

Meta-modelling for fast prediction of the effective elastic properties of cement mortar doped with CNT

Rodríguez Romero, Rubén¹; Pachón, Pablo²; Valseca, Jaime³; Baeza Álvarez, Juan Ramón⁴; Garduño, Carlos⁵; Compán, Víctor⁶

ABSTRACT

This article presents an innovative metamodeling approach for predicting the effective elastic properties of cement grouts containing carbon nanotubes (CNTs), for the purpose of structural rehabilitation. The study addresses the homogenization of nano- and micro- scales through a Representative Volume Element (RVE). The numerical model consists of a cement matrix doped with randomly oriented CNTs, yet the computational load associated with this model poses a significant processing limitation. To overcome this challenge, a metamodeling approach based on a Kriging surrogate model is proposed. This approach provides a fast and accurate alternative to bypass the time-consuming numerical homogenization process. The surrogate model establishes a connection between the microstructural characteristics of CNTs, cement, and the effective elastic properties of the composite grouts. The accuracy and efficiency of the proposed metamodel are demonstrated through detailed analyses.

Keywords: Historical heritage preservation, Masonry structures, Structural rehabilitation, CNT-enriched cement, Surrogate models.

1. CUERPO DEL RESUMEN EXTENDIDO

Las construcciones de fábrica tienen una importancia primordial en el patrimonio arquitectónico europeo. Dada su importancia económica y social, así como su vulnerabilidad y susceptibilidad a desastres naturales como terremotos y el deterioro gradual de los materiales, la preservación anticipada se han convertido en una prioridad estratégica en la agenda política de Europa [1]. Esto ha motivado que se investiguen técnicas de rehabilitación estructural basadas en principios de intervención mínima y preservación de valores arquitectónicos/artísticos [2, 3]. Avances recientes en nanotecnología y ciencia de materiales permiten crear materiales micro y nanoingenieriles innovadores que permiten aplicar técnicas de rehabilitación menos invasivas y con mejores propiedades mecánicas. Las investigaciones en este campo se han centrado en el desarrollo de métodos para fortalecer estructuras de mampostería sin refuerzo. En la bibliografía encontramos sistemas de mejora estructural como añadir refuerzos de acero, sistemas de anclaje, morteros/inyecciones de refuerzo, etc. Las técnicas de refuerzo mediante morteros de inyecciones resultan de especial interés debido a su potencial innovador para mejorar las propiedades mecánicas

¹ Department. Institution (COUNTRY). E-mail address (Corresponding author)

² Department. Institution (COUNTRY). E-mail address

NOTE: "(Corresponding author)" should be added where applicable.

de la piedra, fortaleciéndola y reduciendo la necesidad de costosas y potencialmente dañinas intervenciones de rehabilitación, salvaguardando los valores arquitectónicos.

El objetivo final de este trabajo es el uso de CNTs en morteros de alto rendimiento para rehabilitar piedra porosa débil mediante inyecciones. Este enfoque surge de investigaciones anteriores realizadas por los autores sobre construcciones históricas en Andalucía (España) del siglo XV al XVIII [4, 5]. Muchos de estos monumentos se construyeron con piedra de San Cristóbal. Esta piedra se caracteriza por un bajo módulo de Young, reducida capacidad a resistir compresiones y una alta porosidad. Como resultado, muchos de estos edificios han desarrollado importantes grietas, necesitando importantes intervenciones de rehabilitación. Por lo tanto, la propuesta de reforzar los morteros con CNT sugiere una solución eficaz que preserva los valores arquitectónicos.

Para este fin, este trabajo ha desarrollado un método que empleando modelos sustitutos predice de forma rápida y precisa las propiedades elásticas efectivas de materiales compuestos. Para ello, mediante técnicas de homogeneización se reemplaza un material heterogéneo por uno ficticio homogéneo. El enfoque de modelado propuesto analiza las propiedades elásticas efectivas a través de RVEs en 3D utilizando el Método de Elementos Finitos, con siglas en inglés (FEM). Dada la carga computacional considerable de tales modelos, se propone un un modelo de Kriging Universal, que relaciona las propiedades constitutivas de los CNTs y la matriz de cemento con las propiedades elásticas efectivas del mortero compuesto.

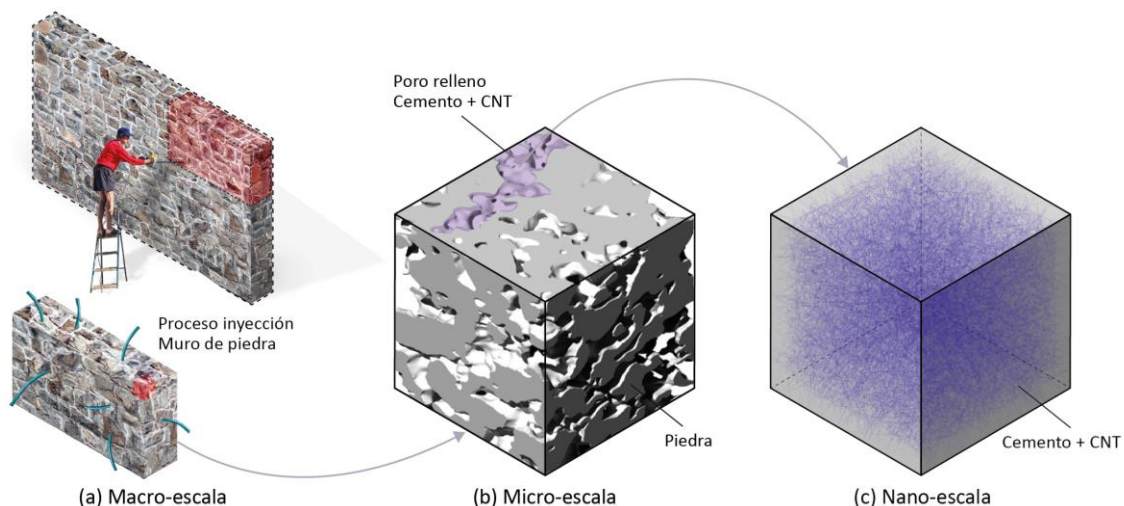


Figura 1. Flowchart del metamodelado propuesto: (a) Macro-escala, (b) Micro-escala, tomografía de Piedra de San Cristóbal, y (c) Nano-escala CNT/cemento.

La Homogeneización Mecánica Numérica se emplea mediante un enfoque clásico, como es la condición de Hill-Mandel (Fig. 2), para estimar las propiedades efectivas de materiales heterogéneos. El objetivo es adoptar un enfoque de modelado sub-escala basado en el concepto de un RVE. La concepción de RVE solo es válida en dos situaciones: (i) celda unitaria en una microestructura periódica y (ii) volumen que contiene un número suficiente de inclusiones para lograr homogeneidad estadística y ergodicidad en el comportamiento global [6].

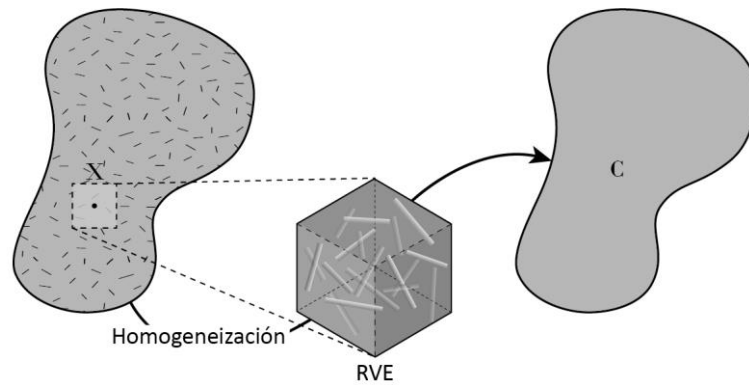


Figure 2. Macroestructura continua asociada a un RVE bifásico formado por una fase matricial e inclusiones.

El primer paso del enfoque de homogeneización propuesto consiste en estimar las propiedades efectivas del mortero de cemento con CNTs a nivel nano para ello consideramos un RVE cúbico de longitud de borde L compuesto por una matriz de cemento con CNTs orientados al azar (Fig. 3 (a,b)). El RVE cumple cuatro supuestos clave: (i) contiene un número suficientemente representativo de CNTs para representar estadísticamente el material compuesto en su totalidad; (ii) la longitud L_{cnt} y el diámetro D_{cnt} de los CNTs son constantes; (iii) los rellenos están orientados al azar; y (iv) la matriz de mortero se puede modelar como un medio continuo.

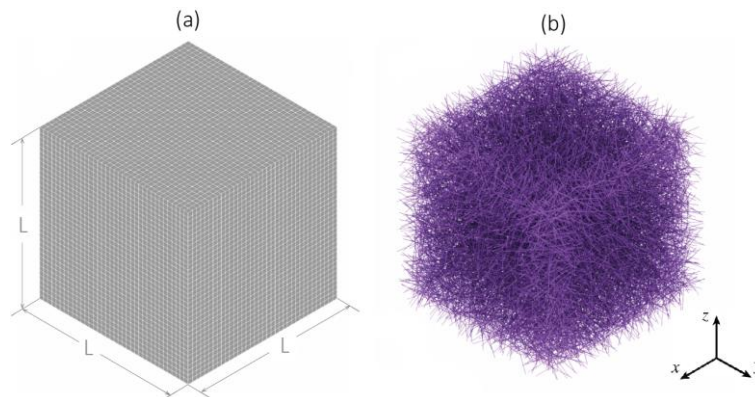


Figure 3. Nano-escala: RVE de mortero de cemento enriquecido con CNT. (a) Matriz de mortero; b) los CNT.

Se modelan la fase de matriz y los CNTs con propiedades constitutivas isotrópicas, una simplificación común en la literatura (véase [7,8]). Dada la complejidad de modelar grandes volúmenes de CNTs al azar (relación de aspecto ≈ 1000) usando elementos sólidos, se utiliza un algoritmo RSA modificado [9,10]. Este enfoque permite modelar inclusiones tipo fibra mediante elementos de viga computacionalmente ligeros, y la fase de la matriz mediante una malla regular no conforme (planar o tridimensional) (Fig. 3 (a)). Para contrarrestar la mayor rigidez debido a la matriz que ocupa el espacio de los CNTs, se ajusta el módulo de Young de las fibras, E_f , como $E_f = E_f - E_m$ [11], siendo E_m el módulo de elasticidad de la matriz.

Las estimaciones de propiedades efectivas mediante RVEs numéricos son computacionalmente intensivas, limitando su uso para estructuras a gran escala. Para solucionar esto, se propone la implementación de modelos de sustitución computacionalmente más livianos. Estos modelos de sustitución se entrenan en simulaciones de modelos FEM directos utilizando un enfoque de Monte Carlo (MCS). La construcción de un modelo sustituto implica el proceso mostrado en la Figura 4: (i) Muestreo del espacio de diseño; (ii) Generación de una población de entrenamiento a través de simulaciones de MCS; y (iii) Construcción de la superficie de predicción.

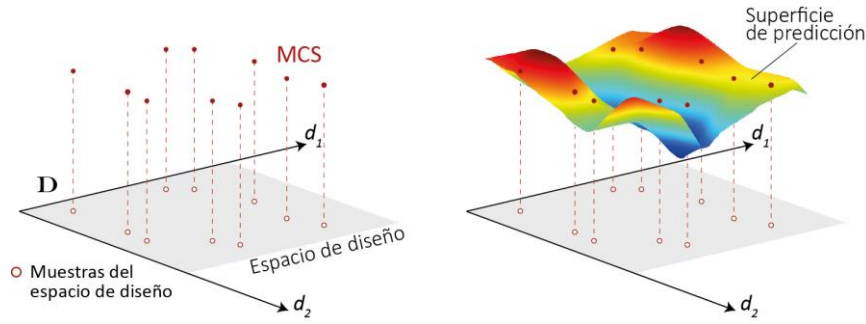


Figure 4. The 1D of kriging interpolation.

La realización del modelo sustituto conlleva a la realización de análisis de convergencia de las propiedades elásticas efectivas para estimar el tamaño y densidad de malla del RVE. En las técnicas de homogeneización tanto el tamaño de los RVEs como la densidad de malla computacional es un aspecto crítico que se determina estadísticamente.

Los parámetros de material utilizados en los análisis subsiguientes se proporcionan en la Tabla 1. Es importante destacar que los valores en esta tabla cubren el rango de las bases más comúnmente utilizadas en las inyecciones de lechada, abarcando desde morteros de cal hasta morteros de cemento (módulo de elasticidad de 2 a 10 GPa y relaciones de Poisson de 0.05 a 0.3).

Tabla 1. Propiedades constitutivas de las fases consideradas para investigar materiales compuestos CNT/cemento.

	Material	
	MWCNTs	Mortero de cemento
Módulo de Young	0.23-1.22 TPa ^a	2-10 GPa ^c
Coeficiente de Poisson [-]	0.1-0.28 ^b	0.05-0.3 ^d
Diámetro [nm]	1.8	-
Longitud [μm]	0.41	-
Fracción de volumen [%]	0.01-1.2	-
Porosidad [%]	-	-
Fuentes: ^a [12]; ^b [13]; ^c [14]; ^d [14]		

Las propiedades elásticas de materiales isotrópicos con fibras orientadas aleatoriamente se evalúan estadísticamente. Para esto, se utiliza el índice de anisotropía [15] mediante la siguiente ecuación:

$$\delta_{iso} = \frac{|C-(C)^*|_F}{|C|_F} \quad (1)$$

Sobre esta base, un tensor de isotropía perfecta conduce a un índice de anisotropía $\delta_{iso} = 0$. La Figura 5 (a) muestra el análisis de convergencia para definir el tamaño crítico de la RVE. El tamaño se define adimensionalmente como L/L_{cnt} , variando entre 0.25 y 2.46. Se generan 6 RVE diferentes, cada una con 5 realizaciones, para analizar las propiedades efectivas. La convergencia se alcanza aproximadamente en $L/L_{cnt} = 1.96$ ($L = 0.80 \mu m$). Con la misma importancia se estudia la sensibilidad de los resultados de homogeneización a la densidad de malla de la RVE para garantizar independencia. Se investigan diferentes densidades de malla para una RVE específica ($L = 0.80 \mu m$, fracción de volumen de CNT 0.5%), variando entre 15,417 y 899,148 elementos. Los tamaños de malla para las fases de relleno y matriz varían desde $L_{cnt}/3$ hasta $L/9$ y desde $L_{cnt}/16$ hasta $L/48$, respectivamente. La Figura 5 (b) muestra el análisis de convergencia para los módulos elásticos efectivos normalizados E/E_m y G/G_m en función del número de elementos finitos. La convergencia se alcanza con una discretización de RVE de 744,291 elementos.

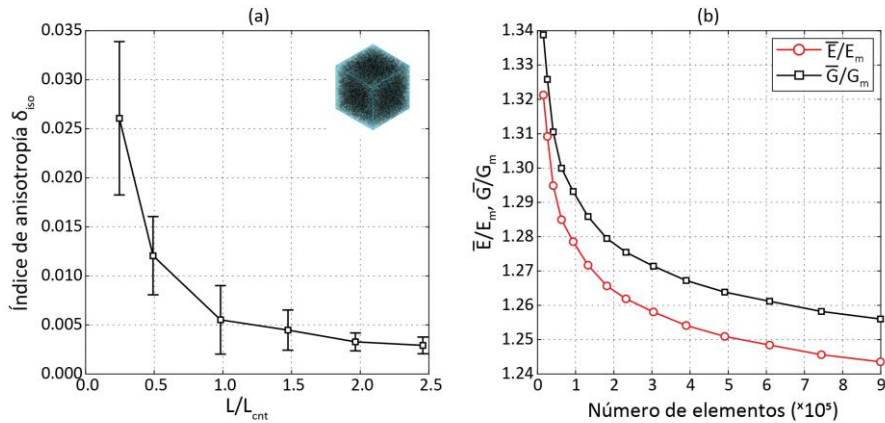


Figure 5. Índice de la isotropía versus el tamaño de RVE (a) convergencia de malla (b) para el RVE de compuestos CNT/cemento. Las barras de error en (a) representan la desviación estándar de los índices de anisotropía obtenidos después de cinco realizaciones.

La precisión del RVE se analiza en la Figura 6, comparando las predicciones de homogeneización computacional con el método clásico de Eshelby-Mori-Tanaka (MT) y datos experimentales de un compuesto de policarbonato (PC) reforzado con nanotubos de carbono de pared única (SWCNT) ($L_{cnt} = 1.3 \mu\text{m}$, $D_{cnt} = 1.8 \text{ nm}$) reportado por Talò [16]. Ambas fases se consideran isotrópicas, con módulos elásticos de 2.35 GPa y 0.97 TPa para el PC y el SWCNT, y coeficientes de Poisson de 0.38 y 0.1. Se exploran dos configuraciones de relleno: alineación completa (Figura 6 (a)) y orientación aleatoria (Figura 6 (b)).

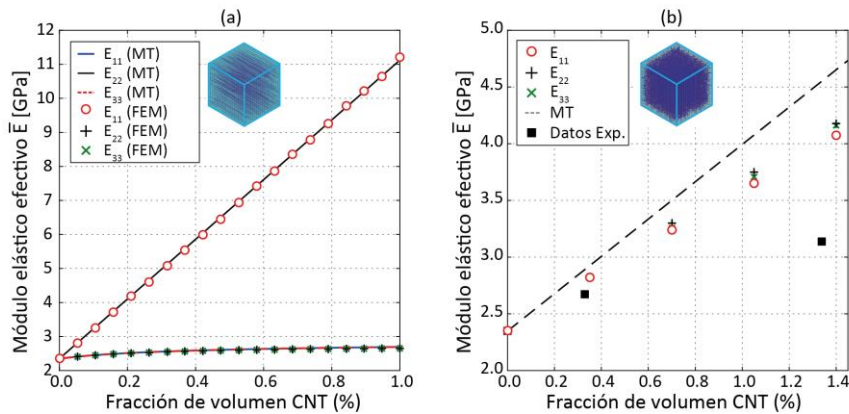


Figure 6. Análisis de validación de las estimaciones numéricas de las propiedades elásticas de los compuestos PC/CNT considerando configuraciones de relleno completamente alineadas (a) y orientadas aleatoriamente (b) (datos experimentales de [16]).

En el caso de la alineación completa en la Figura 6 (a), se construyen 20 RVE diferentes ($L = 0.20 \mu\text{m}$) con fracciones de volumen de CNT del 0 al 1%, alineadas en la dirección x_1 ($\theta = 0$, $\varphi = \pi/2$), comparadas con predicciones del modelo MT. Se observa un acuerdo cercano entre las predicciones numéricas y analíticas, ya que los compuestos presentan propiedades transversalmente isotrópicas. En la orientación aleatoria en la Figura 6 (b), se calculan cinco RVE ($L = 0.80 \mu\text{m}$), comparando las predicciones numéricas con el método analítico MT y los datos experimentales. Para bajas fracciones de volumen de CNT, las predicciones numéricas y el modelo MT se ajustan bien a los datos experimentales. Sin embargo, a medida que aumenta la fracción de volumen de CNT, surgen diferencias considerables. Las estimaciones numéricas se acercan más a los datos experimentales, mientras que el modelo MT sobrestima significativamente las propiedades efectivas. Las discrepancias se atribuyen a aspectos microestructurales no considerados en la homogeneización, como

aglomeración y transferencia de carga. Aunque se reconoce que la formulación es suficiente para este propósito, la inclusión de más detalles microestructurales se pospone para futuros trabajos.

El modelo sustituto, considera cinco variables de entrada diferentes, como son, la fracción de volumen de CNT, el módulo elástico y el módulo de Poisson de los CNT, y el módulo elástico y el coeficiente de Poisson de la matriz de cemento. Los rangos de variación de estos parámetros que definen el espacio de diseño D se han establecido de acuerdo con los rangos previamente informados en la Tabla 1. La precisión de cualquier modelo sustituto está determinada en gran medida por la calidad del ED. Por lo general, es necesario lograr un muestreo uniforme del espacio de diseño para cubrir todo el dominio de interés. Con este fin, en este trabajo se ha adoptado el Muestreo de Hipercubo Latino para obtener muestras uniformemente distribuidas sobre D. Para asegurar el tamaño adecuado del ED, se han realizado análisis de convergencia considerando poblaciones de entrenamiento variables de tamaño creciente. Se han considerado cinco poblaciones de entrenamiento diferentes, que van desde 32 hasta 512 individuos, con un conjunto de validación (VS) de 1024 muestras. Para cada población, el módulo de Young efectivo y el coeficiente de Poisson de cada individuo se obtienen mediante la evaluación directa de los RVEs numéricas. La convergencia de la precisión de las predicciones por el modelo sustituto se evalúa en la Figura 7 en términos del Error Cuadrático Medio de la Raíz (RMSE) y el coeficiente de determinación R^2 , medidos sobre el VS, entre la predicción del modelo sustituto y los modelos FEM directos. la convergencia del metamodelo se logra aproximadamente para tamaños de población de 2^7 individuos. En este caso, los valores de RMSE cercanos a cero y los coeficientes R^2 cercanos a uno aseguran el alto rendimiento del modelo sustituto.

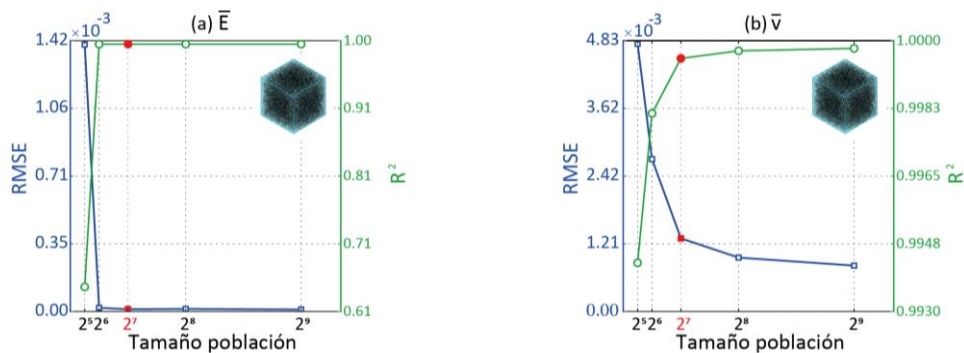


Figure 7. Análisis de convergencia del metamodelo (a,b) en términos de módulo elástico efectivo (a) y el coeficiente de Poisson (b,d) aleatoria para poblaciones de entrenamiento crecientes.

Como resultado el modelo sustituto entrenado con 2^7 individuos, es seleccionado para el subsiguiente análisis. La Figura 8 muestra la comparación entre las predicciones del RVE directo y el modelo sustituto resultante. Estas gráficas, comúnmente utilizadas en aplicaciones de modelado sustituto, proporcionan una representación visual de la bondad del ajuste entre las predicciones de los metamodelos y los modelos FEM directos. La mínima dispersión de los puntos de datos a lo largo de las líneas diagonales (valores R^2 muy cercanos a 1) mostrada en la Figura 8 proporciona una fuerte evidencia de que el modelo sustituto está entrenados con alta precisión.

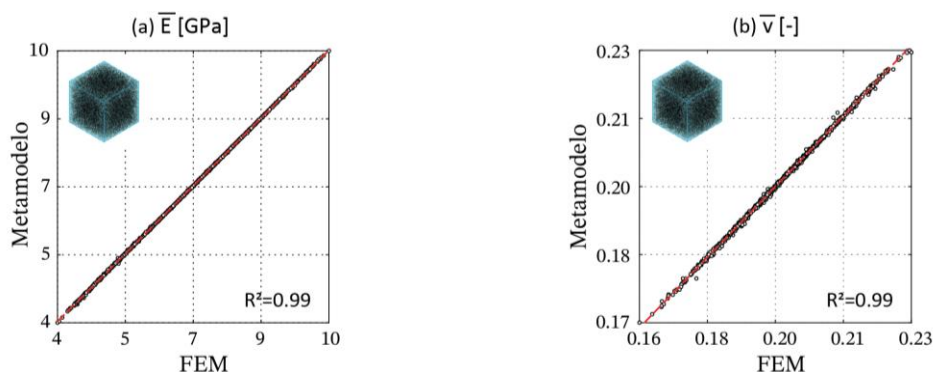


Figure 8. Gráficos de dispersión de las predicciones del metamodelo de Kriging (a,b) versus la evaluación de los RVE FEM para los VS de 1024 muestras.

El metamodelo también presenta una carga computacional baja, con tiempos promedio de evaluación de 0.18 segundos. Estos tiempos reducidos de evaluación computacional hacen que los metamodelos sean una solución eficiente para realizar análisis paramétricos intensivos, optimización iterativa, así como el análisis de elementos estructurales a gran escala.

2. REFERENCIAS [CALIBRI, 11 PT, NEGRITA, MAYÚSCULA, ALINEADO A LA IZQUIERDA]

- [1] European Commission, Sport Directorate-General for Education, Youth, and Culture. European framework for action on cultural heritage.
- [2] Alessia Buda, Virginia Gori, Ernst Jan de Place Hansen, Cristina S Polo López, Valentina Marincioni, Emanuela Giancola, Nathalie Vernimme, Aitziber Egusquiza, Franziska Haas, and Daniel Herrera-Avellanosa. Existing tools enabling the implementation of en 16883: 2017 standard to integrate conservation-compatible retrofit solutions in historic buildings. *Journal of Cultural Heritage*, 57:34–52, 2022.
- [3] P. D. Gkournelos, T. C. Triantafillou, and D. A. Bournas. Seismic upgrading of existing masonry structures: A state-of-the-art review. *Soil Dynamics and Earthquake Engineering*, 161:107428, 2022.
- [4] F Pozo, R Gil, and E Méndez. Intervención arquitectónica puntual en Monasterio de San Jerónimo de Buenavista (Sevilla). *Consejería de Urbanismo*, 2003.
- [5] Alfonso Jiménez Martín. El proyecto de sustitución de los pilares 4C y 5C de la Catedral de Sevilla. Technical report, Ministerio de Cultura y Deporte, 2009.
- [6] Martin Ostoja-Starzewski. Microstructural randomness versus representative volume element in thermomechanics. *Journal of Applied Mechanics*, 69(1):25–35, 2002.
- [7] Stelios K Georgantzinos, Panagiotis Antoniou, Stylianos Markolefas, and Georgios Giannopoulos. Finite element predictions on vibrations of laminated composite plates incorporating the random orientation, agglomeration, and waviness of carbon nanotubes. *Acta Mechanica*, 233(5):2031–2059, 2022.
- [8] Shuai Zhang, Yulin Lai, Kuanyu Chen, Mostafa Habibi, Masoud Khorami, and Zainab Haider Mussa. Influence of MWCNT's waviness and aggregation factors on wave dispersion response of MWCNT-strengthened nanocomposite curved beam. In *Structures*, volume 53, pages 1239–1249. Elsevier, 2023.
- [9] Lucian Iorga, Yi Pan, and Assimina Pelegri. Numerical characterization of material elastic properties for random fiber composites. *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 3(7):1279–1298, 2008.
- [10] Yi Pan, Lucian Iorga, and Assimina A Pelegri. Analysis of 3D random chopped fiber reinforced composites using FEM and random sequential adsorption. *Computational Materials Science*, 43(3):450–461, 2008.
- [11] Zixing Lu, Zeshuai Yuan, and Qiang Liu. 3D numerical simulation for the elastic properties of random fiber composites with a wide range of fiber aspect ratios. *Computational Materials Science*, 90:123–129, 2014.

- [12] Ahmed El Moumen, Mostapha Tarfaoui, and Khalid Lafdi. Computational homogenization of mechanical properties for laminate composites reinforced with thin film made of carbon nanotubes. *Applied Composite Materials*, 25:569–588, 2018.
- [13] P Zhao and G Shi. Study of Poisson ratios of single-walled carbon nanotubes based on an improved molecular structural mechanics model. *Computers Materials and Continua*, 22(2):147, 2011.
- [14] Anastasios Drougkas, Els Verstryngne, Roald Hayen, and Koenraad Van Balen. The confinement of mortar in masonry under compression: experimental data and micro-mechanical analysis. *International Journal of Solids and Structures*, 162:105–120, 2019.
- [15] O Zerhouni, MG Tarantino, and Kostas Danas. Numerically-aided 3D printed random isotropic porous materials approaching the Hashin-Shtrikman bounds. *Composites Part B: Engineering*, 156:344–354, 2019.
- [16] Michela Talò, Beate Krause, Jürgen Pionteck, Giulia Lanzara, and Walter Lacarbonara. An updated micromechanical model based on morphological characterization of carbon nanotube nanocomposites. *Composites Part B: Engineering*, 115:70–78, 2017.

3. CONCLUSIONES

Hemos presentado en este trabajo un enfoque de metamodelado para la predicción rápida de las propiedades elásticas efectivas de lechadas de CNT/cemento. La metodología desarrollada utiliza metamodelos Kriging para evitar la homogeneización numérica del compuesto de CNT/cemento con una carga computacional mínima. Específicamente, la nano-escala está definida por una RVE de dos fases que comprende una matriz de cemento dopada con CNT dispuestos aleatoriamente. El metamodelo se entrena de manera no intrusiva a través de simulaciones directas de Monte Carlo de la homogeneización numérica de los RVE. El metamodelo, considera como variables independientes la fracción de volumen de CNT, así como los módulos de Young y los coeficientes de Poisson de la matriz y los CNT (5 variables).

La dimensión y densidad de malla de las RVE, así como los tamaños de las poblaciones de entrenamiento para los modelos sustitutos, se seleccionan a través de análisis de convergencia y estadísticos. El metamodelo demostró una alta precisión y una demanda computacional muy baja, con tiempos de evaluación de 0.18 segundos.

En el futuro, hay varias vías para mejorar y ampliar el enfoque. En primer lugar, se deben considerar otras características microestructurales, como la ondulación y la aglomeración de los rellenos, para mejorar la precisión del modelo y capturar comportamientos más realistas. Además, analizar la permeabilidad de las inyecciones en la piedra sería valioso para una optimización integral de la tecnología de lechada propuesta.

Se sugiere como trabajo futuro la exploración del meta-modelado jerárquico como una técnica para una predicción aún más rápida y eficiente de las propiedades elásticas efectivas de materiales compuestos.