уравнение (2) предполагает два основных допущения:

 перенос водяного пара регулируется чистым диффузионным процессом т.е. адвективный поток газа пренебрежимо мал по отношению к диффузионному потоку газообразной фазы, состоящей из смеси сухого воздуха и водяного пара;

2) давление газообразной фазы является постоянным в течение процесса гидратации.

Тогда, используя закон Дарси, первый закон Фика и закон Дальтона для смеси газов, коэффициент фильтрации влаги в ненасыщенной поровой среде цементного камня можно представить в виде суммы двух компонентов [2; 3]:

$$D(\theta) = D_l(\theta) + D_v(\theta) = \frac{k_{eff}}{\eta_l} \cdot \frac{\partial p_c}{\partial \theta} + \frac{D_{eff}}{p_v} \cdot \left(\frac{\rho_v}{\rho_l}\right)^2 \cdot \frac{\partial p_c}{\partial \theta},\tag{3}$$

где η_l – динамическая вязкость жидкости, Па·с;

*p*_{*c*} – капиллярное давление, Па;

 p_v – давление водяного пара, Па;

 ρ_v – плотность водяного пара, кг/м³;

 ρ_l – плотность жидкости, кг/м³;

 k_{eff} – эффективный коэффициент проницаемости, м², который для ненасыщенной поровой среды цементного камня определяют как [2; 3]:

$$k_{eff} = k \cdot k_r(\theta); \tag{4}$$

k – абсолютный коэффициент проницаемости, м²;

k_r – относительный коэффициент проницаемости жидкой фазы;

 D_{eff} – коэффициент диффузии водяного пара, м²/с, определяемый как [2]:

$$D_{eff} = f(\theta, \phi) \cdot D_0 \cdot \frac{p_{atm}}{p_g} \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1,88};$$
(5)

 $f(\theta, \phi)$ – коэффициент эффективности диффузии в пористой среде цементного камня;

 ϕ – относительный объем пористости цементного камня, м³/м³;

 D_0 – коэффициент диффузии водяных паров в воздухе при температуре 273,15 К и атмосферном давлении, м²/с; p_{atm} – атмосферное давление, Па;

p_g – давление газообразной фазы, Па;

T – фактическая абсолютная температура, К;

*T*₀ – абсолютная температура равная 273,15 К.

Следует отметить, что в большинстве существующих моделей используется несколько иная форма уравнения (2), выраженная через степень насыщения пор влагой *S*, которую получают, используя соотношение $\theta = \phi \cdot S$.

Ключевыми параметрами представленной модели в зависимости от используемой формы являются зависимости: $p_c(\theta)$ ($p_c(S)$) и $k_r(\theta)$ ($k_r(S)$). Существующий подход к определению этих двух зависимостей основан на феноменологических моделях, предложенных ван Генухтеном [2; 4]:

$$p_c(S) = a \cdot (S^{-b} - 1)^{1 - \frac{1}{b}};$$
(6)

$$k_r(S) = \sqrt{S} \cdot \left(1 - \left(1 - S^{\frac{1}{m}}\right)^m\right)^2, m = \frac{1}{b},$$
(7)

где *а*, *b* – подбираемые параметры, зависящие от микроструктуры материала, *a* в Па;

Существенный недостаток представленных моделей – сложность в определении параметров *a* и *b*. Классический подход основан на экспериментальном построении изотерм сорбции и десорбции водяного пара для исследуемой структуры цементного камня, на основе которых путем аппроксимации подбирают оптимальные значения указанных параметров. Этот подход является трудоемким и требующим специального оборудования. Другой подход связан с аппроксимацией параметров по уже проведенным подобным исследованиям. Однако и он имеет ограничения, связанные с малым количеством выполненных исследований, что сильно снижает достоверность подбираемых параметров. По сути, большинство существующих моделей распределения влаги в цементном камне используют данные лишь нескольких подобных исследований [3–5].

Более гибким подходом является оценка капиллярного давления и эффективного коэффициента проницаемости исходя из термодинамического равновесия пористой среды на основе вычислительной модели распределения пор по размерам, для которой единственный параметр может быть определен при моделировании развития микроструктуры цементного камня в процессе гидратации, позволяя не прибегать к трудоемким экспериментальным исследованиям.

Термодинамическое равновесие пористой среды. Вероятностная модель распределения пор по размерам может быть представлена упрощенным унимодальным вероятностным распределением Рэлея-Ритца [6]:

$$V(r) = 1 - e^{-B \cdot r},\tag{8}$$

где V – относительный объем пор до радиуса r;

r – радиус пор, м;

B – структурный параметр, соответствующий максимуму функции плотности вероятности распределения пор, 1/м.

Распределение пор цементного камня по размерам позволяет оценить количество воды, находящейся в поровой среде при заданной относительной влажности. Для этого нужно выразить условие термодинамического равновесия между жидкостью и водяным паром в поровой среде, при котором все поры радиусов, меньших r_c , будут полностью заполнены влагой, тогда как остальные будут обезвоженными. Принимая допущение, что миграция влаги в цементном камне происходит в основном только через капиллярные поры, условие термодинамического равновесия пористой среды записывают следующим образом [6]:

$$S(r_{\rm c}) = \int_0^{r_{\rm c}} \frac{dV}{dr} dr = 1 - e^{-B_{\rm c} \cdot r_{\rm c}},\tag{9}$$

где *r*_c – радиус капиллярных пор с менисками, м;

*B*_c – структурный параметр распределения капиллярных пор, 1/м.

Вместе с тем, условие (9) не совсем точно описывает состояние пористой среды цементного камня в процессе гидратации. Имея преимущественно капиллярное строение, пористая среда обладает классической S-образной формой изотермы сорбции-десорбции. Это обуславливает тот факт, что в процессе высыхания некоторое количество воды будет находиться в порах, с радиусами больше, чем r_c (рисунок 1).



Рисунок 1. – Распределение влаги в поровой среде цементного камня в процессе гидратации, по данным [6]

Поэтому степень насыщения пор влагой является суммой двух компонентов – степени насыщения пор, соответствующей количеству воды в полностью адсорбированных влагой порах (S_c), и степени насыщения части пор, соответствующей количеству воды в частично адсорбированных влагой порах (S_{ink}):

$$S = S_{\rm c} + S_{ink}.\tag{10}$$

Согласно [6], общую степень насыщения пор влагой можно выразить как:

$$S = S_{c} + S_{ink} = S_{c} \cdot (1 - \ln(S_{c})).$$
(11)

На основании уравнения (9) и (11) получаем следующую зависимость для определения r_c :

$$r_{\rm c} = -\frac{\ln\left(1 - S_{\rm c} \cdot (1 - \ln(S_{\rm c}))\right)}{B_{\rm c}},\tag{12}$$

используя которое, на основании закона Лапласа, определяют капиллярное давление:

$$p_{\rm c} = -\frac{2\cdot\gamma_{\rm w}}{r_{\rm c}},\tag{13}$$

где γ_w – поверхностное натяжение воды, Н/м.

В предложенном подходе ключевым параметром является параметр *B*_c, который можно с определенной погрешностью определить, предполагая, что все капиллярные поры имеют цилиндрическую форму. В таком случае параметр фактически является функцией, зависящей от удельной площади поверхности пор и относительного объема капиллярной пористости. Существует достаточное количество моделей микроструктуры цементного камня, позволяющих оценивать удельную площадь поверхности пор в процессе гидратации, например, одна из самых простых – модель единичной ячейки [7].

Эффективный коэффициент проницаемости. Проницаемость в ненасыщенных пористых средах характеризуется двумя основными параметрами: абсолютной проницаемости, соответствующей состоянию, при котором поры полностью заполнены влагой, и некоторой функции, учитывающей уменьшение количества воды в порах, через которые проходит поток миграции влаги в процессе гидратации.

Абсолютную проницаемость определяют экспериментально посредством вакуумного насыщения образца материала в воде под определенным давлением. Однако этот метод не совсем подходит для пористой структуры цементного камня, поскольку при низких значениях водоцементного отношения она становится слабопроницаемой. Еще одним способом оценки абсолютной проницаемости является общеизвестная модель проницаемости пористого тела Катца-Томпсона [8], зависящая от двух параметров: критического диаметра пор и соотношения между электропроводимостью в поровой среде и электропроводимостью поровой среды, определение которых для материалов на основе цемента является достаточно нетривиальной задачей, сильно зависящей от исследуемого состава.

Учитывая существующую сложность с определением абсолютной проницаемости, в практических целях можно использовать ранее описанный подход на основе вероятностной модели распределения пор и условия термодинамического равновесия между жидкостью и водяным паром в поровой среде, поскольку очевидно, что проницаемость пористой среды зависит от объема пор, которые полностью заполнены и связаны между собой, т.е. пор, которые лежат ниже r_c (см. рисунок 1). В работе [6] предложена следующая зависимость для определения эффективного коэффициента проницаемости исходя из условия термодинамического равновесия в поровой среде цементного камня:

$$k_{eff} = \frac{\phi_{c}^{2}}{50} \cdot \left(\int_{0}^{r_{c}} r dV\right)^{2},$$
(14)

где ϕ_c – относительный объем капиллярной пористости, м³/м³.

Перколяция твердой фазы цементного камня. Цементное тесто после затворения водой находится до определенного момента в пластическом состоянии, в котором частицы цемента связаны между собой силами Ван-дер-Ваальса. По мере образования продуктов гидратации на поверхности частиц цемента, в некоторый момент времени происходит их объединение в единый кластер (в строительной практике имеющий термин – начало схватывания), обладающий некоторой начальной жесткостью и прочностью. Этот момент времени принято называть порогом перколяции твердой фазы.

Очевидно, можно предположить, что до момента порога перколяции твердой фазы в цементной системе два механизма диффузии влаги либо отсутствуют, либо их влияние незначительно, что в конечном итоге приводит к следующей системе уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{\partial\theta_{hyd}}{\partial t} = 0, t < t_{per} \\ \frac{\partial\theta}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D(\theta) \frac{\partial\theta}{\partial x} \right) + \frac{\partial\theta_{hyd}}{\partial t} = 0, t \ge t_{per} \end{cases},$$
(15)

где t_{per} – момент времени, соответствующий порогу перколяции твердой фазы.

Вариационная формулировка. Решение дифференциального уравнения (2) осуществляют численными методами – методом конечных разностей или методом конечных элементов. В данной работе использован метод конечных элементов, для которого вариационная постановка имеет следующий вид:

$$\int_{0}^{L} \frac{\partial \theta}{\partial t} v dx + v D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{0}^{L} - \int_{0}^{L} D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \int_{0}^{L} \frac{\partial \theta_{hyd}}{\partial t} v dx = 0,$$
(16)

где θ – тестовая функция;

- v пробная функция;
- L линейный размер области решения задачи, м.

Используя неявный метод Эйлера для дискретизации по времени, вариационная формулировка (16) примет следующий вид:

$$\int_{0}^{L} \left(\frac{\theta_{i} - \theta_{i-1}}{\Delta t}\right) v dx + v D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{0}^{L} - \int_{0}^{L} D(\theta_{i}) \frac{\partial \theta_{i}}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dx + \int_{0}^{L} \left(\frac{(\theta_{hyd})_{i} - (\theta_{hyd})_{i-1}}{\Delta t}\right) v dx = 0,$$
(17)

где *i* – произвольный временной интервал;

 Δt – шаг дискретизации по времени, $\Delta t = t_i - t_{i-1}$, с.

Поскольку уравнение (17) является нелинейным относительно θ_i , одно из возможных решений – использовать метод простой итерации для его линеаризации, когда в пределах каждого временного шага выполняют еще одну итерацию для последовательного вычисления θ_i :

$$\int_{0}^{L} \left(\frac{\theta_{i,j}}{\Delta t}\right) v dx + v D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \Big|_{0}^{L} - \int_{0}^{L} D\left(\theta_{i,j-1}\right) \frac{\partial \theta_{i,j}}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} dV = \int_{0}^{L} \left(\frac{\theta_{i-1}}{\Delta t}\right) v dx - \int_{0}^{L} \left(\frac{(\theta_{hyd})_{i} - (\theta_{hyd})_{i-1}}{\Delta t}\right) v dx, \quad (18)$$

где *j* – произвольная итерация линеаризации.

Для нахождения решения уравнения (18) использованы следующие начальные и граничные условия для уравнения:

1) начальное условие:

$$\theta_0 = \theta_{w,0},\tag{19}$$

где $\theta_{w,0}$ – объемное содержание воды в цементном камне в начальный момент времени (момент затворения водой), M^{3}/M^{3} ;

2) естественное граничное условие (условие Неймана) [9]:

$$-D(\theta)\frac{\partial\theta}{\partial x}n = \theta \cdot \frac{E}{\rho_l} \cdot \left(p_v - p_{v,e}\right),\tag{20}$$

где *n* – единичная нормаль к границе рассматриваемой области;

E – коэффициент влагопроводности, кг/(м²·с·Па);

 p_v – давление водяного пара на поверхности рассматриваемой области, Па;

 $p_{v,e}$ – давление водяного пара в окружающей среде, Па.

Результаты моделирования. Для сравнительной оценки предлагаемого подхода к распределению влаги в поровой среде цементного камня исходя из условия термодинамического равновесия, проведено его численное моделирование совместно с существующим подходом на основе моделей ван Генухтена.

Для моделирования использованы следующие исходные данные:

- 1) состав цементного камня: портландцемент 370 кг/м³, вода 185 кг/м³;
- 2) абсолютная температура окружающей среды (T): 293,15 К (20 °C);
- 3) плотность портландцемента: 3150 кг/м³;
- 4) атмосферное давление (*p*_{atm}): 101325 Па;

5) коэффициент диффузии водяных паров в воздухе (D_0) при температуре 273,15 К и атмосферном давлении: 2,17·10⁻⁵ м²/c [2];

- 6) коэффициент эффективности диффузии ($f(\theta, \phi)$): 0,01;
- 7) параметры *а* и *b* в модели ван Генухтена: 18,6237 МПа и 2,2748 МПа соответственно [2];
- абсолютный коэффициент проницаемости (k): 3·10⁻²¹ м² [2];
- коэффициент влагопроводности (*E*): 2,582 · 10⁻⁸ кг/(м² с Па) [9];
- 10) плотность воды (ρ_l): 1000 кг/м³;
- 11) плотность водяного пара (ρ_{v}): 0,0173 кг/м³;
- 12) динамическая вязкость воды (η_l): 1·10⁻³ Па·с;
- 13) поверхностное натяжение воды (γ_w): 0,073 H/м;
- 14) относительная влажность воздуха в окружающей среде: 50%;
- 15) анализируемый период времени: 10 сут.
- 16) размер области решения: 0,1 м.

Объемное содержание воды в цементном камне в начальный момент времени ($\theta_{w,0}$), относительный объем капиллярной пористости (ϕ_c), относительный объем воды, расходуемый на реакции гидратации (θ_{hyd}) и структурный параметр распределения капиллярных пор (B_c) определены из модели микроструктуры цементного камня [7].

Результаты моделирования представлены на рисунках 2 и 3.



Рисунок 2. – Распределение влаги в поровой среде цементного камня на основе моделей ван Генухтена



Рисунок 3. – Распределение влаги в поровой среде цементного камня исходя из условия термодинамического равновесия

Заключение. В основе существующих моделей для моделирования распределения влаги в поровой среде цементного камня лежит уравнение Ричардса, для которого ключевым параметром является коэффициент фильтрации влаги в ненасыщенной поровой среде. Применительно к поровой среде цементного камня, он складывается из двух компонентов: фильтрации влаги (закон Дарси) и диффузии водяного пара (первый закон Фика). Основная трудность в определении коэффициента фильтрации влаги – необходимость аппроксимации зависимостей «капиллярное давление – степень насыщения пор влагой» и «относительный коэффициент проницаемости жидкой фазы – степень насыщения пор влагой». В большинстве случаев для этого адаптируют математические модели, предложенные ван Генухтеном, для которых, в свою очередь, необходимо осуществлять подбор параметров, соответствующих анализируемой поровой структуре цементного камня, на основе экспериментальных данных, что в конечном итоге приводит к необходимости проведения трудоемких экспериментальных исследований для каждого такого анализируемого состояния.

Предлагаемый подход, описанный в статье, является более гибким, не требующим трудоемких экспериментальных исследований, поскольку основан на условии термодинамического равновесия в поровой среде цементного камня и вероятностной модели распределения пор по размерам, для которой необходим только один структурный параметр распределения капиллярных пор, приближенную оценку которого возможно получить из существующих моделей развития микроструктуры цементного камня в процессе гидратации.

ЛИТЕРАТУРА

- Celia M.A., Bouloutas E.T., Zarba R.L. A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation // Water Resources Research. – 1990. – Vol. 26, iss. 7. – P. 1483–1496. DOI: 10.1029/WR026i007p01483.
- Mainguy M., Coussy O., Baroghel-Bouny V. Role of Air Pressure in Drying of Weakly Permeable Materials // Journal of Engineering Mechanics. – 2001. – Vol. 127, iss. 6. – P. 582–592. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(2001)127:6(582).
- 3. Baroghel-Bouny V. Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials. Part II: Essential tool for assessment of transport properties and for durability prediction // Cement and Concrete Research. 2007. Vol. 37, iss. 3. P. 438–454. DOI: 10.1016/j.cemconres.2006.11.017.

- Characterization and identification of equilibrium and transfer moisture properties for ordinary and high-performance cementitious materials / V. Baroghel-Bouny, M. Mainguy, T. Lassabatere et al. // Cement and Concrete Research. – 1999. – Vol. 29, iss. 8. – P. 1225–1238. DOI: 10.1016/S0008-8846(99)00102-7.
- Baroghel-Bouny V. Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials: Part I: Essential tool for analysis of hygral behaviour and its relation to pore structure // Cement and Concrete Research. – 2007. – Vol. 37, iss. 3. – P. 414–473. DOI: 10.1016/j.cemconres.2006.11.019.
- 6. Maekawa K., Ishida T., Kishi T. Multi-scale Modelling of Structural Concrete. New York: Taylor & Francis Group, 2009. 655 p.
- 7. Кравченко В.В. Моделирование микроструктуры цементного камня на основе модели элементарной ячейки // Вестн. БрГТУ. 2023. № 3. С. 48–53. DOI: 10.36773/1818-1112-2023-132-3-48-53.
- El-Dieb A.S., Hooton R.D. Evaluation of the Katz-Thompson model for estimating the water permeability of cement-based materials from mercury intrusion porosimetry data // Cement and Concrete Research. – 1994. – Vol. 24, iss. 3. – P. 443–455. DOI: 10.1016/0008-8846(94)90131-7.
- 9. Investigation of moisture transport properties of cementitious materials / Z. Zhang, M. Thiery, I. Bayane et al. // Cement and Concrete Research. 2016. Vol. 89. P. 257–268. DOI: 10.1016/j.cemconres.2016.08.013.

REFERENCES

- 1. Celia, M.A., Bouloutas, E.T. & Zarba, R.L. (1990). A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research*, *26*(7), 1483–1496. DOI: 10.1029/WR026i007p01483.
- Mainguy, M., Coussy, O. & Baroghel-Bouny, V. (2001). Role of Air Pressure in Drying of Weakly Permeable Materials. *Journal of Engineering Mechanics*, 127(6), 582–592. DOI: 10.1061/(ASCE)0733-9399(2001)127:6(582).
- 3. Baroghel-Bouny, V. (2007). Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials. Part II: Essential tool for assessment of transport properties and for durability prediction. *Cement and Concrete Research*, *37*(3), 438-454. DOI: 10.1016/j.cemconres.2006.11.017.
- 4. Baroghel-Bouny, V., Mainguy, M., Lassabatere, T. & Coussy, O. (1999). Characterization and identification of equilibrium and transfer moisture properties for ordinary and high-performance cementitious materials. *Cement and Concrete Research*, 29(8), 1225–1238. DOI: 10.1016/S0008-8846(99)00102-7.
- Baroghel-Bouny, V. (2007). Water vapour sorption experiments on hardened cementitious materials: Part I: Essential tool for analysis of hygral behaviour and its relation to pore structure. *Cement and Concrete Research*, 37(3), 414–473. DOI: 10.1016/j.cemconres.2006.11.019.
- 6. Maekawa, K., Ishida, T. & Kishi, T. (2009). Multi-scale Modelling of Structural Concrete. New York: Taylor & Francis Group.
- 7. Kravchenko, V.V. (2023). Microstructure development of the cement paste based on the unit cell model. *Vestn. BSTU*, (3), 48–53. (In Russ., abstr. in Engl.). DOI: 10.36773/1818-1112-2023-132-3-48-53.
- El-Dieb, A.S. & Hooton, R.D. (1994). Evaluation of the Katz-Thompson model for estimating the water permeability of cementbased materials from mercury intrusion porosimetry data. *Cement and Concrete Research*, 24(3), 443–455. DOI: 10.1016/0008-8846(94)90131-7.
- 9. Zhang, Z., Thiery, M., Bayane, I. & Baroghel-Bouny, V. (2016). Investigation of moisture transport properties of cementitious materials. *Cement and Concrete Research*, (89), 257–268. DOI: 10.1016/j.cemconres.2016.08.013.

Поступила 11.11.2024

MODELING OF MOISTURE TRANSPORT IN EARLY-AGE CEMENT PASTE

V. KRAVCHENKO (Brest State Technical University)

The existing approaches to modeling the moisture transport in early-age cement paste are based on the Richards equation, the key parameter of which is the moisture diffusion coefficient. To compute it, it is necessary to find expressions that link capillary pressure with the moisture content in the pore medium. For these purposes, the phenomenological models of van Genuchten are most often taken. The approach like that is not efficient, since such phenomenological models call for experimental data for fitting the necessary parameters.

In this article, instead of the phenomenological models of Van Genuchten, it is proposed to use the thermodynamic equilibrium conditions in the pore medium based on the size pore distribution of cement paste, constituting it from a single structural parameter, an approximate estimate that can be received from existing computational models of the microstructure development of cement paste, which makes it possible not to carry out experimental researches for fitting the necessary parameters.

Keywords: cement paste, water transport, water vapor diffusion, capillary pressure, pore size distribution.