硫酸盐腐蚀下钢纤维混凝土力 - 化耦合损伤 细观模拟

傅晓冬,于亚威

上海理工大学环境与建筑学院,上海

收稿日期: 2024年8月4日; 录用日期: 2024年9月2日; 发布日期: 2024年9月9日

摘要

利用有限元软件开展钢纤维混凝土在硫酸盐腐蚀下的细观模拟。首先,在Abaqus中基于Monte Carlo方 法构建钢纤维和粗骨料随机分布的二维钢纤维混凝土模型,并进行硫酸根离子扩散模拟,确定不同龄期 的硫酸根离子浓度场。然后,通过虚拟温度场法进行化学损伤模拟,得到不同龄期的化学进程。最后, 对化学损伤后的试件施加位移荷载得到力 - 化耦合后的应力 - 应变曲线。模拟结果表明,随着腐蚀龄期 的增加,由腐蚀产物导致的化学损伤不断增加,具体表现为导致的拉伸应变不断增大;但由于混凝土中 钢纤维的存在,能量被有效地吸收和分散,明显阻止了贯穿裂缝的产生,从而提高了混凝土的耐久性和 可靠性。

关键词

硫酸盐腐蚀,力-化耦合损伤,钢纤维混凝土

Mesoscopic Simulation of Force-Chemical Coupling Damage of Steel Fiber Reinforced Concrete under Sulfate Corrosion

Xiaodong Fu, Yawei Yu

School of Environment and Architecture, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Aug. 4th, 2024; accepted: Sep. 2nd, 2024; published: Sep. 9th, 2024

Abstract

The meso-simulation of steel fiber reinforced concrete under sulfate corrosion was carried out by using finite element software. Firstly, a two-dimensional steel fiber reinforced concrete model with

random distribution of steel fiber and coarse aggregate was constructed based on Monte Carlo method in Abaqus, and the sulfate ion diffusion simulation was carried out to determine the sulfate ion concentration field at different ages. Then, the chemical damage simulation was carried out by the virtual temperature field method to obtain the chemical process of different ages. Finally, the displacement load is applied to the specimen after chemical damage to obtain the stress-strain curve after force-chemical coupling. The simulation results show that with the increase of erosion age, the chemical damage caused by corrosion products increases continuously, which is manifested in the increase of tensile strain. However, due to the existence of steel fiber in concrete, the energy is effectively absorbed and dispersed, which obviously prevents the occurrence of penetrating cracks, thus improving the durability and reliability of concrete.

Keywords

Sulfate Corrosion, Force-Chemical Coupling Damage, Steel Fiber Concrete

Copyright © 2024 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/

1. 研究背景及目的

影响混凝土建筑耐久性的因素很多,例如钢筋锈蚀、冻融破坏、混凝土碳化等。众多因素中以硫酸盐腐蚀破坏最为普遍,几乎所有的建筑物实际破坏过程中都存在着硫酸根离子腐蚀的参与[1][2]。早在20世纪90年代,在德国 Magdeburg 建成不到两年的 Stern 大桥桥墩就因受到硫酸盐的腐蚀造成严重破坏,这被确定为受硫酸盐腐蚀破坏的混凝土结构中最早的工程实例[3];在日本海沿岸,竣工不足10年的港湾建筑出现混凝土开裂和剥落的情况比比皆是,甚至许多建筑的钢筋都暴露在外。我国其实大部分地区的混凝土建筑也都面临着硫酸盐腐蚀的问题[4]。

国内外学者展开了大量的研究发现,在混凝土基体中加入纤维具有提高混凝土结构的韧性、延展性 以及可以将混凝土的破坏形式从脆性破坏转变为延性破坏的作用[5][6]。钢纤维与水泥基体亲和度高,在 混凝土中加入分散、均匀且杂乱分布的钢纤维能够明显改善混凝土结构的各项性能,尤其显著提高了混 凝土的耐久性[7]-[9]。但是相比于普通混凝土,钢纤维混凝土建筑在实际使用过程中一旦受到硫酸盐腐 蚀,发生腐蚀的具体过程变化更加难以捉摸,是一个十分复杂的长时间,多因素耦合作用。因此,对于 钢纤维混凝土在硫酸盐腐蚀下的力-化耦合损伤细观模拟是不可或缺的。

2. 硫酸盐腐蚀力 - 化耦合模拟

2.1. 二维有限元模型建立

钢纤维混凝土是由混凝土砂浆、粗骨料和钢纤维组成的多相复合材料。张彬[10]研究发现,三维有限 元模型在进行力-化学耦合计算时,时间、算力成本过高,二维模型就能够很好的对硫酸盐腐蚀进行模 拟。同时模拟结果表明,进行 ABAQUS 建模时圆形骨料的力学性能和建模成本均优于其他骨料,因此本 文选择建立二维钢纤维混凝土平面模型。二维模型大小设定为 100 mm×100 mm,采用蒙特卡罗随机撒 点方法先将粗骨料和钢纤维撒入模型中,粗骨料形状选择为圆形,骨料半径设定为 4 mm~9 mm,占比约 为 40%;钢纤维形状设定为长方形,考虑实际混凝土试块中钢纤维落在某一平面上应该是它的投影,因 此钢纤维长度设置为 0~20 mm,宽度为 1 mm。 在 ABAQUS 中建立好的模型如图 1 所示。其中大小不一的圆形代表不同粒径的粗骨料,长短不一的 长方形代表钢纤维投影,其余蓝色部分为砂浆。对建好的二维钢纤维混凝土模型进行网格划分,网格种 子密度取为 2,划分好网格的模型如图 2 所示:



Figure 1. Two-dimensional model 图 1. 二维模型



Figure 2. Three-dimensional model 图 2. 三维模型

2.2. 模型材料参数

2.2.1. 砂浆力学参数

本文在进行有限元模拟时,对于砂浆受力的本构曲线,前期弹性阶段选择弹性模型,后期塑性损伤 阶段选择 ABAQUS 软件中的混凝土损伤塑性模型(Concrete Damaged Plasticity, CDP)。砂浆具体力学参数 如表 1 所示:

Table 1. Mechanical parameters of mortar 表 1. 砂浆力学参数								
弹性模量	泊松比	膨胀角	偏心率	不变应变力	粘性系数			
27 Gpa	3	4	7	0.6667	0.001			

2.2.2. 粗骨料力学参数

粗骨料是混凝土重要的组成部分之一,在混凝土内部随机分布,起到支撑和骨架作用。骨料的 种类、级配、大小等对于混凝土的性能有着一定的影响。骨料在混凝土实际受压破坏过程中,很难被压 碎,一般只发生弹性变形。因此本文在有限元骨料力学参数设置时将其设定为各向同性的线弹性体。粗 骨料具体力学参数如表 2 所示:

Table 2. Mechanical parameters of coarse aggregate

表 2.	粗骨料刀字参致	

弹性模量	泊松比	破坏应力	塑性应变
70 Gpa	0.15	120 MPa	0

2.2.3. 钢纤维力学参数

钢纤维弹性模量远大于混凝土弹性模量,在混凝土受力破坏过程中不会发生塑性变形。因此,在有限元模拟中的钢纤维材料,需要对其力学参数进行一定的设定。钢纤维具体力学参数如表3所示:

Table 3. Mechanical parameters of steel fiber

表 3. 钢纤维力学参数

弹性模量	泊松比	屈服应力	塑性应变
210 Gpa	0.15	360 MPa	0

2.2.4. 扩散模型参数

硫酸根离子在钢纤维混凝土中的扩散是一个十分复杂的过程[11],受到各种各样因素的影响。在扩 散模拟中如果要考虑所有因素的影响,目前还难以实现。不过研究人员们在合理的试验基础上,对扩 散过程进行了一定的假设和优化,提出了多种硫酸根离子的扩散模型,为模拟硫酸根离子扩散提供了 支持。

在 ABAQUS 中,通用扩散模型一般用进行各种扩散的模拟。它综合了浓度差、温度差、应力差对扩散的影响,从而能够达到对于线性或非线性的扩散模拟。本文选择通用扩散模型对硫酸根离子在混凝土内部的扩散进行模拟,该模型的具体表达式如式(1):

$$J = -sD\left[\kappa_s \frac{\partial}{\partial x} \left(\ln\left(\theta - \theta^z\right)\right) + \frac{\partial\psi}{\partial x} + \kappa_p \frac{\partial p}{\partial x}\right]$$
(1)

其中:

J ——扩散通量[kg/(m²·s)]; s ——溶解度; D ——是硫酸根离子扩散系数(m²/s); κ_{s} ——温度梯度影响系数; θ ——扩散温度; θ^{z} ——绝对零度;

 $\psi - \psi = c/s$, c是扩散物质浓度; x是扩散距离;

κ_p——应力梯度影响系数; p——应力。

2.3. 扩散过程模拟

本文为了探究的是硫酸盐腐蚀对钢纤维混凝土产生的损伤,扩散过程是中间的一个过渡步,目的是 得到每个时间段的硫酸根离子浓度场。因此,本文扩散模型只考虑浓度差对硫酸根扩散的影响,需要设 置的只有 *s* 和 *D* 。对于 *s* 来说,可以将其理解为扩散物质的活性,在硫酸根扩散模拟中,三种材料均设 置为 1;对于 *D* 而言,粗骨料和钢纤维的在实际扩散中,硫酸根离子无法穿透,因此将其设置为 0 m²/s, 对于在砂浆中的硫酸根离子扩散系数,在现有研究中波动较大,数量级从 10⁻⁸ m²/s 到 10⁻¹² m²/s。参考相 关研究[12]-[14],本文砂浆的 *D* 值设定为 1.5 × 10⁻¹⁰ m²/s。

通过编写 Python 程序,在 ABAQUS 中实现模型的建立以及模型参数的写入与赋予。砂浆和骨料之间选择绑定约束,砂浆和钢纤维之间选择面面接触的内聚力连接方式。然后在分析步中选择瞬态分析的质量扩散分析步,分析步时间长度设定为120,对应扩散时间为120天,最大步长设置为1,最小步长设置为0.001。假定模型左侧为扩散面,硫酸钠质量浓度取5%,对应摩尔浓度的值为352.11,其余三边默认硫酸根离子浓度不进入。对模型进行网格划分,网格单元类型选择三结点线性传热三角形(DC2D3)。

2.4. 腐蚀产物膨胀应变计算与虚拟温度场法

2.4.1. 腐蚀产物膨胀应变计算

对于腐蚀过程中的每一步化学反应[15],体积变化是生成物的体积减去反应物的体积,体积变化率是体积变化与反应物的比值。本模拟只考虑固相钙矾石引起的体积膨胀应变,腐蚀过程中的生成物的体积均大于反应物体积,因此每一步生成物反应都会使得混凝土膨胀,这也正式是硫酸盐腐蚀导致混凝土破坏的主要原因。将每一步反应产生的体积膨胀应变相加,可以得到单位混凝土在整个腐蚀反应过程由钙矾石产生的体积膨胀应变 ϵ_n ,其具体表达式如式(2)所示:

$$\varepsilon_n = [0.534 \times 467.25a + 0.444 \times 1115.88b + 1.310 \times 311.24(n_5 - m_5) + 0.924 \times 372.42(n_6 - m_6)] \times 10^{-6}$$
(2)

其中:

n₅ ——反应后铝酸三钙含量;

n₆——反应后六水铝酸三钙含量;

*m*₅ ——反应前铝酸三钙含量;

m₆——反应前六水铝酸三钙含量。

对于水化后的标准混凝土,我们可以认为除了硫酸钠外其余物质在内部均匀分布,那么实际腐蚀反应系统只有硫酸根离子浓度一个变量。通过将上节中扩散模拟得到的硫酸根离子浓度场从 ABAQUS 中导出后,带入腐蚀反应系统计算,将反应时间设定为扩散时间,就可以每个龄期钙矾石引起的相对应的体积膨胀应变。

但需要注意的是,混凝土本身是一种多孔材料,在受到硫酸盐腐蚀时,产生的腐蚀产物会先对原有 孔隙进行一定的填充,当填充率达到一定的值的时候,才会产生膨胀应变。因此在使用上述方法计算体 积膨胀应变时,需要扣除填充孔隙的那部分腐蚀产物。如果考虑孔隙率的影响,将其膨胀应变转化为线 膨胀应变的表达式如式(3)所示:

$$\varepsilon_P = \left| \varepsilon_n - P\phi \right| \tag{3}$$

其中:

P---单位体积混凝土孔隙率,本文设定为5%;

2.4.2. 虚拟温度场法

在 ABAQUS 软件中对于简化一维模型来说,可以直接根据混凝土本构关系通过膨胀应变产生得到 膨胀应力,然后得到相应的化学损伤大小。但是对于二维模型来说,当每一个结点发生膨胀应变时,都 会受到四周对其的约束,无法直接自由膨胀。因此对于二维钢纤维混凝土模型来说,要得到真实的化学 损伤,那么整体对单个结点的约束效应不可忽视,这会导致我们无法直接通过膨胀应变值来计算膨胀应 力,需要探寻新的方法来更准确的获得化学损伤。

在自然界中,热胀冷缩是一个常见物理现象。在压强恒定的情况下,物体的体积会随着物体温度的 变化而变化。具体体积应变可以表示为式(4)~(5):

$$\varepsilon_T = \frac{V_t^2 - V_t^1}{V_t^1} = \theta \left(T_2 - T_1 \right) \tag{4}$$

$$T = \frac{\left|\varepsilon_n - P\phi\right|}{\theta} \tag{5}$$

其中:

 V_t^2 、 V_t^1 —一变化前后体积;

 T_1 、 T_2 —一变化前后温度;

 θ ——体积膨胀系数。

对钢纤维混凝土模型施加温度后进行降温,这样能使混凝土模型最终没有温度的存在,得到的化学 损伤情况更符合实际情况。

2.5. 力 - 化耦合损伤模拟

分析步 1,选择温度 - 位移稳态分析步,然后将温度边界条件设置为 0,网格类型变换为三结点平面 应力热力耦合三角形单元(CPS3T)。提交作业进行运算,得到关于化学损伤的相关信息。

分析步 2,选择静力通用分析步,输出场变量选择应力和位移。在荷载模块,对混凝土模型底部固支, 然后在顶部施加大小为 10 向下的位移荷载,来模拟钢纤维混凝土受压过程。

最后,提取钢纤维混凝土模型的荷载-位移曲线,经过数据处理后就可以得到力-化耦合损伤后钢 纤维混凝土不同龄期的受压应力应变曲线。

3. 模拟结果分析

3.1. 扩散模拟与虚拟温度场的结果与分析

从图 3、图 4 中可以看出,随着时间的增加,硫酸根离子进入试件内部的深度逐渐加深,并且砂浆同一区域内的硫酸根离子浓度不断增大。并可以发现,钢纤维的存在会对硫酸根离子扩散起到一定的阻碍作用。首先,钢纤维的加入可以改善混凝土的微观结构,减少孔隙率和提高致密度,致密的混凝土结构不利于硫酸根离子的渗透和扩散;除此之外,钢纤维在混凝土中可以形成微电池,钢纤维作为阴极,可能会影响混凝土中的离子分布和迁移过程。电场的存在可以改变离子的扩散路径和速率,进而对硫酸根离子的扩散产生阻碍作用。



Figure 3. 60 days sulfate ion concentration field 图 3. 60 天硫酸根离子浓度场



Figure 4. 120 days sulfate ion concentration field 图 4. 120 天硫酸根离子浓度场

从图 5、图 6 可以看出,随着时间的增加,同一结点温度不断升高,并且不会出现最大值,这是因为 当某一点处硫酸根离子浓度达到最大值后,腐蚀反应会随着时间的推移一直发生,不断生成腐蚀产物产 生膨胀应变,使得虚拟温度不断增大。



Figure 5. 60 days virtual temperature field 图 5. 60 天虚拟温度场



Figure 6. 120 days virtual temperature field 图 6. 120 天虚拟温度场

3.2. 损伤的结果与分析

3.2.1. 拉伸损伤

从图 7、图 8 可以看出,混凝土内部的拉伸损伤呈现出网状分布的特点,且这种网状损伤从侵蚀面向 混凝土内部逐渐递增。这一过程不仅揭示了混凝土内部拉伸损伤的演化机制,也验证了钢纤维在提升混 凝土耐久性方面的重要作用。钢纤维良好的强度和延展性使其在混凝土基体中能有效控制裂缝的产生和 扩展。当混凝土受拉时,首先会在基体中产生微裂缝,这些裂缝在无纤维混凝土中会迅速扩展。然而, 钢纤维的存在会桥接裂缝,从而限制裂缝的扩展。钢纤维通过拉拔和锚固作用吸收能量,分散应力,提 高了混凝土的拉伸强度和韧性。



Figure 7. 60 days tensile damage 图 7. 60 天拉伸损伤



Figure 8. 120 days tensile damage 图 8. 120 天拉伸损伤

3.2.2. 压缩损伤

从图 9、图 10 可以明显发现:化学损伤以拉伸损伤为主,钢纤维周围的压缩损伤明显大于其他混凝 土区域。这是由于钢纤维在混凝土中形成了一个三维的网络结构,有助于分散和传递应力。当混凝土受 压时,局部区域可能会出现应力集中现象,这会导致微裂缝的形成和扩展。钢纤维能够有效地分散这些 应力,减少应力集中,延缓裂缝的形成和扩展,从而提高混凝土的抗压强度。除此之外,钢纤维在混凝 土中提供了额外的增强材料,增强了基体的强度。虽然单根纤维对整体抗压强度的直接贡献有限,但纤 维的均匀分布和整体协同作用显著提高了混凝土的宏观力学性能。这也进一步说明了钢纤维在混凝 伤过程中的重要作用。



Figure 9. 60 days compressive damage 图 9. 60 天压缩损伤



Figure 10. 120 days compressive damage 图 10. 120 天压缩损伤

3.2.3. 力 - 化耦合损伤

从图 11 可以看出试件还未受到位移荷载作用时,就已经存在了一定大小的负应变。这是因为化学损 伤实际上就是由腐蚀产物的体积膨胀所引起的损伤,从而导致试件还未受到位移荷载作用时,就已经存 在了一定大小的负应变。



Figure 11. Concrete damage stress-strain curve 图 11. 混凝土损伤应力 - 应变曲线

4. 总结

本文对于硫酸盐侵蚀钢纤维混凝土力 - 化学损伤模拟的全过程进行了详细介绍。首先是关于硫酸盐 侵蚀钢纤维混凝土扩散模型的建立,进而得到不同龄期的硫酸根离子浓度场。然后从硫酸根离子浓度场 得到不同龄期的钙矾石体积膨胀应变,再通过虚拟温度场法将膨胀应变转化为结点温度,然后赋予模型 进行力 - 化学耦合损伤计算,得到损伤云图和受压应力应变曲线。

从实际可知,硫酸盐腐蚀蚀下钙矾石的体积膨胀是造成钢纤维混凝土化学损伤的根本原因。随着侵 蚀龄期的增加,混凝土产生的化学损伤会不断增加,主要表现为混凝土产生拉伸损伤,导致混凝土产生 膨胀应变。这时,钢纤维的加入可以在混凝土发生受压破坏时起到一定的支撑和阻碍变形作用,将混凝 土受压破坏从脆性转变为延性破坏。通过细观模拟可以明显发现:钢纤维在混凝土产生化学损伤时首先 承受损伤应力,对基体起到保护作用。这种增强得益于钢纤维超高的强度和良好的延展性,使其在混凝 土受到外力作用时能够有效地吸收和分散能量。所以,钢纤维的加入能够有效地分散应力集中,阻止裂 缝的快速扩展,从而提高混凝土的整体耐久性和使用寿命。

参考文献

- Al-Kamyani, Z., Figueiredo, F.P., Hu, H., Guadagnini, M. and Pilakoutas, K. (2018) Shrinkage and Flexural Behaviour of Free and Restrained Hybrid Steel Fibre Reinforced Concrete. *Construction and Building Materials*, 189, 1007-1018. <u>https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.09.052</u>
- [2] Diamond, S. (2003) Thaumasite in Orange County, Southern California: An Inquiry into the Effect of Low Temperature. *Cement and Concrete Composites*, 25, 1161-1164. <u>https://doi.org/10.1016/s0958-9465(03)00138-0</u>
- [3] 仵江涛,何锐,王笑风,等.硫酸盐侵蚀混凝土内外影响因素及影响机理研究进展[J]. 硅酸盐通报, 2019, 38(1): 110-117.
- [4] Yu, X., Chen, D., Feng, J., Zhang, Y. and Liao, Y. (2018) Behavior of Mortar Exposed to Different Exposure Conditions of Sulfate Attack. *Ocean Engineering*, 157, 1-12. <u>https://doi.org/10.1016/j.oceaneng.2018.03.017</u>
- [5] Ning, X., Ding, Y., Zhang, F. and Zhang, Y. (2015) Experimental Study and Prediction Model for Flexural Behavior of Reinforced SCC Beam Containing Steel Fibers. *Construction and Building Materials*, 93, 644-653. https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2015.06.024
- [6] 刘鑫,杨鼎宜,骆静静,谈永泉,王天琪.高温中钢纤维混凝土抗压强度试验研究[J]. 混凝土, 2018(1): 31-34, 41.

- [7] 杜健民, 梁咏宁, 张风杰. 地下结构混凝土硫酸盐腐蚀机理及性能退化[M]. 北京: 中国铁道出版社, 2011.
- [8] 张晓佳, 张高展, 孙道胜, 等. 水泥基材料硫酸盐侵蚀机理的研究进展[J]. 材料导报, 2018, 32(7): 1174-1180.
- [9] 牛龙龙,张士萍,韦有信.钢纤维掺量对混凝土力学性能的影响[J]. 混凝土与水泥制品, 2019(3): 51-54.
- [10] 张彬. 基于随机骨料和虚拟温度场法的混凝土化学损伤细观分析[D]: [硕士学位论文]. 上海: 上海理工大学, 2021.
- [11] 牛立聪. 荷载与硫酸盐侵蚀耦合作用下硫酸根离子在混凝土中扩散反应规律的数值模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 南京理工大学, 2012.
- [12] 王珊珊. 硫酸根离子扩散系数的概率分析方法[D]: [硕士学位论文]. 上海: 上海理工大学, 2020.
- [13] 吴莎莎. 硫酸盐侵蚀混凝土过程的数值模拟[D]: [硕士学位论文]. 南京: 东南大学, 2018.
- [14] 高润东, 赵顺波, 李庆斌, 陈记豪. 干湿循环作用下混凝土硫酸盐侵蚀劣化机理试验研究[J]. 土木工程学报, 2010, 43(2): 48-54.
- [15] Li, T. (2020) Chemical Langevin Equation for Complex Reactions. *The Journal of Physical Chemistry A*, **124**, 810-816. https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b10108