

文章编号: 1000-4750(2015)09-0119-07

硫酸盐侵蚀下水泥净浆膨胀应变计算

殷光吉¹, 左晓宝¹, 孙 伟², 汤玉娟¹

(1. 南京理工大学土木工程系, 南京 210094; 2. 东南大学材料科学与工程学院, 南京 211189)

摘 要: 针对硫酸盐侵蚀过程中水泥净浆体积膨胀问题, 运用微孔力学理论, 建立了水泥净浆基体与其孔隙内钙矾石晶体相互作用的代表性体积单元(RVE)及其力学分析模型; 分析了一定钙矾石生成量下的 RVE 内膨胀应变在微观尺度上的空间分布规律; 通过均匀化方法, 将微观尺度上的 RVE 内膨胀应变转化为宏观尺度上 RVE 所在位置点的等效应变, 分析了该等效应变随钙矾石生成量的变化规律。分析结果表明: 微观尺度上, 孔隙率为 0.1 的 RVE 内钙矾石晶体和侵蚀溶液组成的内球体各向为拉应变, 水泥净浆外球壳径向为压应变、环向为拉应变; 宏观尺度上, 孔隙率为 0.1 的 RVE 所在位置点的径向等效应变为压应变, 且随钙矾石生成量的增加而增大, 而环向等效应变为拉应变, 且随钙矾石的生成量的增加而增大。

关键词: 硫酸盐侵蚀; 力学分析模型; 水泥净浆; 代表性体积单元; 膨胀应变; 钙矾石

中图分类号: TU528 文献标志码: A doi: 10.6052/j.issn.1000-4750.2014.02.0108

NUMERICAL SIMULATION OF THE EXPANSIVE STRAIN IN CEMENT PASTE SUBJECTED TO SULFATE ATTACK

YIN Guang-ji¹, ZUO Xiao-bao¹, SUN Wei², TANG Yu-juan¹

(1. Department of Civil Engineering, Nanjing University of Science & Technology, Nanjing 210094, China;

2. College of Materials Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China)

Abstract: To investigate the volume expansive of cement paste subjected to sulfate attack, based on microporous mechanics, this paper established the mechanics model of representative volume element (RVE) composed by cement paste matrix and ettringite crystal. From microcosmic scale, the distribution of expansive strain within RVE under a certain amount of ettringite formation is analyzed. Based on homogenization method, the expansive strain of RVE on microcosmic scale is converted to the expansive equivalent strain of RVE locative point on macroscopic scale. And the variation regularity of expansive equivalent strain with the amount of ettringite formation is studied. The results show that on microcosmic scale, the isotropic strain of ettringite sphere with RVE of 0.1 porosity is tensile strain, the radial strain of cement matrix spherical shell is compressive strain, but the hoop strain is tensile strain. On macroscopic scale, for RVE of 0.1 porosity, the radial expansive equivalent strain is compressive strain, the hoop expansive equivalent strain is tensile strain, and they both increase with the larger amount of ettringite formation.

Key words: sulfate attack; mechanics analysis model; cement paste; representative volume element (RVE); expansive strain; ettringite

收稿日期: 2014-02-17; 修改日期: 2014-07-14

基金项目: 国家自然科学基金项目(51378262); 国家“973”计划项目(2009CB623203); 江苏省自然科学基金项目(BK20141396); 南京理工大学研究生科研创新/实践计划项目

通讯作者: 左晓宝(1968—), 男, 安徽人, 教授, 博士, 博导, 从事混凝土材料与结构、防灾工程研究(E-mail: xzbao@sina.com).

作者简介: 殷光吉(1990—), 男, 浙江人, 硕士生, 从事混凝土材料研究(E-mail: yinxjlove@163.com);

孙 伟(1935—), 女, 山东人, 教授, 博导, 院士, 从事水泥基材料研究(E-mail: sunwei@seu.edu.cn);

汤玉娟(1989—), 女, 江苏人, 博士生, 从事混凝土材料研究(E-mail: tyjdsr19891103@163.com).

处于海洋、湖泊、河流和酸雨等各种服役环境下的混凝土结构耐久性退化规律是一个十分复杂的物理化学问题, 获得各种环境因素及其耦合作用下的混凝土耐久性退化规律是开展混凝土结构服役性能评估和使用寿命预测的基础^[1-3]。硫酸盐侵蚀是导致混凝土材料与结构耐久性退化的重要环境因素之一^[4-5]。特别是, 处于海洋和地下水环境中的混凝土结构, 水中的硫酸根离子通过扩散传输而渗入混凝土内与水泥的水化产物发生化学反应生成具有膨胀性的石膏和钙矾石等侵蚀晶体^[6-7], 所生成的侵蚀晶体在混凝土孔隙中生长并产生体积膨胀, 导致局部孔隙位置处膨胀应变增加, 造成混凝土内部微结构损伤, 最终引起混凝土膨胀开裂破坏^[8]。因硫酸根离子随溶液主要在毛细孔隙内传输扩散, 本文中孔隙泛指毛细孔隙。分析硫酸盐环境下混凝土孔隙中侵蚀晶体生长而形成的宏观膨胀应变变化规律对定量评估混凝土耐久性退化规律具有重要意义。

目前, 硫酸盐侵蚀下混凝土膨胀规律的研究主要集中在膨胀微观机理和宏观膨胀变形的测试分析方面。虽然对硫酸盐侵蚀引起的微观机理仍存在一定的争议, 但多数研究结果认为^[9-11], 混凝土孔隙中钙矾石晶体生长是导致混凝土宏观膨胀破坏的主要原因。Santhanam 等通过 SEM 微观测试观察了水泥砂浆在硫酸钠溶液中的损伤机理, 分析了钙矾石在孔隙中的生长及其引起砂浆表层损伤、膨胀及剥落过程, 但 SEM 微观测试只能定性分析局部体积膨胀的微观机理, 难以定量表征钙矾石生长过程中引起的膨胀应变时变规律。在宏观膨胀变形方面, 主要通过浸泡在硫酸钠溶液中的混凝土试件进行周期性的宏观膨胀变形测试, 获得了混凝土宏观膨胀应变随侵蚀浓度、材料水灰比和侵蚀时间等参数的变化规律^[12-14], 而钙矾石等侵蚀晶体引起的孔隙体积膨胀对宏观变形的影响分析尚未涉及。此外, 人们根据环境硫酸根离子在水泥净浆内的扩散反应规律, 建立了硫酸盐侵蚀过程中混凝土损伤破坏全过程的分析模型^[15-19], 但大部分模型认为水泥净浆为各向同性连续体, 并引入了化学反应生成钙矾石引起的宏观膨胀作用, 却忽略了从硫酸根离子传输到损伤破坏过程中水泥净浆孔隙中钙矾石等侵蚀晶体生长引起的应变演化规律以及其引起的局部膨胀作用, 也没有从微观尺度上分析水泥净浆中钙矾石等侵蚀晶体生长引起的孔隙区域膨胀应变变化规律这一中间环节, 而这一中间环节的定量表征是建立混

凝土或水泥基材料从硫酸根离子传输、化学反应、石膏和钙矾石等侵蚀晶体生成及其引起的膨胀变形、损伤破坏等全过程的分析方法所需要解决的关键问题之一。本文针对硫酸盐侵蚀过程中水泥净浆体积膨胀问题, 运用微孔力学理论并结合均匀化方法, 以建立因钙矾石生长引起的微观尺度上水泥净浆内微观应变及其宏观尺度上的膨胀应变计算模型, 来分析硫酸盐侵蚀下孔隙内钙矾石生长引起的微观膨胀变形及其宏观等效应变变化规律。

1 模型建立

1.1 基本假设

根据水泥净浆的微结构特点及其钙矾石生长所引起的膨胀行为, 作如下基本假设: 1) 基于 Santhanam 等提出的硫酸盐侵蚀机理^[13], 认为硫酸根离子经扩散进入孔隙内与氢氧化钙反应生成二次石膏, 所生成的石膏进一步与固相水化铝酸钙反应生成钙矾石^[17]。2) 反应剩余的二次石膏仅对水泥净浆起软化作用, 可忽略其对体积膨胀的影响; 钙矾石生长是导致体积膨胀的主要因素。3) 水泥净浆由水泥基体和不同孔径的孔隙组成, 钙矾石在孔隙中生长; 为方便模型的建立, 认为由钙矾石晶体与溶液充满的孔隙空间为内球体, 而孔隙周围的水泥净浆构成外球壳, 两者组成了单元复合球体; 水泥净浆是有这些单元复合球体构成的。4) 单元复合球体因钙矾石生长而产生弹性膨胀, 该单元体所在的水泥净浆整体为无限大体, 故该单元体膨胀边界约束为无限弹性体的约束。

1.2 代表性体积单元(RVE)

根据上述基本假定, 为分析孔隙局部区域因钙矾石生长而引起的宏观应变变化, 从水泥净浆中选取的复合球体为代表性体积单元(RVE), 如图 1 所示, 其中, 内球体为孔隙中的钙矾石及其过饱和溶液, 外球壳为水泥水化产物形成的基体。根据水泥净浆孔结构测试结果, 若其最可几孔半径为 a , 孔隙率为 φ_0 , 代表性体积单元复合球体的半径为 b , 则有:

$$b = a\varphi_0^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

在代表性体积单元中, 孔隙内球体因钙矾石过饱和溶液结晶生长而发生膨胀作用, 其膨胀作用受到水泥净浆基体的约束作用 P , 同时, 外球壳也受到孔隙内球体膨胀产生的压力 P , 并且还受到整个水泥净浆无限大体的弹性约束作用力 Σ , 如图 1 所示。

因此，代表性体积单元的内球体受到外球壳的压力 P 作用，而外球壳受到内表面压力 P 、外表面围压 Σ 的作用，且对于外球壳来说，内压力 P 是主动力，而外压力 Σ 是被动力， Σ 随 P 的改变而变化。根据弹性力学理论^[20]，处于无限大水泥净浆体中的半径为 a 并受到内压 P 作用的空心球体，在 $r=b$ 位置处径向应力可视为代表性体积单元外球壳表面压力 Σ ，即：

$$\Sigma = -\frac{a^3}{b^3}P \quad (2)$$

将式(1)代入式(2)，可得：

$$\Sigma = -\varphi_0 P \quad (3)$$

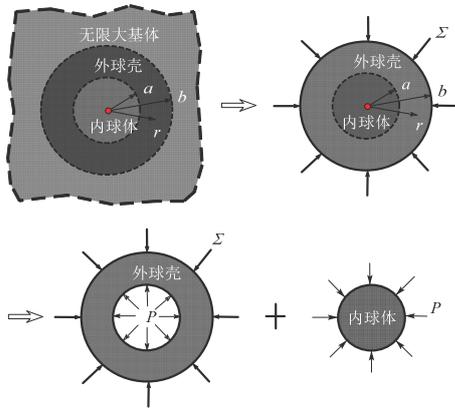


图1 代表性体积单元-复合球体

Fig.1 Representative volume element- composite sphere

1.3 代表性体积单元分析模型

1.3.1 基本方程

根据基本假定 2)，及代表性体积单元 RVE 的组成和受力特点，其球坐标系下的基本方程为：

平衡方程：

$$\begin{cases} \frac{d\sigma_r^i}{dr} + \frac{2}{r}(\sigma_r^i - \sigma_\theta^i) = 0 \\ \sigma_\theta^i = \sigma_\phi^i \end{cases}, \quad i = s, p \quad (4)$$

几何方程：

$$\varepsilon_r^i = \frac{du_r^i}{dr}, \quad \varepsilon_\theta^i = \varepsilon_\phi^i = \frac{u_r^i}{r}, \quad i = s, p \quad (5)$$

物理方程：

$$\begin{cases} \varepsilon_r^i = \frac{3k^i + \mu^i}{9k^i \mu^i} \sigma_r^i - \frac{3k^i - 2\mu^i}{9k^i \mu^i} \sigma_\theta^i + \varepsilon_{res}^i \\ \varepsilon_\theta^i = \varepsilon_\phi^i = \frac{3k^i + 4\mu^i}{18k^i \mu^i} \sigma_\theta^i - \frac{3k^i - 2\mu^i}{18k^i \mu^i} \sigma_r^i + \varepsilon_{res}^i \end{cases}, \quad i = s, p \quad (6)$$

式中： i 表示代表性体积单元的组成类别， $i = s, p$

分别代表外球壳和内球体； u_r^i 分别表示代表性体积单元组成 s 和 p 沿径向(r 方向)的位移； σ_j^i ， $i = s, p$ 、 $j = r, \theta, \phi$ 分别表示代表性体积单元组成 s 和 p 沿 j 方向的应力； ε_j^i ， $i = s, p$ 、 $j = r, \theta, \phi$ 分别表示代表性体积单元组成 s 和 p 沿 j 方向的应变； k^i 和 μ^i 分别表示代表性体积单元组成 s 和 p 的体积模量和剪切模量； ε_{res}^i 分别表示代表性体积单元组成 s 和 p 中钙矾石晶体生长产生的自由膨胀线应变。

1.3.2 钙矾石生长过程中的有效弹性模量及其引起的自由膨胀应变

1.3.2.1 钙矾石生长过程中的有效弹性模量

根据基本假设 3)，钙矾石的生成只能影响到代表性体积单元中孔隙内球体的有效弹性模量，而对水泥净浆基体构成的外球壳有效弹性模量没有影响。因此，随着硫酸根离子在孔隙溶液中扩散反应的进行，孔隙内球体中钙矾石的过饱和浓度增加，钙矾石结晶生长，导致孔隙内球体的体积模量 k^p 和剪切模量 μ^p 随钙矾石过饱和浓度的增加而增大，但水泥净浆基体的有效弹性模量 k^s 、 μ^s 不变。根据 Mori-Tanaka 有效弹性模量理论^[21]，可得：

$$\begin{cases} k^p = k_{ett} + \frac{\alpha_w (k_w - k_{ett}) k_{ett}}{(1 - \alpha_w)(k_w - k_{ett}) \gamma_1 + k_{ett}} \\ \mu^p = \mu_{ett} + \frac{\alpha_w \mu_{ett}}{(1 - \alpha_w) \gamma_2 - 1} \end{cases} \quad (7)$$

式中： k_{ett} 和 μ_{ett} 分别表示钙矾石晶体的体积模量和剪切模量； k_w 为孔隙中溶液的体积模量； γ_1 和 γ_2 分别为修正参数：

$$\begin{cases} \gamma_1 = \frac{3k_{ett}}{3k_{ett} + 4\mu_{ett}} \\ \gamma_2 = \frac{6(k_{ett} + 2\mu_{ett})}{5(3k_{ett} + 4\mu_{ett})} \end{cases} \quad (8)$$

α_w 表示孔隙中溶液所占孔隙空间的百分比：

$$\alpha_w = 1 - \frac{(c - c_0) \cdot m_{mol}}{\rho_{ett}} \quad (9)$$

式中： c / (mol/m³) 为孔溶液中钙矾石过饱和浓度； c_0 / (mol/m³) 为孔溶液中钙矾石饱和浓度； m_{mol} / (g/mol) 为钙矾石摩尔质量； ρ_{ett} / (g/m³) 为钙矾石密度。

1.3.2.2 钙矾石生长引起的自由膨胀应变

在硫酸盐侵蚀下，随着扩散反应的进行，所生成的钙矾石晶体在水泥净浆孔隙中不断长大并填充孔

隙；当孔隙被填充到一定程度时，钙矾石晶体恰与孔壁接触而无相互作用力，此时为临界状态。根据孔隙体积和钙矾石浓度之间的关系，可获得临界状态时钙矾石过饱和浓度：

$$c_{cr} = \alpha_0 \frac{\rho_{ett}}{m_{mol}} + c_0 \quad (10)$$

式中， c_{cr} (mol/m³) 为临界状态时钙矾石过饱和浓度， α_0 为临界状态时钙矾石晶体所占孔隙空间的百分比。

根据基本假设 1)、2)，钙矾石生长是引起水泥净浆体积膨胀的主要原因，而钙矾石生长是在孔隙中发生的，因此，在式(6)中由钙矾石生长引起净浆自由膨胀应变 $\varepsilon_{res}^s = 0$ ，根据孔隙内球体中钙矾石生成反应前后水泥水化产物等反应物和钙矾石之间的体积变化，并考虑水泥浆体中孔隙填充的影响，可获得孔隙内球体中钙矾石自由膨胀线应变 ε_{res}^p [22]：

$$\varepsilon_{res}^p = \begin{cases} 0 & , c < c_{cr} \\ 1.959 \times 10^{-5} (c - c_{cr}) & , c \geq c_{cr} \end{cases} \quad (11)$$

式中， ε_{res}^p 为孔隙内球体中钙矾石生长引起的自由膨胀应变。

1.3.3 基本方程的边界条件

根据代表性体积单元 RVE 的受力特点及式(3)，可建立孔隙内球体和水泥净浆基体外球壳的位移和应力边界条件为：

孔隙内球体：

$$\begin{cases} u_r^p = 0, & r = 0 \\ \sigma_r^p = -P, & r = a \end{cases} \quad (12)$$

基体外球壳：

$$\begin{cases} \sigma_r^s = -P, & r = a \\ \sigma_r^s = -\varphi_0 P, & r = b \end{cases} \quad (13)$$

在孔隙内球体和基体外球壳的界面上，应满足位移协调条件：

$$u_r^p = u_r^s, \quad r = a \quad (14)$$

1.3.4 基本方程的解

根据基本方程式(4)~式(6)及边界条件式(12)、式(13)，可得到代表性体积单元中孔隙内球体和净浆外球壳的位移解为：

孔隙内球体：

$$u_r^p = \left(\varepsilon_{res}^p - \frac{P}{3k^p} \right) r, \quad 0 \leq r \leq a \quad (15)$$

基体外球壳：

$$u_r^s = \frac{a^3}{4\mu^s r^2} P, \quad a < r < b \quad (16)$$

将式(15)、与式(16)代入式(14)，则有：

$$P = \frac{12k^p \mu^s}{3k^p + 4\mu^s} \varepsilon_{res}^p \quad (17)$$

将式(15)~式(17)代入式(5)，可获得代表性体积单元中孔隙内球体和基体外球壳因钙矾石生长而引起的膨胀应变分布：

孔隙内球体：

$$\varepsilon_r^p = \varepsilon_\theta^p = \varepsilon_\varphi^p = \frac{3k^p \varepsilon_{res}^p}{3k^p + 4\mu^s}, \quad 0 \leq r \leq a \quad (18)$$

基体外球壳：

$$\begin{cases} \varepsilon_r^s = -\frac{6k^p \varepsilon_{res}^p}{3k^p + 4\mu^s} \frac{a^3}{r^3} \\ \varepsilon_\theta^s = \varepsilon_\varphi^s = \frac{3k^p \varepsilon_{res}^p}{3k^p + 4\mu^s} \frac{a^3}{r^3} \end{cases}, \quad a < r < b \quad (19)$$

1.4 宏观等效应变

根据代表性体积单元组成特征，它仅是一个内径为最可几孔径尺度上的复合球体，即代表性体积单元 RVE 空间尺度在纳米级和微米级之间，相比于无限大的水泥净浆试件，代表性体积单元 RVE 的尺度可忽略不计，其在空间上可视为一点。因此，钙矾石生长引起的代表性体积单元内膨胀应变在材料宏观尺度上可视其所在位置点的应变，则该点的膨胀应变即为宏观尺度上的宏观等效应变。

根据宏观不同尺度上的均匀化理论，代表性体积单元 RVE 因钙矾石生长而在宏观尺度上产生的宏观等效应变为：

$$E_j = \overline{\varepsilon_j^p + \varepsilon_j^s}, \quad j = r, \theta, \varphi \quad (20)$$

式中： E_j ， $j = r, \theta, \varphi$ 为代表性体积单元 RVE 所在位置处沿 j 方向的宏观等效应变； $\overline{\varepsilon_j^p + \varepsilon_j^s}$ 表示代表性体积单元中孔隙内球体和基体外球壳在 j 方向应变分布 ε_j^p 和 ε_j^s 在 RVE 空间 Ω_{REV}^p 和 Ω_{REV}^s 上的体积平均之和，即 $\overline{\varepsilon_j^p + \varepsilon_j^s} = \overline{\varepsilon_j^p} + \overline{\varepsilon_j^s}$ ，其中：

$$\begin{cases} \overline{\varepsilon_j^p} = \frac{1}{V_{REV}} \int_{\Omega_{REV}^p} \varepsilon_j^p dV \\ \overline{\varepsilon_j^s} = \frac{1}{V_{REV}} \int_{\Omega_{REV}^s} \varepsilon_j^s dV \end{cases} \quad (21)$$

将式(18)、式(19)代入式(21)、式(20)，并经积分运算后可得代表性体积单元所在位置处的宏观等效

应变为:

$$\begin{cases} E_r = \frac{3\varphi_0(1+2\ln\varphi_0)k^p}{3k^p+4\mu^s} \varepsilon_{res}^p \\ E_\theta = E_\varphi = \frac{3\varphi_0(1-\ln\varphi_0)k^p}{3k^p+4\mu^s} \varepsilon_{res}^p \end{cases} \quad (22)$$

因此, 根据代表性体积单元所在位置点的宏观体积膨胀应变 E_V :

$$E_V = E_r + E_\theta + E_\varphi \quad (23)$$

可得因孔隙内钙矾石生长引起的代表性体积单元处的宏观体积膨胀应变为:

$$E_V = \frac{9\varphi_0 k^p}{3k^p + 4\mu^s} \varepsilon_{res}^p \quad (24)$$

将式(11)代入式(24), 可获得硫酸盐侵蚀过程中因扩散反应而生成的钙矾石过饱和浓度与其引起的该浓度处水泥净浆体积膨胀应变之间的关系:

$$E_V = \begin{cases} 0 & , c < c_{cr} \\ \frac{17.63 \times 10^{-5} \varphi_0 k^p}{3k^p + 4\mu^s} (c - c_{cr}) & , c \geq c_{cr} \end{cases} \quad (25)$$

2 数值模拟

2.1 材料以及相关参数

为分析硫酸盐侵蚀下水泥净浆膨胀等效应变, 根据上述理论推导建立力学分析模型, 所需参数如下: 气体常数 $R=8.31451$, 温度 $T=298$ K, 最可几孔半径 $a=10$ nm, 钙矾石密度 $\rho_{ett}=1.77$ g/cm³, 钙矾石摩尔质量 $m_{mol}=1255$ g/mol, 钙矾石摩尔体积 $V_{mol}=714$ cm³/mol, 钙矾石饱和浓度 $c_0=6.06$ mol/m³, 钙矾石晶体填充孔隙并与孔壁接触时所占孔隙空间的比率 $\alpha_0=0.2$, 钙矾石体积模量 $k_{ett}=16.8$ GPa, 水溶液体积模量 $k_w=2.2$ GPa, 水泥净浆体积模量 $k^s=18.3$ GPa, 水泥净浆剪切模量 $\mu^s=9.6$ GPa。

2.2 数值计算

2.2.1 RVE 内应变分布

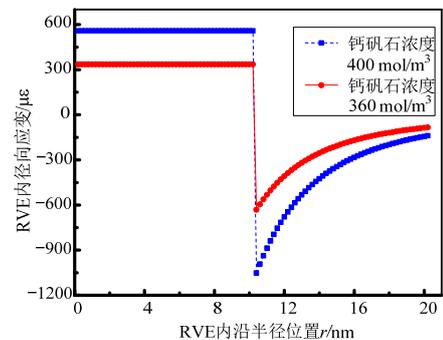
图 2(a)、图 2(b)为钙矾石浓度 360 mol/m³ 和 400 mol/m³ 时孔隙率为 0.1 的代表性体积单元 RVE 内径向应变与环向应变沿半径位置 r 的分布规律图。从图 2(a)、图 2(b)中可以发现, RVE 内径向应力与环向应力曲线均由两部分组成, 这是由内球体与外球壳两者不同的形状、力学性能以及受力情况导致的。在内球体 ($0 \leq r \leq a$) 中径向与环向均为膨胀应变, 且数值上处处相等, 如图 2(a)、图 2(b)中所示, 当钙矾石浓度为 360 mol/m³ 时内球体中径向膨胀应变为

334.8 $\mu\varepsilon$, 环向膨胀应变也为 334.8 $\mu\varepsilon$ 。对于空心球壳 ($a < r \leq b$), 其径向为压应变, 环向为拉应变, 两者应力各自均随着 RVE 内沿半径位置 r 的增大而逐渐减小, 在空心球壳内表面处应力最大, 外表面处应力最小; 且两者应力减小幅度也随着 RVE 内沿半径位置 r 的增大而逐渐减小。此外, 从图 2(a)、图 2(b)中还可发现中, 当孔隙溶液中的钙矾石浓度提高时, RVE 内球体膨胀应变、空心球壳中径向压应变与环向拉应变均随之增大。

2.2.2 RVE 处宏观应变分布

图 3 为宏观尺度上孔隙率为 0.1 的代表性体积单元 RVE 处宏观等效应变与钙矾石浓度之间的关系。从图 3 中可见, 当孔溶液中钙矾石浓度低于某一过饱和浓度时, 在宏观尺度上 RVE 表现为宏观等效应变为 0, 这是由于孔隙中结晶生成的钙矾石不足以填充孔隙, 导致 RVE 发生体积膨胀; 而当钙矾石浓度大于某一过饱和浓度时, RVE 处应变状态表现为宏观径向压应变、环向拉应变、体积拉应变, 且这三者应变都随钙矾石浓度的增大而线性增加, 如图 3 中 RVE 处宏观径向应变可见, 在钙矾石浓度 $c=310$ mol/m³ 至 $c=320$ mol/m³ ($\Delta c=10$ mol/m³) 区段内宏观径向压应变增加 20.4 $\mu\varepsilon$, 而在钙矾石浓度 $c=410$ mol/m³ 至 $c=420$ mol/m³ ($\Delta c=10$ mol/m³) 区段内宏观径向压应变也增加了 20.4 $\mu\varepsilon$ 。

图 4 为在钙矾石浓 400 mol/m³ 时代代表性体积单元 RVE 处宏观等效应力与孔隙率之间的关系。从图 4 可以看出, 在孔隙率从 0%~60%变化过程中, 宏观径向起初为压应变, 随着孔隙率增大径向压应变先增大后减小; 而宏观环向一直表现为拉应变, 且拉应变随孔隙率的增大而增大。当孔隙率接近于 0%时, RVE 相当于实心的水泥净浆基体圆球, 水泥净浆体内不生产钙矾石晶体, 故不引起 RVE 体积膨胀, 即 RVE 处宏观等效应变为 0。



(a) 径向应变

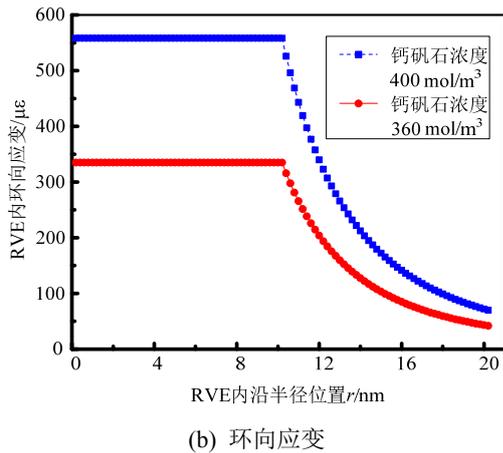


图2 RVE内应变沿半径位置 r 分布规律图

Fig.2 Strain distribution along the radial position r in RVE

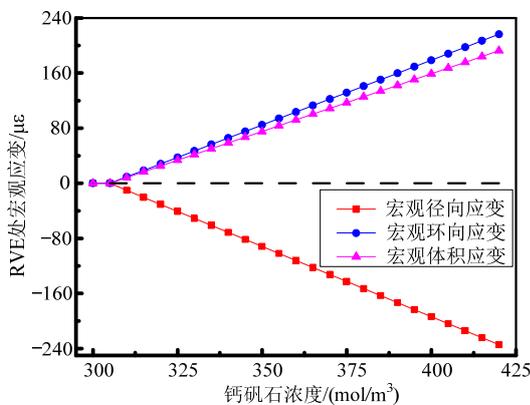


图3 RVE处宏观等效应变与钙矾石浓度之间的关系

Fig.3 The relationship between RVE macroscopic equivalent strain and ettringite concentration

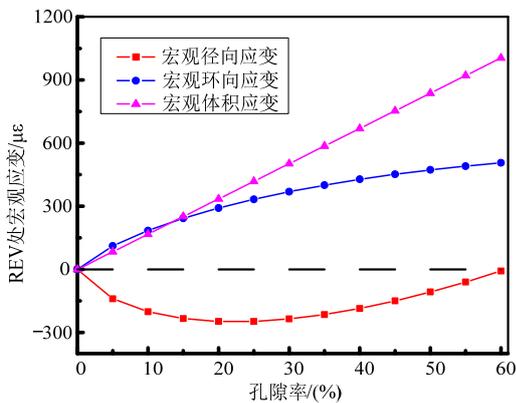


图4 RVE处宏观等效应变与孔隙率之间的关系

Fig.4 The relationship between RVE macroscopic equivalent strain and the porosity

3 结论

硫酸盐侵蚀水泥基材料是一种复杂的物理化学过程。本文通过建立水泥净浆 RVE 的力学分析模型,从微观尺寸上分析 RVE 内膨胀应变的空间分布规律;然后通过均匀化方法,从宏观尺寸上分析

RVE 所在位置处的等效应变随钙矾石浓度与孔隙率的变化规律。结果表明:

(1) 微观尺度上,孔隙率为 0.1 的 RVE 内球体各向均为拉应变,外球壳径向为压应变,环向为拉应变,且钙矾石浓度越高,内球体、外球壳的各向应变越大;

(2) 宏观尺度上,孔隙率为 0.1 的 RVE 径向等效为压应变,环向等效为拉应变,体积应变为拉应变,三者随钙矾石的浓度增大而线性增大;

(3) 宏观尺度上,钙矾石浓度为 400 mol/m^3 、孔隙率从 0%~60%变化过程中 RVE 径向最初为等效压应变,随孔隙率的增大先增大后变小,REV 环向为等效拉应变,随孔隙率增大而增大。

参考文献:

- [1] Shi X M, Xie N, Fortune K, Gong J. Durability of steel reinforced concrete in chloride environments: an overview [J]. Construct and Building Materials, 2012, 30(5): 125—138.
- [2] 夏辉, 周新刚, 李克非. 不同暴露条件下海工混凝土耐久性几何效应分析[J]. 工程力学, 2013, 30(9): 227—233. Xia Hui, Zhou Xingang, Li Kefei. The In-situ monitoring principles and the residual life prediction of the durability of concrete structure in marine environment [J]. Engineering Mechanics, 2013, 30(9): 227—233. (in Chinese)
- [3] Sun Wei. Durability and service life of structural concrete under load and environment coupling effects [J]. Journal of Southeast University, 2006, 36(Suppl 2): 7—14 (in Chinese).
- [4] Neville A. The confused world of sulfate attack on concrete [J]. Cement and Concrete Research, 2004, 34(8): 1275—1296.
- [5] Suleiman A R, Soliman A M, Nehdi M L. Effect of surface treatment on durability of concrete exposed to physical sulfate attack [J]. Construction and Building Materials, 2014, 73: 674—681.
- [6] Reading T J. Physical aspects of sodium sulfate attack on concrete [M]. Farmington Hills, MI: ACI SP-77, 1982: 75—81.
- [7] Ma K, Xie Y, Long G, et al. Deterioration characteristics of cement mortar by physical attack of sodium sulfate [J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2007, 35(10): 1376—1381.
- [8] 张英姿, 赵颖华, 范颖芳. 受酸雨侵蚀混凝土弹性模量研究[J]. 工程力学, 2011, 28(2): 175—180. Zhang Yingzi, Zhao Yinghua, Fan Yingfang. A theoretical model for assessing elastic modulus of concrete corroded by acid rain [J]. Engineering Mechanics, 2011, 28(2): 175—180. (in Chinese)
- [9] Santhanam M, Cohen M D, Olek J. Mechanism of sulfate

- attack: A fresh look Part 1: Summary of experimental results [J]. *Cement and Concrete Research*, 2002, 32(6): 915—921.
- [10] Paulo J M, Monteiro, Kimberly E, Kurtis. Time to failure for concrete exposed to severe sulfate attack [J]. *Cement and Concrete Research*, 2003, 33(7): 987—993.
- [11] Persson Bertil. Sulphate resistance of self-compacting concrete [J]. *Cement and Concrete Research*, 2003, 33(12): 1933—1938.
- [12] 金祖权, 孙伟, 张云升, 等. 混凝土在硫酸盐、氯盐溶液中的损伤过程[J]. *硅酸盐学报*, 2006, 34(5): 630—635.
Jin Zuquan, Sun Wei, Zhang Yunsheng, et al. Damage of concrete in sulfate and chloride solution [J]. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, 2006, 34(5): 630—635. (in Chinese)
- [13] Shannag M J, Shaia H A. Sulfate resistance of high-performance concrete [J]. *Cement and Concrete Composites*, 2003, 25(3): 363—369.
- [14] 邓德华, 肖佳, 元强, 等. 石灰石粉对水泥基材料抗硫酸盐侵蚀性的影响及其机理 [J]. *硅酸盐学报*, 2006, 34(10): 1243—1248.
Deng Dehua, Xiao Jia, Yuan Qiang, et al. Effect of limestone powder on the sulfate-resistance of materials based on cement and its mechanism [J]. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, 2006, 34(10): 1243—1248. (in Chinese)
- [15] Clifton J R, Ponnensheim J M. Sulfate attack of cementitious materials: volumetric relations and expansions [R]. Lewisburg: Building and Fire Research, National Institute of Standards and Technology Gaithersburg, 1994: 1—22.
- [16] Casanova I, Aguado A, Agullo L. Aggregate expansivity due to sulfide oxidation-II Physicochemical modeling of sulfate attack [J]. *Cement and Concrete Research*, 1997, 27(11): 1627—1632.
- [17] Tixier R, Mobasher B, Asce M. Modeling of damage in cement-based materials subjected to external sulfate attack. II: Comparison with experiments [J]. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 2003, 15(4): 314—322.
- [18] Bary B. Simplified coupled chemo-mechanical modeling of cement pastes behavior subjected to combined leaching and external sulfate attack [J]. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 2008, 32(14): 1791—1816.
- [19] 左晓宝, 孙伟. 硫酸盐侵蚀下的混凝土损伤破坏全过程[J]. *硅酸盐学报*, 2009, 37(7): 1063—1067.
Zuo Xiaobao, Sun Wei. Full process analysis of damage and failure of concrete subjected to external sulfate attack [J]. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, 2009, 37(7): 1063—1067. (in Chinese)
- [20] 徐芝纶. 弹性力学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006: 213—215.
Xu Zhilun. *Elasticity mechanics* [M]. Beijing: Higher Education Press, 2006: 213—215. (in Chinese)
- [21] Mori T, Tanaka K. Average stress in an average elastic energy of materials with misfitting inclusions [J]. *Acta Metallurgica*, 1973, 21(5): 571—574.
- [22] Zuo X B, Sun W. Numerical investigation on expansive volume strain in concrete subjected to sulfate attack [J]. *Construction and Building Materials*, 2012, 36: 404—410.