

混凝土中变扩散系数的时间分数阶氯离子扩散模型研究

王一晗¹, 白羽^{1,2,3*}, 张艳^{1,2,3}, 巩璇^{2,4}

¹北京建筑大学理学院, 北京

²北京建筑大学建筑结构与环境修复功能材料北京市重点实验室, 北京

³北京建筑大学大数据建模理论与技术研究所, 北京

⁴北京建筑大学土木与交通工程学院, 北京

Email: buceaby@163.com

收稿日期: 2021年7月23日; 录用日期: 2021年8月15日; 发布日期: 2021年8月24日

摘要

研究氯离子在混凝土中的扩散机理可以有针对性地对混凝土进行修护,从而有效地延长混凝土的耐久性。对于氯离子在混凝土中扩散的一维问题,首先基于Caputo分数阶导数建立了变扩散系数的时间分数阶扩散模型,结合L1算法得到了数值求解该模型的有限差分格式。随后,针对一个实例,利用已有实验数据和最小二乘原理优化了模型中不同暴露时间下分数阶导数的阶数;通过数据拟合得到了时间分数阶导数的阶数与暴露时间之间的关系,进而建立了混凝土中变扩散系数的时间变分数阶的氯离子扩散模型。

关键词

混凝土, 氯离子扩散, 分数阶导数, 有限差分方法

Research on the Time-Fractional Diffusion Model of Chloride Ion with Variable Diffusion Coefficient in Concrete

Yihan Wang¹, Yu Bai^{1,2,3*}, Yan Zhang^{1,2,3}, Xuan Gong^{2,4}

¹School of Science, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing

²Beijing Key Laboratory of Functional Materials for Building Structure and Environment Remediation, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing

³Institute of Big Data Modelling and Technology, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing

*通讯作者。

文章引用: 王一晗, 白羽, 张艳, 巩璇. 混凝土中变扩散系数的时间分数阶氯离子扩散模型研究[J]. 应用数学进展, 2021, 10(8): 2853-2861. DOI: 10.12677/aam.2021.108297

⁴School of Civil and Transportation Engineering, Beijing University of Civil Engineering and Architecture, Beijing
Email: ^{*}buceaby@163.com

Received: Jul. 23rd, 2021; accepted: Aug. 15th, 2021; published: Aug. 24th, 2021

Abstract

Research on the diffusion mechanism of Chloride ion in concrete can be applied to repair concrete, which can effectively prolong the durability of concrete. This paper is focusing on one-dimensional diffusion of Chloride ion in concrete. Firstly, the time-fractional diffusion model of Chloride ion with variable diffusion coefficient in concrete is established based on Caputo fractional derivative, which is solved by the finite difference scheme combining with L1 algorithm. Next, the fractional derivative parameter on different exposure time is optimized by using the existing experimental data and the least square method in the model. At last, the relationship between the optimal fractional derivative parameter and the exposure time is fitted, which results in the time variable fractional diffusion model of Chloride ion with variable diffusion coefficient in concrete.

Keywords

Concrete, Chloride Ion Diffusion, Fractional Derivative, Finite Difference Method

Copyright © 2021 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

在现代建筑物的建造中, 混凝土由于价格低、建筑综合效益好, 且具有良好的耐冲击性、可塑性和耐火性等特点, 成为了最普遍的施工材料, 从而其耐久性和服役寿命成为备受关注的问题。针对目前的土木工程, 混凝土结构的耐久性不容乐观, 建筑物承载力不足、开裂等问题屡见不鲜[1]。混凝土中的氯离子主要通过扩散作用、渗透作用、毛细管作用和电化学作用等侵入到混凝土和钢筋表面。通常, 氯离子的侵蚀是几种侵入方式的组合。但是, 许多情况下认为扩散是最主要的侵入方式[2]。

许多研究人员基于整数阶导数的 Fick 第二扩散定律来描述氯离子的扩散行为, Buenfeld 等[3]假定混凝土中的氯离子传输过程是一个非稳态的扩散过程, 并提出了此过程的假设条件; Mangat 等[4]将时间因素考虑到氯离子的扩散系数中, 并给出扩散系数与时间的函数表达式:

$$D = D_i t^{-m} \quad (1)$$

式中 D_i 为 t 等于 1 个时间单位时的扩散系数, $t \geq 0$; m 为时间依赖性常数。同年 Thomas 等[5]修正了该模型中 D_i 不可测的缺点, 提出氯离子的扩散系数是时变函数的观点, 并给出下式:

$$D_i = D_0 \left(\frac{t_0}{t} \right)^m \quad (2)$$

式中 D_0 和 D_i 分别为扩散时间为 t_0 和 t 时混凝土的氯离子扩散系数, $t \geq 0$ 。Thomas 给出的(2)式说明, t_0 时测定混凝土的氯离子扩散系数为 D_0 。

近年来, 研究人员发现分数阶微积分可以更简洁准确地描述具有历史记忆和空间全域相关性等复杂力学与物理现象的过程, 因而基于分数阶导数的扩散模型开始受到关注。宦俊蒙[6]使用拉普拉斯变换法及 Crump 反演方法求解分数阶扩散方程的半解析解。Chen 等[7]考虑了氯离子和混凝土之间会发生相互作用, 从而导致一定比例的氯离子与混凝土结合, 所以使用了朗缪尔等温线描述氯离子浓度。Wei 等[8]建立了氯离子整数阶扩散模型和 Caputo 型氯离子时间分数阶扩散模型, 并通过均方位移的方法近似得到扩散系数 D_α 。

本文将基于 Caputo 型分数阶导数, 考虑形如(2)式的变扩散系数, 对混凝土中氯离子扩散时间分数阶的一维模型进行研究。

2. 变扩散系数的时间分数阶扩散模型

2.1. 模型建立

基于 Fick 第二定律和 Caputo 型分数阶导数[9], 考虑氯离子在混凝土中的一维扩散问题, 建立变扩散系数的时间分数阶扩散模型, 描述为:

$$\begin{cases} \frac{\partial^\alpha C(x,t)}{\partial t^\alpha} = D_0 \left(\frac{t_0}{t}\right)^m \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, 0 < x < +\infty, t > 0 \\ C(x,0) = C_0, 0 \leq x \leq +\infty \\ C(0,t) = C_s, t > 0 \\ C(+\infty,t) = C_0, t > 0 \end{cases} \quad (3)$$

式中 $\partial^\alpha/\partial t^\alpha$ 为 Caputo 型分数阶算子; x 为侵蚀深度, $x \in [0, +\infty)$; t 为混凝土结构中氯离子暴露于环境的时间, $t \geq 0$; $C(x, t)$ 表示 t 时刻 x 深处下的氯离子浓度; D_0 和 D_t 分别为扩散时间为 t_0 和 t 时的扩散系数; α 为分数阶导数的阶数, $0 < \alpha \leq 1$; C_s 为混凝土表面氯离子浓度; C_0 为氯离子内部初始浓度; C_0 和 C_s 是常数; m 为时间依赖性常数。

2.2. 模型求解的有限差分格式

这里结合 L1 算法[9]:

$$\begin{aligned} D_t^\alpha f(t_k) &= \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{s=0}^{k-1} \alpha_s [f(t_{k-s}) - f(t_{k-s-1})] + O(\Delta t^{2-\alpha}) \\ &= \frac{\Delta t^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \left[f(t_k) - \alpha_{k-1} f(t_0) - \sum_{s=1}^{k-1} (\alpha_{s-1} - \alpha_s) f(t_{k-s}) \right] + O(\Delta t^{2-\alpha}) \end{aligned} \quad (4)$$

其中 $\alpha_s = (s+1)^{1-\alpha} - s^{1-\alpha}$, $s = 0, 1, 2, \dots$, 建立求解模型(3)的有限差分格式。

首先, 选取足够大的空间长度 L 和暴露时间 T 。定义 $x = ih$ ($i = 0, 1, \dots, M$), $t = k\tau$ ($k = 0, 1, \dots, N$), 其中 $h = L/M$ 为空间步长, $\tau = T/N$ 为时间步长。这样在划分求解区域后, C_i^k 表示氯离子浓度在点 (x_i, t_k) 处的近似值。

接下来, 将整数阶导数项在 $\left(x = x_i, t = t_{k-\frac{1}{2}}\right)$ 处离散:

$$C \left|_{\left(x=x_i, t=t_{k-\frac{1}{2}}\right)} = \frac{C(x_i, t_k) + C(x_i, t_{k-1})}{2} + O(\Delta t^2) \quad (5)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \bigg|_{\left(x=x_i, t=t_{k-\frac{1}{2}}\right)} = \frac{C(x_i, t_k) - C(x_{i-1}, t_k) + C(x_i, t_{k-1}) - C(x_{i-1}, t_{k-1})}{2\Delta x} + O(\Delta x), \tag{6}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \bigg|_{\left(x=x_i, t=t_{k-\frac{1}{2}}\right)} = \frac{C(x_{i+1}, t_k) - 2C(x_i, t_k) + C(x_{i-1}, t_k) + C(x_{i+1}, t_{k-1}) - 2C(x_i, t_{k-1}) + C(x_{i-1}, t_{k-1})}{2\Delta x^2} + O(\Delta x^2 + \Delta t^2) \tag{7}$$

然后，将(4)~(7)代入扩散模型(3)，并用 C_i^k 近似 $C(x_i, t_k)$ ，得到有限差分格式：

$$\begin{aligned} r_1 \left[\frac{C_i^k + C_i^{k-1}}{2} - \alpha_{k-1} \frac{C_i^1 + C_i^0}{2} - \sum_{s=1}^{k-1} (\alpha_{s-1} - \alpha_s) \frac{C_i^{k-s} + C_i^{k-s-1}}{2} \right] \\ = r_2 \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k + C_{i+1}^{k-1} - 2C_i^{k-1} + C_{i-1}^{k-1}}{2} \quad (i = 1, 2, \dots, M-1; k = 1, 2, \dots, N) \end{aligned} \tag{8}$$

对应的初始条件和边界条件为：

$$C_i^0 = C_0 \quad (i = 0, 1, \dots, M) \tag{9}$$

$$C_0^k = C_s, C_M^k = C_0 \quad (k = 1, 2, \dots, N) \tag{10}$$

其中 $r_1 = \frac{h^2}{\Gamma(2-\alpha)}$ ， $r_2 = D_0 \left[\frac{t_0}{(k-1)\tau} \right]^m \tau^\alpha$ 。代入参数值，通过求解有限差分格式(8)~(10)，就可以得到变扩散系数的时间分数阶扩散模型的数值解。

3. 实例

Thomas 等[5]进行了一系列氯离子扩散实验，所得的 PC (混凝土预制件)中氯离子含量观测值如表 1 所示，各常数参数值如表 2 所示。

Table 1. Chloride concentration of Precast Concrete on different exposure time [5]

表 1. PC 不同暴露时间下的氯离子浓度值[5]

种类	深度(m)	氯离子浓度(%)					
		6个月	1年	2年	3年	6年	8年
PC	0.005	0.267	0.493	0.313	0.370	0.257	0.288
	0.015	0.140	0.193	0.273	0.273	0.237	0.264
	0.025	0.050	0.043	0.143	0.190	0.197	0.203
	0.035	0.010	0.017	0.093	0.117	0.153	0.183
	0.045	0.000	0.000	0.053	0.073	0.133	0.159

Table 2. Initial concentration, surface concentration and values of parameters [5] [8]

表 2. 初始浓度、表面浓度和参数值[5] [8]

种类	C_0 (%)	C_s (%)	D_0 (m ² /s)	m
PC	0	0.35	8×10^{-12}	0.1

3.1. 固定分数阶导数的阶数

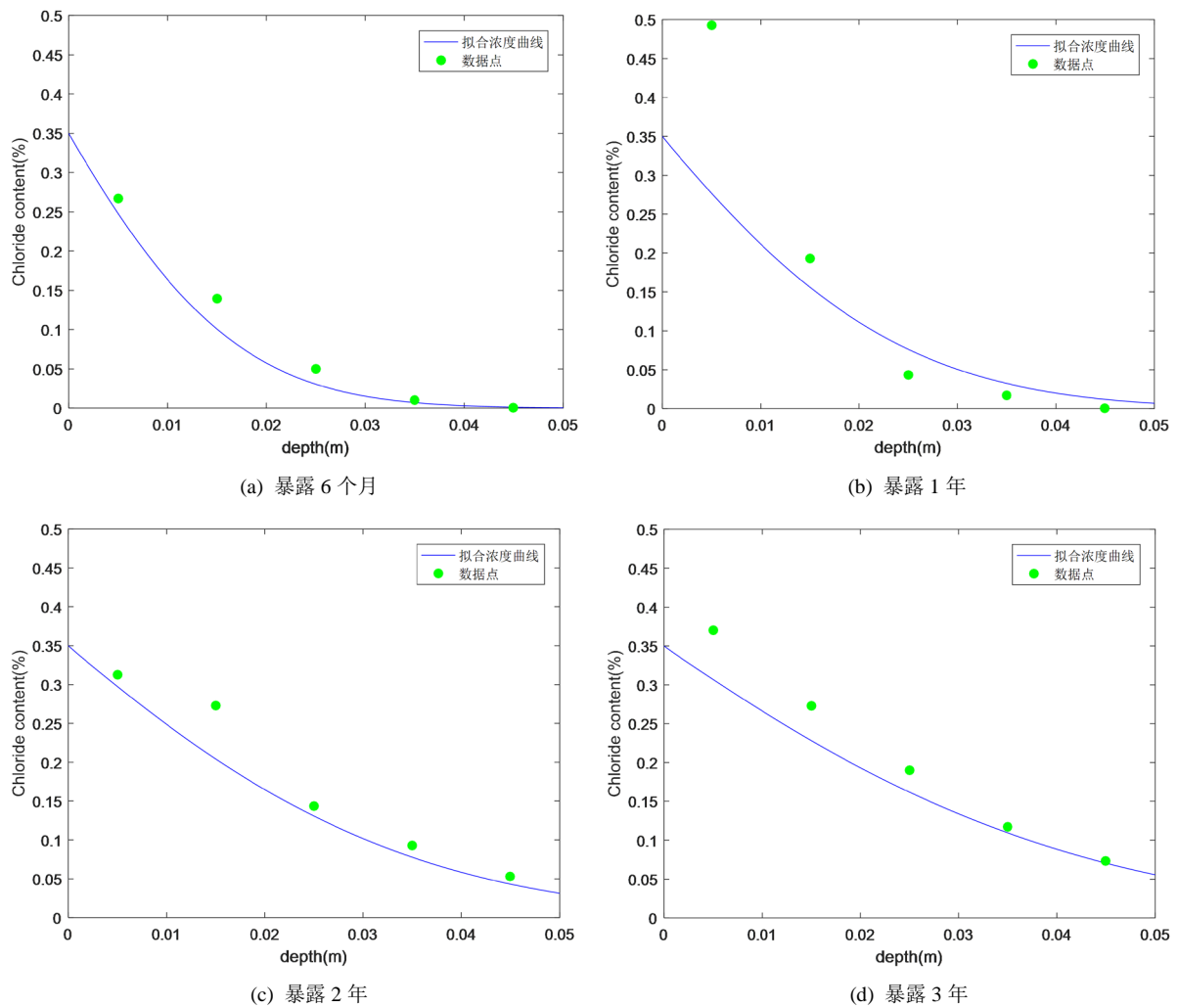
利用有限差分格式(8)~(10)，将表 1 和表 2 所提供的数据和参数值代入计算，就可以得到变扩散系数的时间分数阶扩散模型(3)在不同暴露时间下的氯离子浓度曲线。当取分数阶导数的阶数 $\alpha = 0.9$ 时，PC 混凝土块在 6 个月、1~3 年、6 年和 8 年时的氯离子浓度曲线如图 1(a)~(f)所示。图中绿色的数据点为实验数据[5]，蓝色曲线为扩散模型(3)的数值解，数值解在一定程度上与实验数据一致，验证了模型的有效性。

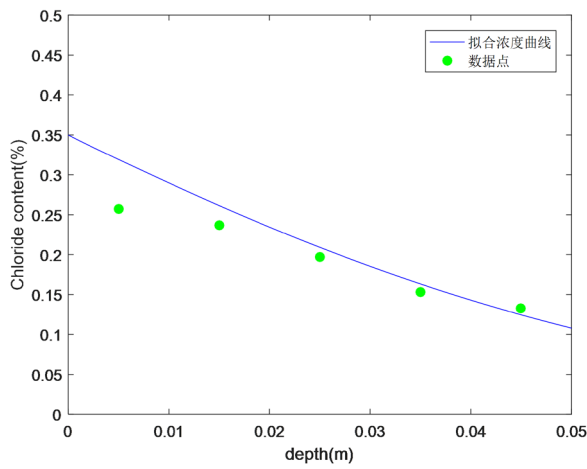
3.2. 优化分数阶导数的阶数

为了更准确地反映氯离子的扩散行为，采用最小二乘法对分数阶导数的阶数 α 进行优化，也就是寻找 α 使得扩散模型的数值解与实验数据的误差的平方和 Q 达到最小值，即

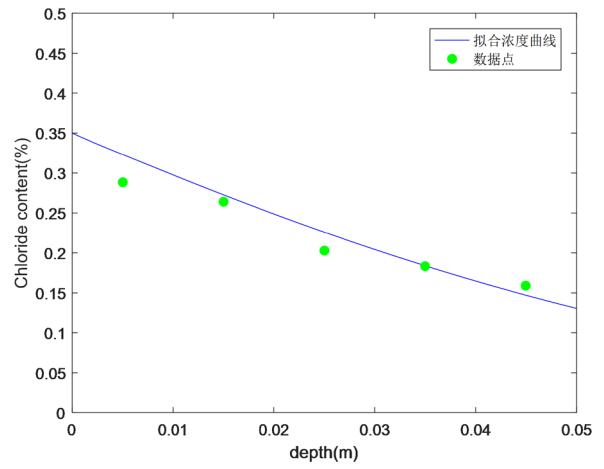
$$\min_{\alpha} Q = \min_{\alpha} \sum_{i=1}^5 (C_i|_{\text{扩散模型数值解}} - C_i|_{\text{实验数据}})^2 \quad (11)$$

在不同暴露时间下，以精度 0.0001 的要求求解问题(11)，得到的结果如表 3 所示。可见，随着暴露时间的变化，最优的分数阶导数的阶数也在改变。利用表 3 中的结果，重新求解扩散模型(3)，得到了不同暴露时间下使用优化的分数阶导数的阶数 α 的氯离子浓度曲线，如图 2(a)~(f)所示。



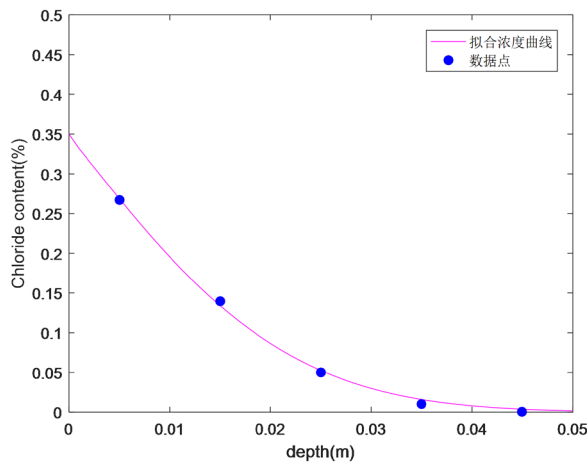


(e) 暴露 6 年

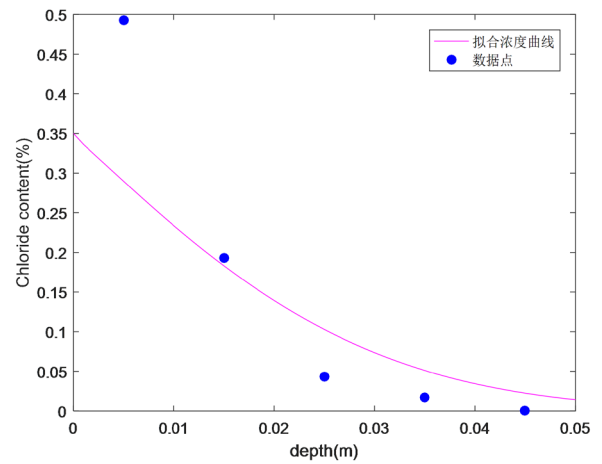


(f) 暴露 8 年

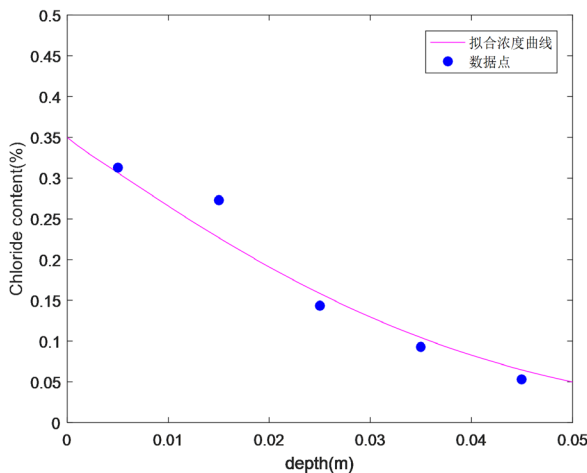
Figure 1. Chloride ion concentration on different exposure time with $\alpha = 0.9$
图 1. 不同暴露时间下 $\alpha = 0.9$ 时氯离子浓度曲线



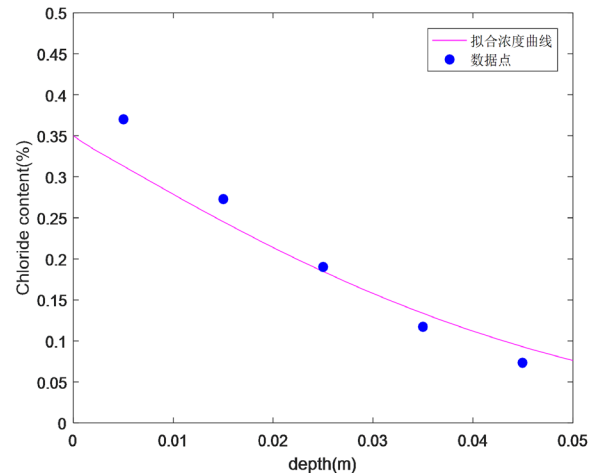
(a) 暴露 6 个月, $\alpha = 0.975$



(b) 暴露 1 年, $\alpha = 0.956$



(c) 暴露 2 年, $\alpha = 0.950$



(d) 暴露 3 年, $\alpha = 0.941$

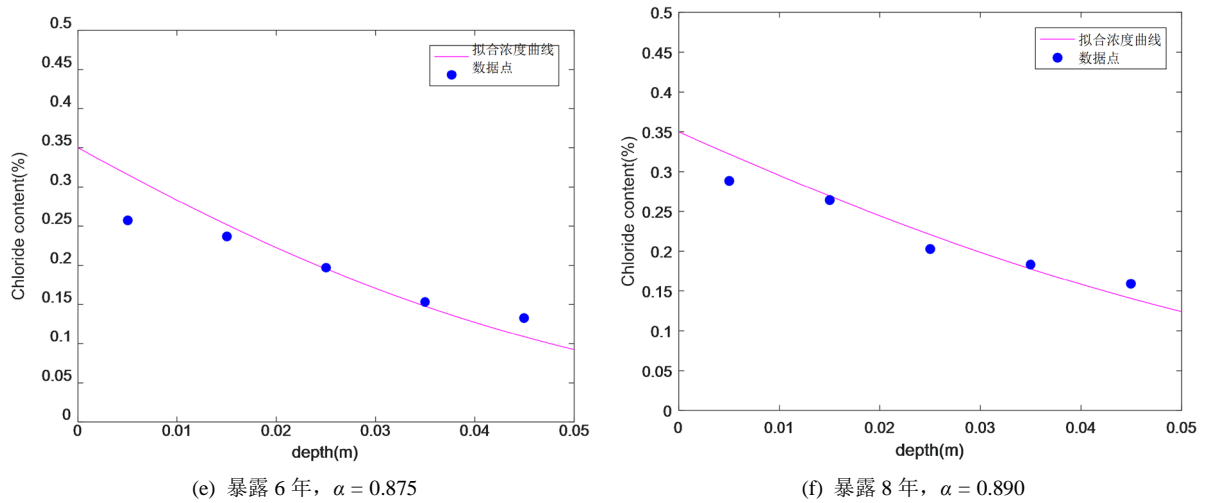


Figure 2. Chloride ion concentration on different exposure time with optimal fractional derivative parameter α
图 2. 不同暴露时间下优化的分数阶导数的阶数 α 的氯离子浓度曲线

Table 3. Optimal fractional derivative parameter α and the corresponding error square sum Q on different exposure time
表 3. 不同暴露时间下最优阶数 α 和对应的误差平方和 Q

暴露时间	6 个月	1 年	2 年	3 年	6 年	8 年
最优阶数 α	0.975	0.956	0.950	0.941	0.875	0.890
误差平方和 Q	9.3430×10^{-5}	0.0466	0.0027	0.0047	0.0043	0.0019

3.3. 变扩散系数的时间变分数阶扩散模型

根据表 3 的结果, 去除暴露时间为 1 年时的异常点后, 采用三阶多项式拟合最优分数阶导数的阶数 α 与暴露时间 t 之间的关系, 得到:

$$\alpha(t) = 0.0008t^3 - 0.0082t^2 + 0.0048t + 0.9731 \quad (12)$$

拟合效果如图 3 所示。

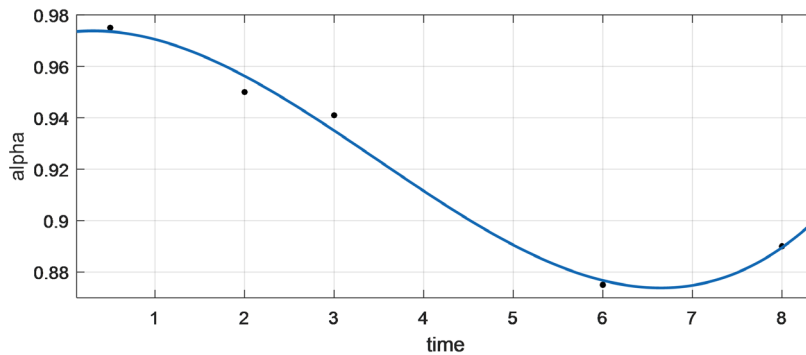


Figure 3. Relationship between optimal fractional derivative parameter α and exposure time t
图 3. 最优分数阶导数的阶数 α 与暴露时间 t 之间的关系

用(12)中的函数 $\alpha(t)$ 替换扩散模型(3)式中的分数阶导数的阶数 α , 就可以得到 PC 混凝土块的变扩散

系数的氯离子时间变分数阶扩散模型:

$$\begin{cases} \frac{\partial^{\alpha(t)} C(x,t)}{\partial t^{\alpha(t)}} = D_0 \left(\frac{t_0}{t}\right)^m \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, 0 < x < +\infty, t > 0 \\ C(x,0) = C_0 \cdot \delta(x), 0 \leq x \leq +\infty \\ C(0,t) = C_s, t > 0 \\ C(+\infty,t) = C_0, t > 0 \end{cases} \quad (13)$$

式中 $0 < \alpha(t) \leq 1$ 满足(12)。

3.4. 氯离子扩散浓度预测

当暴露时间分别为 7 年和 9 年时, 对于扩散模型(3)选取 $\alpha = 0.9$ 计算氯离子浓度分布, 如图 4(a)和图 4(b)中蓝色曲线所示。此时扩散模型(13)中的 $\alpha(7) = 0.8748$ 和 $\alpha(9) = 0.9304$, 计算氯离子浓度如图 4(a)和图 4(b)中红色曲线所示。图 4(a)中黑色星号为 6 年实验数据, 图 4(b)中绿色圆圈为 8 年实验数据。从图中不难看出, 扩散模型(3)和扩散模型(13)都可以在一定程度上预测氯离子浓度的扩散情况, 相比较而言扩散模型(13)更准确一些。

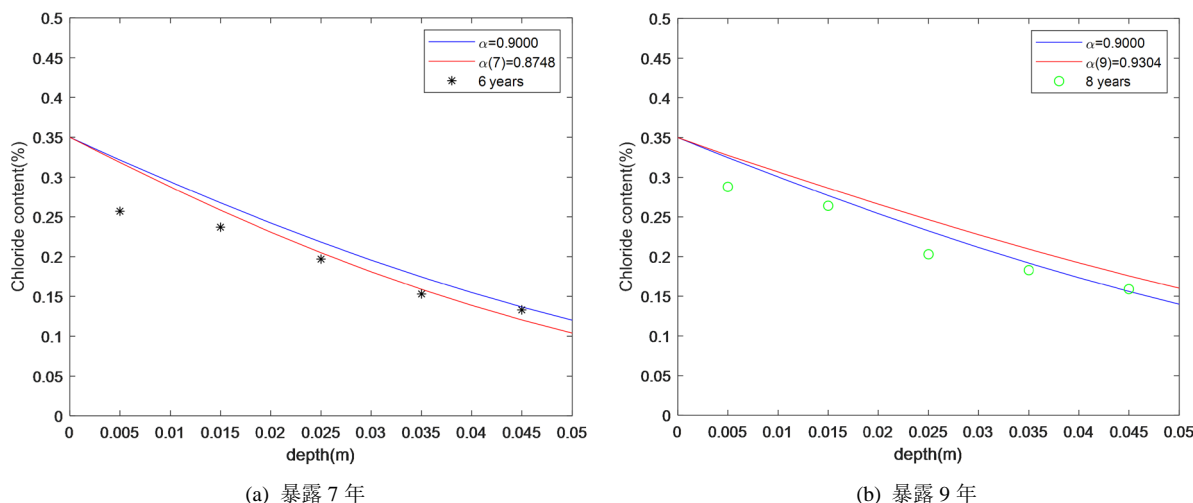


Figure 4. Prediction of Chloride ion concentration when the exposure time $t = 7$ years and $t = 9$ years
图 4. 暴露时间分别为 7 年和 9 年时氯离子浓度的预测值

4. 结论

- 变扩散系数的时间分数阶氯离子扩散模型可以有效地预测氯离子在混凝土中的扩散情况。
- 结合 L1 算法建立的有限差分格式实现了分数阶扩散模型的数值求解。
- 利用已有实验数据和最小二乘法优化了分数阶导数的阶数, 进而建立了混凝土中变扩散系数的时间变分数阶氯离子扩散模型。

基金项目

北京市属高校基本科研业务费专项资金项目(X20142, X21027, X21030, X21031), 北京建筑大学教育科学研究项目(Y2015), 北京建筑大学研究生教学质量提升项目(J2020004)。

参考文献

- [1] 夏瑜. 混凝土结构耐久性及加固技术探究[J]. 四川水泥, 2021(5): 11-12.
- [2] Saetta, A.V., Scotta, R.V. and Vitaliani, R.V. (1993) Analysis of Chloride Diffusion into Partially Saturated Concrete. *ACI Materials Journal*, **90**, 441-451. <https://doi.org/10.14359/3874>
- [3] Buenfeld, N.R., Glass, G.K., Hassanein, A.M., *et al.* (1998) Chloride Transport in Concrete Subjected to Electric Field. *Journal of Materials in Civil Engineering*, **10**, 220-228. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0899-1561\(1998\)10:4\(220\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0899-1561(1998)10:4(220))
- [4] Mangat, P.S. and Limbachiya, M.C. (1999) Effect of Initial Curing on Chloride Diffusion in Concrete Repair Materials. *Cement and Concrete Research*, **29**, 1475-1485. [https://doi.org/10.1016/S0008-8846\(99\)00130-1](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(99)00130-1)
- [5] Thomas, M. and Bamforth, P.B. (1999) Modelling Chloride Diffusion in Concrete: Effect of Fly Ash and Slag. *Cement and Concrete Research*, **29**, 487-495. [https://doi.org/10.1016/S0008-8846\(98\)00192-6](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(98)00192-6)
- [6] 宦俊蒙. 混凝土中氯离子传输机理的理论研究[D]: [硕士学位论文]. 舟山: 浙江海洋大学, 2020.
- [7] Chen, W., Zhang, J. and Zhang, J. (2013) A Variable-Order Time-Fractional Derivative Model for Chloride Ions Sub-Diffusion in Concrete Structures. *Fractional Calculus & Applied Analysis*, **16**, 76-92. <https://doi.org/10.2478/s13540-013-0006-y>
- [8] Wei, S., Chen, W. and Zhang, J. (2015) Time-Fractional Derivative Model for Chloride Ions Sub-Diffusion in Reinforced Concrete. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, **21**, 1-13. <https://doi.org/10.1080/19648189.2015.1116467>
- [9] 刘发旺, 庄平辉, 刘青霞. 分数阶偏微分方程数值方法及其应用[M]. 北京: 科学出版社, 2015: 107-144.