

细观尺度上的钢筋混凝土 结构耐久性数值模拟

陈艾荣 潘子超 著



科学出版社

细观尺度上的钢筋混凝土结构 耐久性数值模拟

陈艾荣 潘子超 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书系统介绍了细观尺度上钢筋混凝土结构耐久性数值模拟的基础理论和应用示例。第 1 章回顾和总结了国内外的研究现状。第 2 章阐述了混凝土细观模型的模拟方法。第 3 章介绍了混凝土耐久性所涉及的数值计算方法。第 4~7 章分别研究了细观尺度上的水分传输、氯离子扩散、混凝土碳化及钢筋锈蚀和混凝土开裂问题。第 8 章给出了具体的工程实例以阐述细观尺度方法在实际工程中的应用方式。对应章节对关键概念和理论给出了详细的解释,并提供了关键程序源代码,以便于更直接地理解细观尺度研究的思路和方法。

本书是作者及其带领的研究团队历时数年的研究成果,可供桥梁设计及运营养护人员和大专院校师生参考。

图书在版编目(CIP)数据

细观尺度上的钢筋混凝土结构耐久性数值模拟/陈艾荣,潘子超著. —北京:科学出版社,2016.12

ISBN 978-7-03-051072-3

I. ①细… II. ①陈… ②潘… III. ①钢筋混凝土结构-耐用性-数值模拟-研究 IV. ①TU375

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 307273 号

责任编辑:赵敬伟/责任校对:钟洋
责任印制:张伟/封面设计:耕者工作室

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京教图印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016 年 12 月第 一 版 开本: B5 (720 × 1000)

2016 年 12 月第一次印刷 印张: 15 3/4

字数: 304 000

定价: 98.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

混凝土由于其低廉的价格和良好的性能被广泛应用于土木工程领域，并在可预见的未来仍将作为一种主要的建筑材料。然而，随着基础设施建设逐渐从大规模兴建向养护维修阶段发展，许多既有混凝土结构在使用过程中陆续出现了耐久性不足的问题，不仅缩短了结构的使用寿命，而且造成了极大的经济损失。从全寿命成本 (life cycle cost, LCC) 的角度出发，在综合考虑了建设、运营、维修乃至拆除回收等成本后，混凝土低造价的优势可能不复存在。鉴于此，混凝土结构的耐久性成为当前混凝土领域的研究热点之一。

与力学性能类似，混凝土的耐久性能也可通过试验来进行研究，但存在两个明显的不足：①试验费用昂贵，混凝土耐久性退化过程受外界环境条件影响很大。为了模拟真实环境，混凝土耐久性试验往往需要人工环境模拟设备的支持，这极大地增加了试验成本；②试验周期漫长，混凝土耐久性退化是一个十分缓慢的过程，自然暴露状态下的耐久性试验需持续数月甚至数年之久。尽管目前已经出现了很多加速试验方法，但这些加速试验中的耐久性退化机理与自然暴露条件下有明显不同，因此试验结果仅能作为横向比较的依据，并不能直接代表混凝土在真实环境下的耐久性退化过程。

混凝土耐久性的数值模拟是建立在数学物理分析和数值计算方法基础上的一种新兴的技术。其基本思想是，通过数学物理方法，对混凝土耐久性的退化机理进行分析，得出退化过程的控制方程，然后选择合适的数值计算方法对这些方程进行求解，以获得所期望的关键性结果，如氯离子浓度分布、混凝土碳化深度等参数。目前，围绕该项技术的研究已经达到了一定的高度，但尚存在两个方面的不足：①多数研究集中在宏观尺度上，不能很好地考虑骨料等材料自身的特点对混凝土耐久性退化的影响；②尚没有专门针对混凝土耐久性数值模拟的商业化软件，而学术文献中一般不涉及数值模拟的具体实现代码，所以该课题的研究有较高的起点和门槛。

本书作为一本专门论述细观尺度上的混凝土耐久性数值模拟的技术类书籍，集中体现了作者近些年来在该领域所开展的研究工作以及取得的研究成果。与现有大多数同类书籍相比，本书在编写过程中着重突出以下特点：①完整性，从模型到理论，再到应用，使读者能够清晰地认识到细观尺度上模拟混凝土耐久性退化的一般流程和关键性问题；②实用性，本书对一些关键、难以理解的问题进行了额外的解释，以帮助读者更好地了解公式、定律、算法的来龙去脉。此外，还给出了大量

的程序代码,供读者参考。

本书内容共 8 章。第 1 章回顾和总结了国内外在混凝土耐久性数值模拟领域的研究现状。第 2, 3 章为理论基础,其中第 2 章主要介绍了细观尺度上混凝土骨料的模拟方法,第 3 章则介绍了混凝土耐久性所涉及的数值计算方法。第 4~7 章为基础应用,其中,第 4 章通过中子成像技术研究了细观尺度上骨料对水分传输过程的影响,为后续章节奠定了理论基础。第 5, 6 章则偏重于以概率方法研究骨料对氯离子扩散和混凝土碳化的影响。第 7 章则研究了细观尺度上的钢筋锈蚀以及由此导致的混凝土保护层开裂等问题。在前 7 章的基础上,第 8 章给出了具体的工程实例,用于演示本书的细观尺度方法在工程层面的应用途径。

本书相关内容的研究和出版得到了国家自然科学基金“混凝土桥梁构件耐久性数值模拟”(50878145)和“基于细观尺度的钢筋混凝土构件耐久性数值模拟(51378383)”的资助,特此感谢。

细观尺度上的混凝土耐久性数值模拟是一个复杂的跨学科领域,需进行长期的研究工作。为体现其在结构设计和运营养护方面的价值,尚有大量的研究工作有待开展和完善。本书仅仅包含了作者在该领域的一些探索性成果和一点心得体会。受水平限制,书中不妥之处在所难免,恳请读者批评指正。

陈艾荣 潘子超

2016 年 8 月于同济大学

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 概论	1
1.2 混凝土材料的耐久性能	1
1.3 混凝土耐久性能的数值模拟	3
1.3.1 数值模拟的本质	3
1.3.2 在层面上的分类	4
1.3.3 在尺度上的分类	4
1.4 水分传输过程数值模拟研究现状	6
1.5 氯离子传输过程数值模拟研究现状	9
1.5.1 传输机理方面的研究	9
1.5.2 扩散系数方面的研究	11
1.5.3 临界浓度方面的研究	12
1.6 混凝土碳化过程数值模拟研究现状	13
1.7 钢筋锈蚀过程数值模拟研究现状	15
1.8 细观尺度耐久性数值模拟研究现状	16
1.8.1 细观模型的构建	16
1.8.2 细观模型的网格划分	16
1.8.3 耐久性退化过程的模拟	17
1.9 本书内容简介	17
第 2 章 混凝土的细观模型	19
2.1 概述	19
2.2 混凝土材料的细观组成	19
2.2.1 水泥浆	20
2.2.2 骨料	20
2.2.3 界面层	26
2.3 模型构建的一般方法	27
2.4 二维模型	28
2.4.1 骨料级配在二维平面上的表现	28
2.4.2 圆形	30

2.4.3	多边形	31
2.4.4	椭圆形	37
2.5	三维模型	42
2.5.1	球形	43
2.5.2	椭球形	43
2.5.3	多面体形	44
2.5.4	抽象函数型	50
2.6	边界效应及周期性边界条件	53
2.6.1	边界效应	53
2.6.2	周期性边界条件	55
2.7	本章小结	57
第 3 章	混凝土耐久性数值计算方法	58
3.1	概述	58
3.2	有限单元法的基本原理	58
3.2.1	微分方程的等效积分形式	58
3.2.2	加权余量法中的 Galerkin 法	59
3.2.3	空间域和时间域上的离散	61
3.2.4	等参变换及 Jacobi 矩阵	63
3.3	网格剖分	66
3.3.1	自由网格剖分	66
3.3.2	背景网格剖分	67
3.4	物质传输的控制方程	71
3.4.1	物质传输的机理	72
3.4.2	方程推导	73
3.4.3	边界与初始条件	75
3.5	控制方程的求解过程	77
3.5.1	扩散过程	77
3.5.2	对流(迁移)扩散过程	79
3.5.3	带消耗项的扩散过程	82
3.6	稀疏矩阵技术	84
3.6.1	常见稀疏矩阵存储格式	84
3.6.2	CSR 稀疏矩阵存储格式的实现	87
3.7	计算程序的编写	91
3.7.1	求解模块整体架构	91
3.7.2	Jacobi 矩阵计算	92

3.7.3	单元及全局矩阵计算	92
3.7.4	稀疏矩阵求解器	94
3.8	本章小结	94
第 4 章	骨料对水分传输过程的影响	95
4.1	概述	95
4.2	理论基础	96
4.2.1	中子的基本特性	96
4.2.2	中子成像原理	97
4.2.3	水分传输模型	98
4.3	材料及试验	99
4.3.1	试验材料	99
4.3.2	试件准备	100
4.3.3	试验过程	100
4.4	试验结果	102
4.4.1	成像结果	102
4.4.2	水分含量的分布曲线	104
4.5	数值模拟	106
4.5.1	水分扩散性系数	106
4.5.2	有限元模型	109
4.5.3	计算结果及比较	109
4.6	分析与讨论	112
4.6.1	骨料形状的影响	112
4.6.2	其他因素的影响	114
4.7	本章小结	115
第 5 章	细观尺度上的氯离子扩散过程	117
5.1	概述	117
5.2	氯离子扩散的机理	117
5.2.1	控制方程	117
5.2.2	混凝土中的氯离子形态	117
5.2.3	Fick 定律	119
5.2.4	骨料的影响	122
5.3	细观尺度上的稳态分析方法	124
5.3.1	计算过程	124
5.3.2	界面层中的氯离子扩散系数	126
5.3.3	均质化方法中的随机性问题	128

5.3.4	随机分布类型	129
5.3.5	骨料级配的影响	130
5.3.6	骨料形状的影响	133
5.3.7	骨料含量的影响	137
5.3.8	尺寸效应的影响	139
5.3.9	小结	140
5.4	细观尺度上的瞬态分析方法	141
5.4.1	氯离子浓度的空间变异性	141
5.4.2	空间变异性的评价指标	144
5.4.3	典型实例分析	146
5.4.4	骨料级配的影响	149
5.4.5	骨料形状的影响	150
5.4.6	骨料含量的影响	151
5.4.7	氯离子扩散系数的影响	151
5.4.8	小结	153
5.5	本章小结	154
第 6 章	细观尺度上的混凝土碳化过程	155
6.1	概论	155
6.2	水泥水化的基本原理	155
6.2.1	水泥的化学组成	155
6.2.2	水泥水化动力学模型	157
6.2.3	水化产物预测	159
6.3	水泥浆碳化数学模型	160
6.3.1	水泥浆的碳化机理	160
6.3.2	数学模型的单位系统	161
6.3.3	CO ₂ 平衡方程	161
6.3.4	CH 平衡方程	161
6.3.5	其他平衡方程	162
6.3.6	平衡方程的简化	162
6.4	计算参数	164
6.4.1	CO ₂ 有效扩散系数	164
6.4.2	水泥浆孔隙率	165
6.4.3	水分等温吸附曲线	166
6.4.4	碳化反应速率	170
6.4.5	孔隙溶液的 pH 值	174

6.5	数学模型的求解	175
6.6	试验验证	178
6.7	细观尺度上的碳化	179
6.7.1	细观尺度上的碳化深度	179
6.7.2	典型算例	181
6.7.3	骨料级配的影响	182
6.7.4	骨料形状的影响	183
6.7.5	骨料含量的影响	184
6.8	本章小结	185
第 7 章	细观尺度上的钢筋锈蚀过程	186
7.1	概述	186
7.2	格构式模型的基本原理	187
7.2.1	核心理念	187
7.2.2	背景网格	188
7.2.3	单元类型和属性	190
7.2.4	有限元分析	192
7.2.5	单元失效准则	194
7.2.6	单元的去除机制	194
7.2.7	裂缝宽度的计算方法	198
7.2.8	计算流程	199
7.3	钢筋的锈蚀模型	200
7.3.1	均匀锈蚀	200
7.3.2	非均匀锈蚀	204
7.3.3	计算流程	205
7.3.4	试验验证	208
7.4	典型算例分析	210
7.4.1	计算区域的选择	210
7.4.2	单钢筋均匀锈蚀	211
7.4.3	单钢筋非均匀锈蚀	212
7.4.4	多钢筋均匀锈蚀	213
7.4.5	多钢筋非均匀锈蚀	215
7.4.6	角区均匀锈蚀	216
7.4.7	裂缝连通性	217
7.4.8	小结	219
7.5	本章小结	220

第 8 章 工程应用	221
8.1 概述	221
8.2 案例一	221
8.2.1 工程概况	221
8.2.2 表观氯离子扩散系数	222
8.2.3 钢筋开始锈蚀时间	224
8.3 案例二	225
8.3.1 工程概况	225
8.3.2 确定计算区域	226
8.3.3 确定计算参数	226
8.3.4 分析结果	227
8.4 案例三	230
8.4.1 工程概况	230
8.4.2 计算参数及模型	231
8.4.3 分析结果	232
8.5 本章小结	233
参考文献	234

第1章 绪 论

1.1 概 论

伴随着人类文明的发展,用于土木工程的建筑材料也经历了伟大的变革,从古老的石头、木头、稻草等天然材料发展到近现代的混凝土、钢材等人工合成材料。在这一过程中,人类对于材料性能的认识也先后经历了从表象到原因再到表象的过程。古老的经验并不能满足人类的好奇心,人们希望能探求经验背后暗藏的规律。而当这样的规律被解密后,人们又能够更好地、更加自信地去面对事物所展现在我们面前的表象,同时对事物加以有目的的改造。

混凝土是目前在土木工程领域应用中最为广泛的建筑材料之一。通过对实践经验进行总结,人们逐渐掌握了这种材料的特性,例如,混凝土适合受压,不适合受拉;混凝土从浇筑到建立强度需要一定的时间;配合比不当会影响混凝土的工作性能等。并在此基础上建立了对应的结构设计方法。为了更好地了解混凝土材料,研究人员逐渐将视野放在了更小的尺度上,从细观到微观甚至纳观。通过这些研究,人们逐渐认识了水泥水化究竟是一个怎样的过程,涉及了怎样的化学反应;混凝土为何具备良好的受压性能;究竟是什么影响了混凝土的凝固时间等更深层次的内在规律。这些研究又促使人们开始思考,如何依靠这些规律,通过对传统混凝土材料的改进来获得更好的性能。于是,出现了多种矿物掺合料混凝土、纤维混凝土、碳纳米管混凝土等新型混凝土材料。

相对于材料研究,混凝土结构设计却一直停留在宏观尺度上。原因是,结构设计所涉及的几何尺度远高于材料科学的研究。在当前计算机能力的限制下,无法将整个结构甚至单一构件放在细观甚至更小的尺度上进行分析。但随着计算科学的发展,在更小尺度上进行结构设计将成为一种可能及未来的趋势。只有这样,材料科学的研究成果才能够充分及完整地体现在结构设计中。

1.2 混凝土材料的耐久性能

长期以来,混凝土材料由于其低廉的造价被广泛地应用在桥梁等基础设施的建设当中,取得了良好的经济效益。然而随着欧美等发达国家和地区的基础设施建设逐渐从大规模兴建向养护维修阶段发展,许多既有混凝土结构在使用过程中

出现了耐久性不足的问题, 不仅缩短了结构的使用寿命, 而且造成了极大的经济损失。从全寿命成本的角度出发, 在综合考虑了建设、运营、维修乃至拆除回收等成本后, 混凝土低造价的优势可能不复存在, 这使得混凝土结构的应用前景面临着严峻的挑战。

究竟什么是混凝土材料的耐久性能呢? 一个显然的事实是, 与传统的力学性能相比, 耐久性能强调的是与时间相关的过程。因此, 在结构设计层面, 混凝土的耐久性能可认为是力学性能随时间退化的一种内在规律。

造成混凝土耐久性能退化的因素有许多种 (图 1.1)。对于钢筋混凝土结构而言, 化学因素对耐久性的影响尤为显著, 特别是钢筋锈蚀。无论是在一般的大气环境中, 还是在含有氯离子的海洋环境中, 钢筋均能够在混凝土碳化或者氯离子侵蚀的诱发因素下发生锈蚀。之后将出现混凝土开裂、结构承载能力下降等一系列严重的后果。除钢筋锈蚀外, 混凝土冻融、硫酸盐腐蚀、碱骨料反应等也是混凝土耐久性能退化的主要原因。

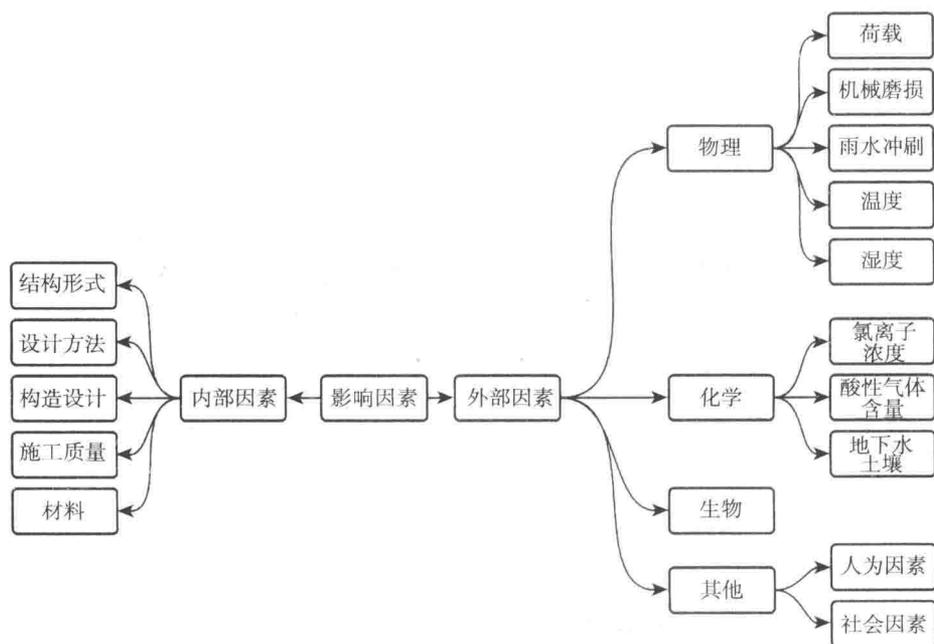


图 1.1 影响混凝土耐久性的主要因素

那么如何面对这些问题呢? 需要指出的是, 混凝土耐久性能退化所涉及的很多因素是无法避免的。例如, 碳化对于几乎所有的混凝土结构而言都是客观存在的。氯离子的侵蚀在氯盐环境 (多指沿海地区) 中总会发生。对于此类问题, 只能延缓这些因素的发展速度或者优化结构的设计方案, 保证这些因素在结构的寿命期

内不会对结构造成不可接受的破坏。因此,需要采用某种技术手段对混凝土耐久性退化具体过程做出预测和判断。

1.3 混凝土耐久性能的数值模拟

1.3.1 数值模拟的本质

为了预测混凝土耐久性能的退化过程,各国学者先后开展了大量关于混凝土耐久性能的试验研究,一方面揭示了混凝土耐久性的退化机理;另一方面也推动了新型混凝土材料的开发和应用。然而,混凝土耐久性能的试验研究存在两个方面的不足。

1. 试验费用昂贵

混凝土耐久性退化过程受外界环境条件影响很大。为了模拟真实环境,混凝土耐久性试验往往需要人工环境模拟设备的支持,这极大地增加了试验成本。此外,微观及更小尺度上的研究需要借助电子显微镜等高精密仪器。

2. 试验周期漫长

混凝土耐久性退化是一个十分缓慢的过程,自然暴露状态下的耐久性试验需持续数月甚至数年之久。尽管目前已经出现了很多加速试验方法,但加速试验中的耐久性退化机理与自然暴露条件下有明显不同,因此试验结果仅能作为横向比较的依据,并不能直接代表混凝土在真实环境下的耐久性退化过程。

与试验研究相对应的是数值模拟研究,具体来说就是采用数学物理方法描述混凝土耐久性退化这一自然现象,构建相应的数学模型。近些年来,特别是随着计算机的飞速发展,这方面的研究已经逐渐成为混凝土耐久性领域的研究热点。

数值模拟的本质和一般流程

数值模拟的本质是将某种自然现象抽象为数学物理方程,然后通过求解这个方程获得对该自然现象的认识和预测。例如,对于热量传递这一现象,可根据热量守恒这一定律建立热传导方程,通过求解方程就可以获得任意时刻的温度分布等信息。

可以看出,数值模拟的第一步是推导方程。通常,这些方程为(偏)微分方程(组),难以找到解析解。因此,第二步就是采用合适的数值方法去求解这些方程。在这一过程中,又出现了前处理、求解以及后处理三个子步。所谓前处理,是指为了采用某种数值方法而进行的准备工作。例如,如果采用有限单元法求解方程,那么首先需要对模型进行网格剖分,同时还要定义单元属性等。所谓后处理,是指根据实际需要,对求解所得到的直接结果进行再次处理的过程。在采用数值方

法求解方程后,通常能够得到大量的数据,但实际情况是我们往往只对一部分数据感兴趣,或者我们感兴趣的数据需要在原始数据的基础上再次分析、总结、归纳得到。

数值模拟几乎在所有的自然科学领域都有应用。一方面,它能够帮助我们更好地认识自然现象的本质;另一方面,通过数值模拟,可以对试验研究提供一些指导性的意见。

混凝土耐久性数值模拟涵盖了诸多内容,可以从层面 (level) 和尺度 (scale) 上进行分类。

1.3.2 在层面上的分类

混凝土耐久性数值模拟的研究可分为三个层面:①材料层面;②构件层面;③结构层面,如图 1.2 所示。材料层面的研究多注重混凝土自身性能的退化,而不考虑外荷载的作用,即不考虑受力状态对混凝土耐久性性能退化的影响。构件层面的研究则针对典型混凝土构件(梁、柱等)的典型受力状态,模拟其耐久性退化过程。该层面的研究与实际情况联系更为紧密。结构层面的研究则在构件层面的基础上,进一步考虑各构件之间的联系以及局部构造的特点。

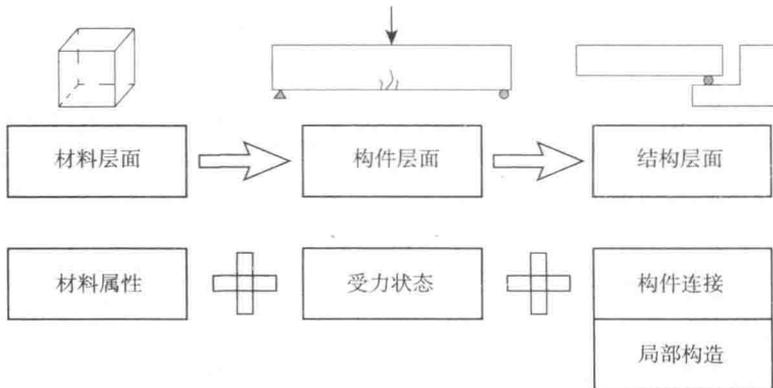


图 1.2 混凝土耐久性数值模拟研究三个层面的相互关系

1.3.3 在尺度上的分类

混凝土耐久性数值模拟的研究大致可分为三个尺度:①宏观尺度;②细观尺度;③微观尺度,如图 1.3 所示。在宏观尺度上,混凝土被视为一种均质材料。在细观尺度上,混凝土被视为由水泥浆与骨料组成的两相复合材料,或者是由水泥浆、骨料和界面层组成的三相复合材料。其中,水泥浆被视为一种均质材料。在微观尺度上,水泥浆可进一步分解为水泥颗粒、孔隙、水化产物等各相物质。

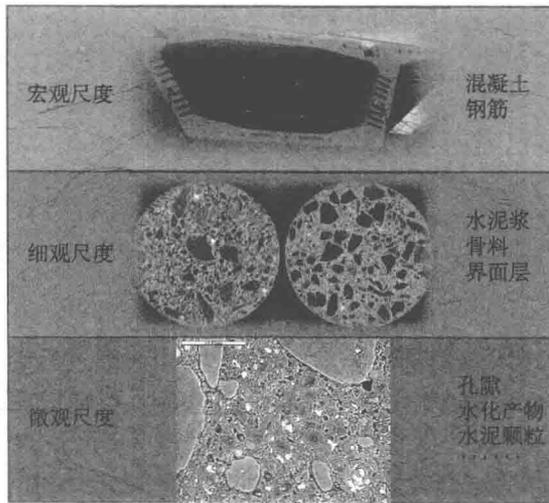


图 1.3 混凝土材料在不同尺度下的构成

需要指出的是，上述层面和尺度的分类是可以相互包含的，即材料层面的研究可分为宏观、细观和微观尺度；而宏观尺度的研究也可分为材料、构件和结构层面，如图 1.4 所示。目前绝大多数的混凝土耐久性数值模拟研究仍然集中于材料层面和宏观尺度。从 20 世纪 90 年代开始，细观尺度的研究也逐渐展开，但多应用于混凝土力学性能研究，耐久性方面的研究较少。

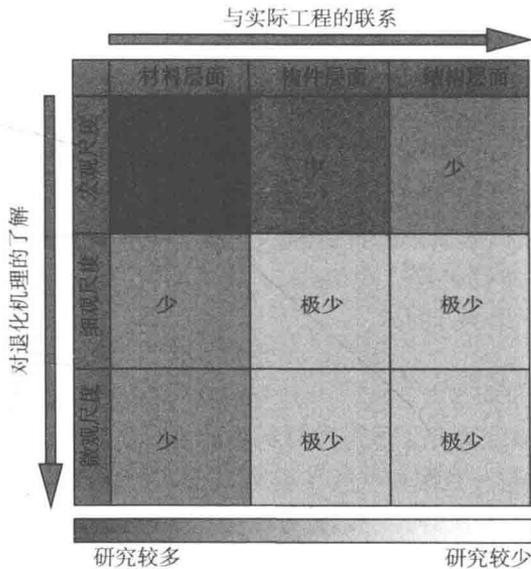


图 1.4 混凝土耐久性数值模拟的研究现状

在纯粹的数学意义上, 细观尺度上的数值模拟可以视为基本理论在细观模型上的重现。因此, 在宏观尺度上推导得到的数学物理方程同样适用于细观尺度。鉴于此, 在 1.4 节的文献综述中, 首先针对宏观尺度上的混凝土耐久性数值模拟研究进行阐述, 这些研究已经较为成熟。之后, 再简要介绍细观尺度上的研究现状。

1.4 水分传输过程数值模拟研究现状

水分的传输过程并不直接引起混凝土耐久性能的退化, 但混凝土内部的含水量会影响氯离子、二氧化碳等有害物质的传输过程, 并通过后者间接地影响混凝土的耐久性能。因此, 水分的传输过程在整个混凝土耐久性研究中占有十分基础的地位。

最早的关于水分传输过程的数值模拟研究现已无法考证。然而在 1972 年由 Bažant 和 Najjar 发表的一篇关于非饱和混凝土中的水分扩散过程的研究几乎成为了后续研究所遵循的公认标准 (Bažant and Najjar, 1972), 同时也被诸多设计规范所采纳。他们的主要贡献是摒弃了之前所广泛采用的线性水分扩散模型, 建立了水分扩散系数与相对湿度之间的函数关系, 从而提出了水分传输过程的非线性特性。这一研究成果被很多学者广泛认可和接受 (Conciatori et al., 2010; Kim and Lee, 1999; Li et al., 2008b, a; Martín-Pérez et al., 2001; West and Holmes, 2005)。

水分在混凝土的孔隙中以多种形式存在, 最典型的是气相和液相。两者在一定条件下可以相互转化并达到某种动态平衡。这一平衡关系被称为水分的 (解) 吸附曲线。针对这一问题的试验研究有很多。在数值模拟方面, 比较早的是 Quenard 和 Sallee 的研究工作, 他们采用网络模拟的方法研究了混凝土中的水分 (解) 吸附问题 (Quenard and Sallee, 1992)。研究结果一方面证实了 Bažant 等提出的水分非线性扩散模型; 另一方面也初步明确了水分 (解) 吸附曲线的非线性特性。

随着对水分传输机理认识的日益深入, 如今对水分传输过程的数值模拟研究已经日益完善, 但基本都是建立在 Bažant 等早期研究成果的基础上。近些年的研究方向主要包括以下几个方面。

1. 对水分传输机理的认识

沈春华 (2007) 系统研究了水泥基材料中的水分传输问题。内容涉及饱和液相传输、非饱和液相传输、非饱和气相传输等多个方面。研究中主要通过干湿杯法、水蒸气吸附法、切片称重法等传统试验方法揭示水泥基材料中的水分传输、水分吸附等现象的机理。此外, 沈春华还根据基元体积法 (representative element volume) 的思想 (图 1.5), 建立了以水饱和度和梯度为驱动力的非饱和水分传输模型。