

## 基于介观传输格构网络的混凝土冻融热湿耦合模型

张 力, 沈 雷, 张继勋, 董义佳, 徐 磊, NIZAR FAISAL ALKAYEM

(河海大学水利水电学院, 南京 210024)

**摘 要:** 寒区水工混凝土结构经历冻融循环而产生性能劣化, 但冻融损伤的力学主导机理并不明晰。采用考虑混凝土介观材料非均质性的传输格构网络空间离散化方法, 引入与温度相关的孔隙特性表征系数, 提出混凝土冻融循环热湿耦合模型, 实现均匀与非均匀温变条件下冻融过程中冰含量滞回现象模拟分析。在利用均匀温变冰含量试验与变形量试验验证了所提模型后, 针对非均匀温变冻融循环作用, 分析了温度、冰含量、相对湿度、孔隙压力、冻胀应变随冻融次数和冷端距离的变化规律。在水分结冰-融化的过程中, 孔隙内冰水混合物对固体骨架的力学作用呈现 2 个阶段。其一以流体压力为主, 采用广义有效应力原理计算孔隙压力荷载; 其二以固体应力为主, 采用多孔介质弹性力学理论计算冻胀变形, 作为非应力引起的应变作用于固体整体变形中。

**关键词:** 传输格构网络; 冻融循环; 冰含量; 孔隙压力; 冻胀应变

中图分类号: TV431 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2024)11-3372-11

网络出版时间: 2024-08-23



寒区水工混凝土结构经受冻融作用, 混凝土作为多孔介质, 涉水面混凝土孔隙内富含水分, 结冰时水分体积膨胀引起水分迁移形成孔隙压力<sup>[1-2]</sup>, 从而造成内部损伤, 导致混凝土性能劣化, 产生结构安全隐患。冻融循环过程中混凝土热湿耦合行为是探究损伤机理的重要环节, 中外学者根据混凝土内部不同孔隙的水结冰膨胀以及该过程中的热力学过程提出了多种冻融损伤机理学说, 但冻融损伤过程中的主导机理却并不明晰。静水压力理论和渗透压理论 2 种理论认为, 孔隙中溶液的迁移是导致混凝土冻融损伤的原因, 但是两者的迁移方向不同<sup>[3-4]</sup>。结晶压力理论提出冰水半球和圆柱形孔隙之间界面曲率的差异导致冰晶和孔隙壁之间的结晶压力, 当结晶压力超过强度极限时, 多孔材料会受到损伤<sup>[5]</sup>。微冰晶理论基于多孔固体中未冻水、冰和蒸汽三相状态稳定性判据, 揭示了混凝土在冻融循环中因大孔隙中冰晶的形成和凝胶孔隙中水的迁移, 导致加热膨胀、冷却收缩, 并在饱和度达到极限时因冰的膨胀而发生冻融损伤<sup>[6-7]</sup>。粘结剥落理论提出由于盐溶液形成的冰壳与混凝土表面间的复合机制, 以及

混凝土与冰的热膨胀系数差异, 导致低温下混凝土表面产生高张力, 促使混凝土表面产生裂缝<sup>[8]</sup>。多孔介质弹性力学理论考虑了混凝土作为一种多孔介质在冻融过程中的力学行为。该理论认为, 在冻融循环过程中, 混凝土内部的孔隙在冰晶形成和融化时会产生内部压力和变形, 会影响混凝土的力学性能和耐久性<sup>[9-11]</sup>。带电多孔介质中电解质的冻结理论则提出盐溶液中离子迁移产生高分离压力对混凝土造成损伤<sup>[12-13]</sup>。

静水压力理论和结晶压力理论均从流体的有效应力原理角度解释混凝土的冻融损伤, 而 Coussy 等<sup>[9]</sup>和 Gong 等<sup>[11]</sup>采用多孔介质弹性力学理论分析冻融损伤。总结上述研究认为, 在分析混凝土的冻融损伤时, 应该综合考虑固体应力效应的多孔介质弹性力学和流体广义有效应力原理的荷载贡献。通过精细分析冻融过程中孔隙压力和冰胀变形, 可进一步分析冻融损伤主导机理问题。但从断裂力学的角度, 文献[10-11]模型孔隙压力多大于 10 MPa, 基于广义有效应力原理耦合至固体骨架, 会引起混凝土碎裂破坏, 与试验观察不符。

收稿日期: 2024-04-22。 修订日期: 2024-06-25。

基金项目: 国家自然科学基金(52109159, 52250410359); 江苏省科协青年科技人才托举工程(TJ-2023-043)。

第一作者: 张 力(1999 ), 男, 硕士研究生。

通信作者: 沈 雷(1989 ), 男, 博士, 副教授。

Received date: 2024-04-22. Revised date: 2024-06-25.

First author: ZHANG Li (1999-), male, Master candidate.

E-mail: zhangli@qq.com

Correspondent author: SHEN Lei (1989-), male, Ph.D., Associate Professor.

E-mail: shenl@hhu.edu.cn

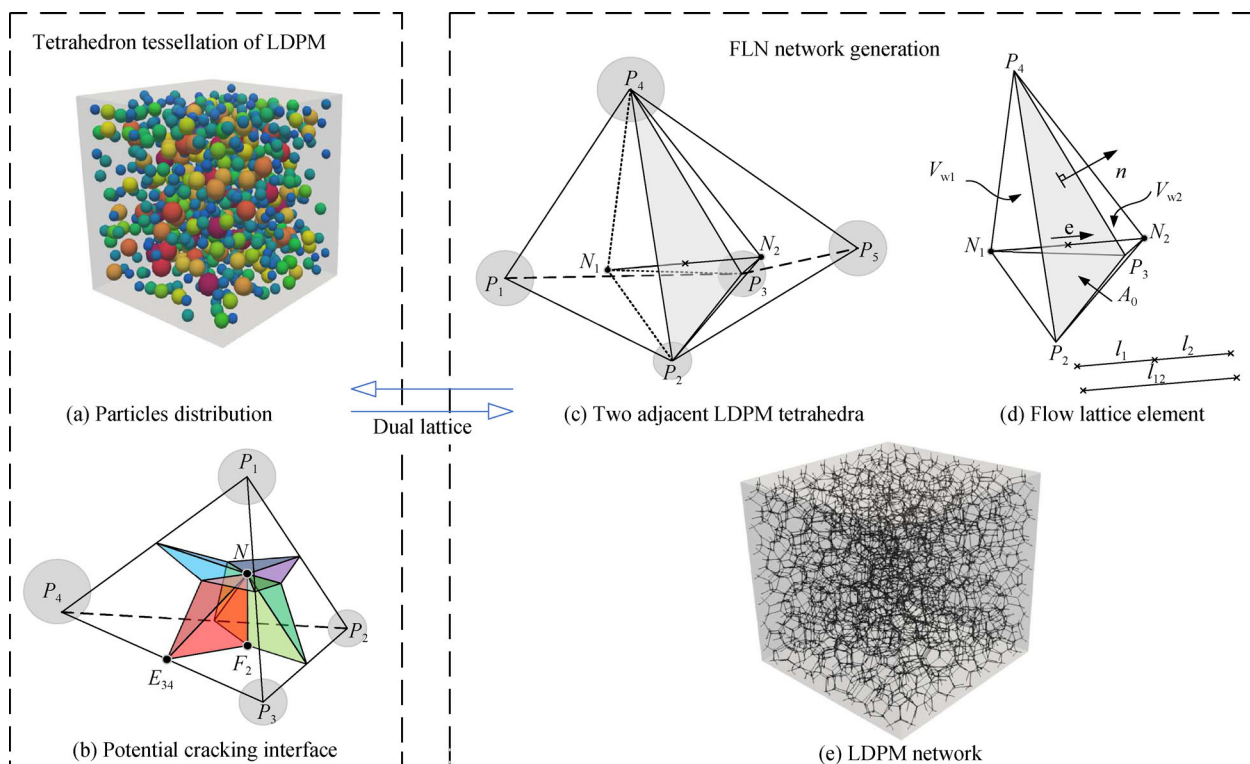
物质能量传输格构网络(FLN)是一种与混凝土介观离散力学模型<sup>[14]</sup>(LDPM)关联的考虑混凝土介观材料非均质性的离散物质和能量传输网络模型。一方面, FLN 能够更准确地捕捉到相邻单元之间的不连续性造成的细观裂纹和损伤分布, 能够再现材料不均匀性的关键特征。另一方面, FLN 能够大幅缩小多场耦合数值问题的计算规模<sup>[15]</sup>。FLN 可以描述复杂的多物理现象, 例如混凝土高温爆裂<sup>[16]</sup>、页岩裂缝渗流<sup>[17]</sup>等。

本工作采用考虑混凝土介观材料非均质性的物质能量传输格构网络(FLN)空间离散化方法, 结合多孔介质弹性力学理论框架, 对混凝土冻融过程进行数值模拟, 分析了引气混凝土在冻融循环作用下冰含量和孔隙压力的变化, 描述了混凝土应变的分布规律, 既能够验证 FLN 的可靠性, 也有利于促进混凝土冻融过程的研究。需要指出, 尽管非饱和混凝土的冻融过程由于空气的存在、初始饱和度的影响、充液孔隙的不连续性等因素而显得尤为复杂<sup>[18]</sup>, 但本工作的研究主要聚焦于饱和混凝土的冻融过程, 这些因素并不在本工作的研究范围之内。

## 1 混凝土介观离散力学模型及理论框架

### 1.1 混凝土介观离散化

LDPM 是一种在骨料尺度上模拟混凝土力学行为的介观尺度模型, 通过在混凝土体积内随机放置球形粒子来构建 LDPM 的介观尺度结构, 假设骨料近似为球形, 根据 Fuller 曲线分布和混凝土配合比参数, 确定骨料尺寸和数量。通过随机数生成器生成粒子位置, 将粒子中心逐个(从最大到最小)放置在试样的整个体积中, 不能重叠(见图 1a)。粒子放置后, 在球形粒子的中心以及表面粒子上进行 Delaunay 四面体化, 将混凝土体积离散为四面体单元, 以生成晶格系统。在每个 LDPM 四面体单元中, 依次定位边缘点  $E_{ij}$ 、面点  $F_k$ 、四面体中心点  $N$  并且连接形成小的三角形面“ $NE_{ij}F_k$ ”, 由于四面体有六条边, 每条边由 2 个面共享, 因此可以构造出 12 个三角形微平面(见图 1b), 也就是 LDPM 中的潜在开裂面, 称为“Facet”。将所有小面及其相关粒子结合起来, 形成了包含该粒子的多面体单元, 称为胞元“Cell”。



FLN is flow lattice network.

图 1 LDPM 示意图

Fig. 1 Lattice discrete particle model (LDPM) diagram

考虑 2 个相邻的 LDPM 四面体及其体中心点  $N_1$ 、 $N_2$ (见图 1c), 连接  $N_1$ 、 $N_2$  形成 1 个流动网络,

所有的流动网络即为 LDPM 网络(见图 1e)。连接的线段称为  $FLE_{12}$ ,  $FLE_{12}$  区域体积( $V_w$ )由 2 个四面体

组成,  $N_1$  侧、 $N_2$  侧体积分别为  $V_{w1}$ 、 $V_{w2}$ 。FLE<sub>12</sub> 的长度为  $l_{12}$ , 两侧长度  $l_1$ 、 $l_2$  由关系式  $l_i = g_i l_{12}$  确定,  $g_i$  为长度比例系数。 $\mathbf{n}$  为公共面  $P_2P_3P_4$  的单位法向量,  $\mathbf{e}$  为 FLE 从  $N_1$  到  $N_2$  的方向向量(见图 1d),  $\mathbf{n}$  和  $\mathbf{e}$  不一定平行。三角形截面  $P_2P_3P_4(A_0)$  在  $\mathbf{e}$  方向的投影面积定义为  $A_w = |\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}| A_0$ 。由此可计算  $V_w = V_{w1} + V_{w2} = A_w l_{12} / 3$ 。FLE 的特性可由相关四面体的形状和相对运动表征。每个 FLE 可以被视为跨越 2 个相邻 LDPM 体中心边界的通道, 且控制相邻四面体之间的物质传输和能量传递。

## 1.2 FLE 传质传热平衡方程

对于混凝土中水的质量和热量的传输问题, LDPM 四面体中心点“ $N_1$ ”和“ $N_2$ ”上的孔隙压力和温度表示 FLE<sub>12</sub> 域体积中的质量热力学状态, 通过 FLE<sub>12</sub> 的通量表示 2 个相邻的 LDPM 四面体之间的质量和热交换。对于每个 FLE<sub>12</sub> 域体积中的质量和热平衡方程可以写成:

$$\frac{d}{dt}(V_w W_w) = A_w \left( D_1 \frac{P_2 - P_1}{l_{12}} + D_2 \frac{T_2 - T_1}{l_{12}} \right) \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt}(V_w U_w) = A_w \left( D_3 \frac{P_2 - P_1}{l_{12}} + D_4 \frac{T_2 - T_1}{l_{12}} \right) \quad (2)$$

式中:  $t$  为时间;  $W_w$ 、 $U_w$  分别为单位体积水质量、单位体积水热含量;  $D_1$ 、 $D_2$ 、 $D_3$ 、 $D_4$  分别为菲克定律中的扩散系数、热量传导引起的物质扩散系数(Soret flux)、物质迁移引起的热量传导系数(Dufour flux)、Fourier 定律中的导热系数;  $P_i$ 、 $T_i$  分别为孔隙压力、温度( $i=1, 2$ )。

通过定义加权平均压力和温度,  $P = \sum_{i=1}^2 (g_i P_i)$ 、 $T = \sum_{i=1}^2 (g_i T_i)$ , 表示 FLE<sub>12</sub> 的整体状态, 且 FLE<sub>12</sub> 的控制方程为:

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{S} \quad (3)$$

式中:

$$\mathbf{M} = V_w \begin{pmatrix} g_1 C_1 & g_1 C_2 & 0 & 0 \\ g_1 C_3 & g_1 C_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_2 C_1 & g_2 C_2 \\ 0 & 0 & g_2 C_3 & g_2 C_4 \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$\mathbf{K} = \frac{A_w}{l_{12}} \begin{pmatrix} D_1 & D_2 & -D_1 & -D_2 \\ D_3 & D_4 & -D_3 & -D_4 \\ -D_1 & -D_2 & D_1 & D_2 \\ -D_3 & -D_4 & D_3 & D_4 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\mathbf{u} = [P_1 \ T_1 \ P_2 \ T_2]^T \quad (6)$$

$\mathbf{S}$  为源项, 这里不考虑混凝土的开裂行为,  $\mathbf{S}=0$ ;

$C_1 = \partial W_w / \partial P$ ;  $C_2 = \partial W_w / \partial T$ ;  $C_3 = \partial U_w / \partial P$ ;  $C_4 = \partial U_w / \partial T$ 。

1.2.1 临界孔隙半径 从热力学角度来看, 冰将从半径较大的孔隙中逐渐形成, 且当半径大于  $r_{eq}$  的孔隙才会冻结。当含水液体与固体表面接触时, 表面会形成一层吸附分子, 称为未冻结层厚度, 即使在很低的温度状态下, 仍然存在并且保持不冻结状态<sup>[19]</sup>。所以在一定温度( $T$ )和压力( $P$ )下不能形成冰的临界孔隙半径( $r_{cri}$ )为:

$$r_{cri} = r_{eq} + \delta(T) \quad (7)$$

式中:  $r_{eq}$  为液态水与冰的界面平衡半径, m, 利用热力学平衡<sup>[19-20]</sup>和 Young-Laplace law<sup>[21-22]</sup>进行计算;  $\delta(T)$  为混凝土孔隙未冻结层厚度<sup>[23]</sup>, m。  $r_{eq}$ 、 $r_{cri}$ 、 $\delta(T)$  之间的关系如图 2 所示<sup>[19]</sup>。  $\delta(T)$ 、 $r_{eq}$  分别通过式(8)、(9)计算:

$$\delta(T) = 1.97 |T|^{-\frac{1}{3}} \times 10^{-9} \quad (8)$$

$$r_{eq} = \frac{2\gamma_{l \leftrightarrow s} \chi_m(T)}{-\sum_{l \leftrightarrow s} (T - T_{l \leftrightarrow s}) + (\frac{\rho_s}{\rho_l} - 1)(\rho_l - P_{atm})} \quad (9)$$

式中:  $T$  为温度, °C;  $\gamma_{l \leftrightarrow s}$  为界面能;  $\Sigma_{l \leftrightarrow s}$  为熔化熵;  $T_{l \leftrightarrow s}$  为结冰点温度, 取 0 °C。  $\chi_m(T)$  表征孔隙结构对冰结核与融化速率的影响<sup>[24-25]</sup>, 由于冰形成附着于孔隙壁面和通道瓶颈, 因此温度显著影响液态水与冰的界面平衡半径<sup>[26]</sup>,  $\chi_m(T)$  通过式(10)计算:

$$\chi_m(T) = \frac{\chi_{min} - \chi_{max}}{T_{me}} \times T + \chi_{max} \quad (10)$$

式中:  $\chi_{max}$  和  $\chi_{min}$  为融化过程中温度为  $T_{me}$ 、0 °C 时的取值, 分别为 3.1、0.4;  $T_{me}$  为冰的融化温度, 近似为  $\lambda_p T_{min}$ ;  $\lambda_p$  为孔隙形状因子, 通常在 0.1~0.5 之间<sup>[27]</sup>;  $T_{min}$  是温度最低值。当  $T \geq T_{l \leftrightarrow s}$  时,  $r_{eq} = 0$ <sup>[10]</sup>。需要说明, 本工作未考虑结冰过程中的成核迟滞, 因为结冰过程考虑成核迟滞现象会引起冰含量的骤增<sup>[28]</sup>, 从而引起孔隙压力畸增, 导致计算结果不合理。

1.2.2 含水量、热容量 随着温度的变化, 混凝土中部分液态水发生了相变, 产生了固态水。因此, 混凝土中含水量为液态水质量与固态水质量之和, 热容由比热容和潜热组成, 分别通过下式计算:

$$\text{含水量: } W_w = w_l + w_s \quad (11)$$

$$\text{热容量: } U_w = U_l + U_s \quad (12)$$

式中:  $w_l$  为液态水质量, kg,  $w_l = n S_l \rho_l$ ;  $n$  为孔隙率, 根据孔隙累积体积分布进行确定(见图 3), 引气混凝土内孔隙累积体积( $r > 0$ )为 0.175, 即  $n = 0.175$ ;  $S_l$  为液态水饱和度;  $\rho_l$  为液态水密度;  $w_s$  为固态水质量, kg,  $w_s = \rho_s v_s$ ;  $\rho_s$  为固态水密度;  $v_s$  为单位混凝土的冰体积分数。根据  $v_s$  随温度以及孔径的变化(见

图 4),  $v_s$  随温度的降低先减后增, 随孔径的减小先增后减;  $U_l$  为液态水热量,  $J$ ,  $U_l = (\rho c)_{\text{con}} T$ ;  $(\rho c)_{\text{con}}$  为混凝土单位温度所需要的热量;  $U_s$  为固态水热量,  $J$ ,  $U_s = \Delta H \cdot w_s$ ,  $\Delta H$  为焓变。  $S_l$ 、 $v_s$ 、 $(\rho c)_{\text{con}}$  分别通过式(13)、(14)、(15)计算:

$$S_l = 1 - \frac{v_s}{n} \quad (13)$$

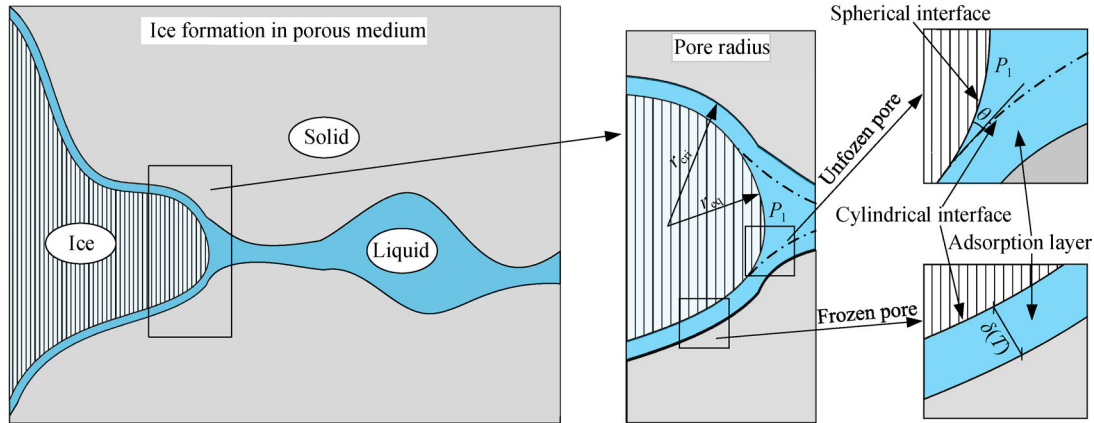
$$v_s = \varphi(r_{\text{cri}}) - v_{\text{abs}}(r_{\text{cri}}) \quad (14)$$

$$(\rho c)_{\text{con}} = [c_l S_l \rho + c_s (1 - S_l) \rho] n + \rho c_{\text{cs}} (1 - n) \quad (15)$$

式中:  $\rho$  为混凝土密度;  $c_s$  为固态水热容;  $c_l$  为液态水热容;  $c_{\text{cs}}$  为混凝土骨架热容;  $\varphi(r_{\text{cri}})$  为孔径大于  $r_{\text{cri}}$  的孔隙累积体积;  $v_{\text{abs}}(r_{\text{cri}})$  为孔径大于  $r_{\text{cri}}$  的圆柱孔中吸水的累积体积。  $\varphi(r_{\text{cri}})$ 、 $v_{\text{abs}}(r_{\text{cri}})$  分别通过式(16)、(17)计算:

$$\varphi(r_{\text{cri}}) = \int_{\lg(r_{\text{cri}})}^9 \phi(x) \cdot \frac{1}{x \cdot \ln 10} dx \quad (16)$$

$$v_{\text{abs}}(r_{\text{cri}}) = \int_{\lg(r_{\text{cri}})}^9 \frac{2\delta(T)}{x} \phi(x) \cdot \frac{1}{x \cdot \ln 10} dx \quad (17)$$



$r_{\text{cri}}$  is critical pore radius.  $r_{\text{eq}}$  is equilibrium pore radius.  $\delta(T)$  is adsorption layer thickness.  $P_l$  is liquid pressure in pore.

图 2  $r_{\text{cri}}$ 、 $r_{\text{eq}}$ 、 $\delta(T)$  之间的关系示意图

Fig. 2  $r_{\text{cri}}$ ,  $r_{\text{eq}}$ ,  $\delta(T)$  schematic diagram of the relationship between them

1.2.4 导热系数 由于混凝土内水分含量低, 比热贡献占比少, 因此水分迁移引起的热量可忽略不计, 即  $D_3=0$ 。导热行为可简化为 Fourier 定律, 即  $D_4$  为导热系数<sup>[32-33]</sup>:

$$D_4 = \lambda_{\text{con}} = \lambda_{\text{cs}} \frac{\lambda_{\text{cs}} + 2\lambda_{\text{pore}} + 2n(\lambda_{\text{pore}} - \lambda_{\text{cs}})}{\lambda_{\text{pore}} + \lambda_{\text{cs}} - 2n(\lambda_{\text{pore}} - \lambda_{\text{cs}})} \quad (20)$$

$$\lambda_{\text{pore}} = \lambda_l S_l + \lambda_s (1 - S_l) \quad (21)$$

式中:  $\lambda_{\text{con}}$  为混凝土导热系数;  $\lambda_{\text{pore}}$  为混凝土孔隙导热系数;  $\lambda_{\text{cs}}$  为混凝土骨架导热系数;  $\lambda_l$  为液态水导热系数;  $\lambda_s$  为固态水导热系数。

1.2.5 冻融循环中非应力引起的应变 采用 Coussy 等<sup>[9]</sup>的孔隙弹性理论, 计算混凝土的应变( $\epsilon$ ),

式中:  $\phi(x)$  为混凝土的孔径分布函数;  $x$  为代入分布函数的孔径, 单位为 mm。混凝土的孔径分布函数可根据压汞试验<sup>[29-31]</sup>确定, 本模型中给出参考计算方法:

$$\phi(r_{\text{cri}}) = \frac{a_1}{a_3} \times e^{-\left[\frac{\lg(\frac{r_{\text{cri}}}{a_2})}{a_3}\right]^2} + \frac{b_1}{b_3} \times e^{-\left[\frac{\lg(\frac{r_{\text{cri}}}{b_2})}{b_3}\right]^2} \quad (18)$$

式中:  $a_1=0.088$ 、 $a_2=1.820$ 、 $a_3=0.275$ , 控制普通混凝土孔径分布;  $b_1=0.012$ 、 $b_2=4.500$ 、 $b_3=0.100$ , 控制引气混凝土的气孔孔径分布。

1.2.3 渗透系数 冻融问题中温度梯度相对较小, 其引起的渗流量可忽略不计, 即  $D_2=0$ 。水在混凝土中的扩散过程简化为达西定律, 即  $D_1$  为渗透系数:

$$D_1 = \frac{\rho_l}{\mu_l(T)} k_{\text{re}} k_{\text{in}} = \frac{\rho_l}{\mu_l(T)} S_l^2 k_{\text{in}} \quad (19)$$

式中:  $\mu_l(T)=1.7299 \times 10^{-3} e^{-0.027T}$  为水动力粘度;  $k_{\text{re}}=S_l^2$  为相对渗透系数;  $k_{\text{in}}$  为绝对渗透系数。

主要是温度变形( $\epsilon_{\text{th}}$ )、水力效应( $\epsilon_{\Delta\rho}$ )、微观吸湿解湿过程变形( $\epsilon_{\Sigma m}$ )3 个方面的贡献。

$$\epsilon = \epsilon_{\text{th}} + \epsilon_{\Delta\rho} + \epsilon_{\Sigma m} \quad (22)$$

$$\epsilon_{\text{th}} = -3\alpha_s \Delta T - 3 \frac{nb_b M}{K + b_b^2 M} \cdot (S_c \alpha_c + S_l \alpha_l - \alpha_s) \Delta T \quad (23)$$

$$\epsilon_{\Delta\rho} = \frac{nb_b M}{K + b_b^2 M} \cdot S_c (1 - \frac{\rho_s}{\rho_l}) \quad (24)$$

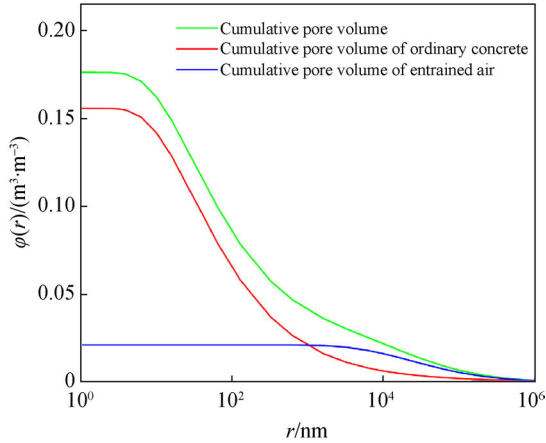
$$\epsilon_{\Sigma m} = \frac{nb_b M}{K + b_b^2 M} S_c S_l \cdot (\frac{1}{K_l} - \frac{1}{K_c}) \Sigma_m \Delta T \quad (25)$$

式中:  $\alpha_s$  为热体积膨胀系数;  $b_b$  为 Biot 系数,  $b_b=1-K/k_s$ ;  $K$  为多孔固体体积模量;  $k_s$  为固体基体体积模量;  $S_c$  为固态水饱和度,  $S_l+S_c=1$ ;  $\alpha_c$ 、 $\alpha_l$  为液态水、固态水热体积膨胀系数;  $\Delta T$  为温差,

$\Delta T = T_m - T$ ,  $T_m$  为初始温度。 $M$  定义为:

$$\frac{1}{M} = \frac{b_1 - nS_1}{k_s} + \frac{nS_1}{K_1} + \frac{b_c - nS_c}{k_s} + \frac{nS_c}{K_c} \quad (26)$$

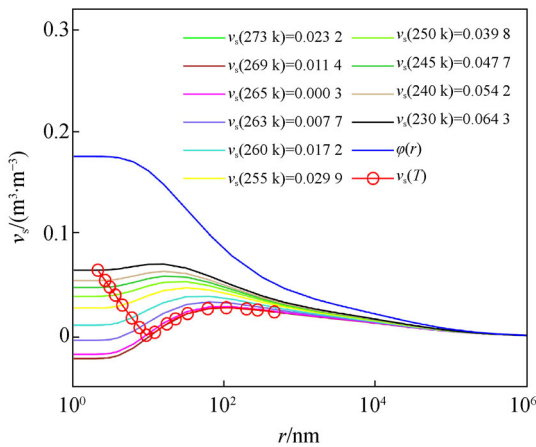
式中:  $K_c$ 、 $K_1$  为固态水、液态水体积模量。 $b_c$ 、 $b_1$  为固态水、液态水广义 Biot 系数,  $b_1 = b_b S_1$ ,  $b_c = b_b S_c$ 。



$\phi(r)$  is cumulative pore volume with pore radius greater than  $r$ .

图 3 累积孔径分布: 半径大于  $r$  的孔隙体积

Fig. 3 Cumulative pore size distribution: pore volume with radius greater than  $r$



$v_s$  is ice volume fraction per unit of concrete.

图 4 冰体积分随温度以及孔径变化示意图

Fig. 4 Schematic diagram of ice volume fraction with temperature and pore diameter

## 2 模型验证与分析

采用 ABAQUS 的 UEL 子程序实现所提冻融循环热-湿耦合模型计算。针对 Johannesson 等<sup>[34-35]</sup>混凝土冰含量以及相应的长度变化的测量试验, 开展冻融下引气混凝土内部温变和冰含量数值模拟, 从而验证所提模型的准确性。此外, 对均匀温度和非均匀温度分布冻融过程中混凝土内孔隙压力以及冻

胀应变规律开展数值研究, 分析冻融损伤主导机理。计算参数见表 1。

### 2.1 算例 1: 均匀温变

Johannesson 等<sup>[34-35]</sup>利用低温量热法测定了从 15 °C 缓速降温至 -55 °C 过程中混凝土的冰含量, 试验中混凝土试样是直径为 14 mm, 高度为 60 mm 的小圆柱体, 骨料粒径范围为 0~8 mm 的花岗岩骨料, 水灰比为 0.5, 水泥掺量为 480 kg/m<sup>3</sup>, 水掺量为 240 kg/m<sup>3</sup>, 含气量为 2%。为保证计算的精度和效率以及考虑到试验中样品是通过取芯得到, 即粗骨料不完整, 算例 1 数值试样离散化过程中, 取最小粒径为 1.5 mm, 最大粒径为 6 mm 的花岗岩骨料, 其他参数与试验一致, 如图 5a 所示。模拟过程中, 温度边界从 15 °C 降到 -55 °C, 再升到 15 °C, 为 1 个循环, 冷却和加热速率为 5.4 °C/h。初始孔隙压力设为 1 个大气压, 0.1 MPa。

如图 5b 温度云图所示, 混凝土内外温差变化一致, 说明数值模拟中混凝土处于均匀温变过程。在冻融循环过程中(见图 5c), 模型预测的试样相对冰含量(固态水质量与总水量质量的比值)在 0 °C 时开始增加, 相对冰含量增速先大后小, 在 -55 °C 时相对冰含量达到 0.42。其原因在于: 在 -20 °C (相对冰含量为 0.37) 以下, 混凝土孔隙内冰晶从多孔网络中的大孔逐渐渗透到小孔, 较小的孔隙需要更低的温度才能凝结冰晶, 所以随着温度的降低, 相对冰含量变化很小。随后由于考虑了冻融滞回, 相对冰含量并没有随着温度的升高而降低, 而直到温度升高到融化温度(-15 °C)才开始逐渐降低, 在 0 °C 处冰全部融化。上述模拟结果与试验结果吻合良好, 验证了模型的正确性和精确性。

图 5d~图 5f 分别分析了冻融循环过程中混凝土内(流体)孔隙压力变化、冰胀变形规律。循环过程中, 混凝土内冻结阶段孔隙压力峰值 5 MPa 出现于 4.4 h 和融化阶段孔隙抽吸压力峰值 9 MPa 出现于 21.5 h, 此时孔隙内液体压力引起的有效应力主导冻融损伤形成。相比于 Gong 等<sup>[11]</sup>工作的孔隙压力峰值 50 MPa, 本模型孔隙压力小于 10 MPa, 从断裂力学的角度更为合理。而在冻胀应变<sup>[9]</sup>演化过程中, 应变峰值出现于 13 h 处, 表明此时基于多孔介质弹性力学计算的冻胀应变是冻融损伤主导机理。可以看出, 在冻结阶段, 模型计算结果的变形总量和变形趋势均与 Johannesson 的冻融变形试验数据较为吻合, 而在融化阶段, 由于试验中有损伤(开裂应变), 模型计算结果并未与试验结果吻

合。另外, 图 5e~图 5f 分析了  $a_l$ 、 $a_c$  恒定 ( $a_l=-95.43\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ 、 $a_c=51.67\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ) 与  $a_l$ 、 $a_c$  随温度变化对应变的影响, 以及计算了与试验相比的相对误差((计算值-试验值)/试验值)。图 5e 中分别单独显示了  $\varepsilon_{th}$ 、 $\varepsilon_{\Delta\rho}$ 、 $\varepsilon_{\Sigma m}$  对于变形的贡献,  $\varepsilon_{th}$  表现为收缩变形, 可以看到, 改变  $a_l$ 、 $a_c$  的值对  $\varepsilon_{th}$  的贡献有所影响;  $\varepsilon_{\Delta\rho}$  贡献最大, 表现为膨胀变形, 与结冰量相关;  $\varepsilon_{\Sigma m}$  表现为膨胀变形, 与熔化熵有

关, 随着熔化熵的增加而消失。从图 5f 可以看出, 在冻结阶段温度大于冰点时, 由于模型没有捕捉到冰成核的滞后现象, 同时计算公式中变形试验值小, 引起了较大的相对误差, 在温度低于  $-10^\circ\text{C}$  后, 误差计算结果趋于 0, 而随着温度降低到  $-30^\circ\text{C}$  以下,  $a_l$ 、 $a_c$  随温度变化的误差计算结果将会随着温度的降低而增加, 可见  $a_l$ 、 $a_c$  恒定的计算结果与试验结果较为吻合。

表 1 计算参数  
Table 1 Calculation parameter

| Parameter/Symbol                                                    | Value                                                                                                              | Unit              |
|---------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------|
| Interface energy, $\gamma_{l\leftrightarrow s}$                     | $4.09\times 10^{-2}$                                                                                               | N/m               |
| Melting entropy, $\Sigma_{l\leftrightarrow s}$                      | 1.2                                                                                                                | MPa/K             |
| Concrete density, $\rho$                                            | 2 400                                                                                                              | kg/m <sup>3</sup> |
| Density of liquid water, $\rho_l$                                   | 998.4                                                                                                              | kg/m <sup>3</sup> |
| Density of solid water, $\rho_s$                                    | 917                                                                                                                | kg/m <sup>3</sup> |
| Enthalpy change, $\Delta H$                                         | -0.333                                                                                                             | J/kg              |
| Concrete skeleton heat capacity, $c_{cs}$                           | $1.0\times 10^3$                                                                                                   | J/(kg·°C)         |
| Liquid water heat capacity, $c_l$                                   | $4.2\times 10^3$                                                                                                   | J/(kg·°C)         |
| Solid water heat capacity, $c_s$                                    | $2.1\times 10^3$                                                                                                   | J/(kg·°C)         |
| Intrinsic permeability coefficient, $k_{in}$                        | $1.0\times 10^{-20}$                                                                                               | m <sup>2</sup>    |
| Concrete skeleton thermal conductivity, $\lambda_{cs}$              | 2.22                                                                                                               | W/(m·K)           |
| Liquid water thermal conductivity, $\lambda_l$                      | 0.59                                                                                                               | W/(m·K)           |
| Solid water thermal conductivity, $\lambda_s$                       | 2.22                                                                                                               | W/(m·K)           |
| Bulk modulus of the porous solid, $K$                               | $1.77\times 10^4$                                                                                                  | MPa               |
| bulk modulus of solid matrix, $k_s$                                 | $4.24\times 10^4$                                                                                                  | MPa               |
| bulk modulus of liquid water, $K_l$                                 | $1.79\times 10^3$                                                                                                  | MPa               |
| bulk modulus of solid water, $K_c$                                  | $7.81\times 10^3$                                                                                                  | MPa               |
| Thermal volumetric dilation coefficient, $\alpha_s$                 | $18\times 10^{-6}$                                                                                                 | K <sup>-1</sup>   |
| Thermal volumetric dilation coefficient of liquid water, $\alpha_l$ | $[(-9.2-2.07\Delta T)\times 10^{-5}]/3$                                                                            | K <sup>-1</sup>   |
| Thermal volumetric dilation coefficient of solid water, $\alpha_c$  | $(157.6\times 10^{-6}-0.5556\times 10^{-6}\Delta T+2.655\times 10^{-8}\Delta T^2-7.11\times 10^{-10}\Delta T^3)/3$ | K <sup>-1</sup>   |

## 2.2 算例 2: 非均匀温变

如图 6 所示, 试样是直径为 14 mm, 高为 200 mm 的圆柱体, 试样参数、骨料直径、温度冷却和加热速率、初始孔隙压力与算例 1 相同。考虑到实际冻融循环过程中材料内外温度梯度的周期性变化, 将算例 1 中的边界条件改为单侧温变, 一侧温度从  $15^\circ\text{C}$  降到  $-55^\circ\text{C}$ , 循环 4 次, 另一侧温度保持  $15^\circ\text{C}$  不变。

如图 7a~图 7b 所示, 在冻融循环过程中, 融化过程的温度、相对冰含量变化范围大于冻结过程。随着冻融次数增加, 温度、相对冰含量逐渐向温度

不变区域扩展, 并且在同一位置值上分别呈现出减小和增加的趋势。可以看到, 温度在数值上的变化并不显著, 但由于循环导致的孔隙冰残留, 导致冰含量和孔隙压力上升。

如图 8a 所示, 在冻融循环过程中, 冻结过程的孔隙压力比融化过程的孔隙压力大。随着冻融次数增加, 最大孔隙压力在增大, 并且向冷端迁移。相对冰含量沿深度方向单调减小, 由于冰阻塞孔隙, 渗透系数也随深度方向下降, 导致多次冻融循环后混凝土内部孔隙压力出现峰值, 而峰值位置则出现于水与冰水混合物的交界处(见图 8b)。

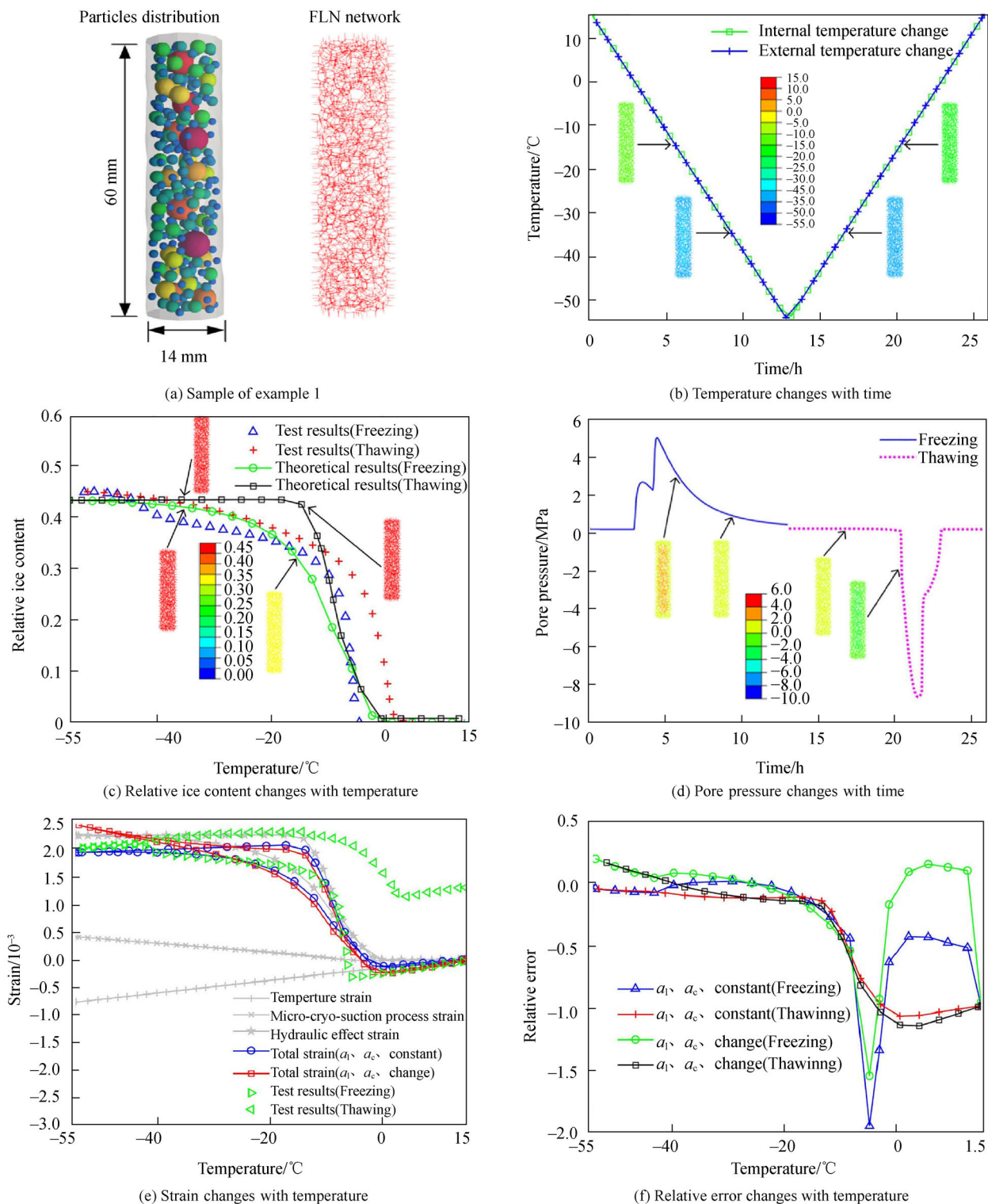


图5 均匀温变模拟结果

Fig. 5 Simulation results of uniform temperature change

如图 8b 所示, 在冻融循环过程中, 整体变形随着距离的增加先增后减再增, 呈现为膨胀状态。靠近温度变化侧, 整体变形随冻融次数的增加而增加; 而靠近温度不变侧, 整体变形随冻融次数的增加而减小。变形峰值与孔隙压力峰值交替出现, 这是因为冻

胀变形描述孔隙内固体(冰)引起的力学作用, 而孔隙压力描述的是孔隙内流体传输引起的力学作用, 因此在热湿力耦合模拟混凝土冻融损伤过程时, 应当综合考虑流体对固体骨架引起的有效应力以及多孔介质弹性力学计算的冻胀应变。

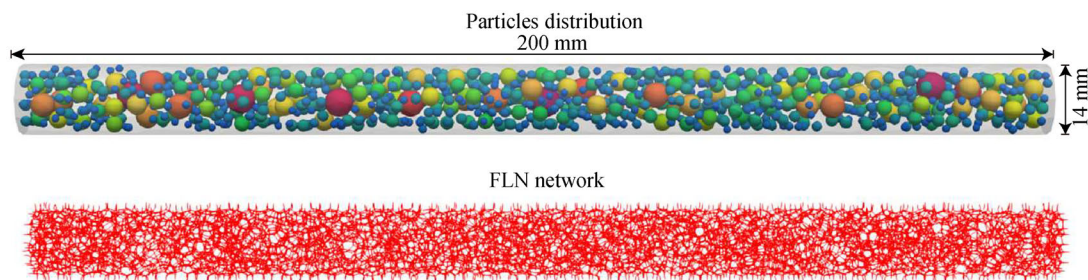
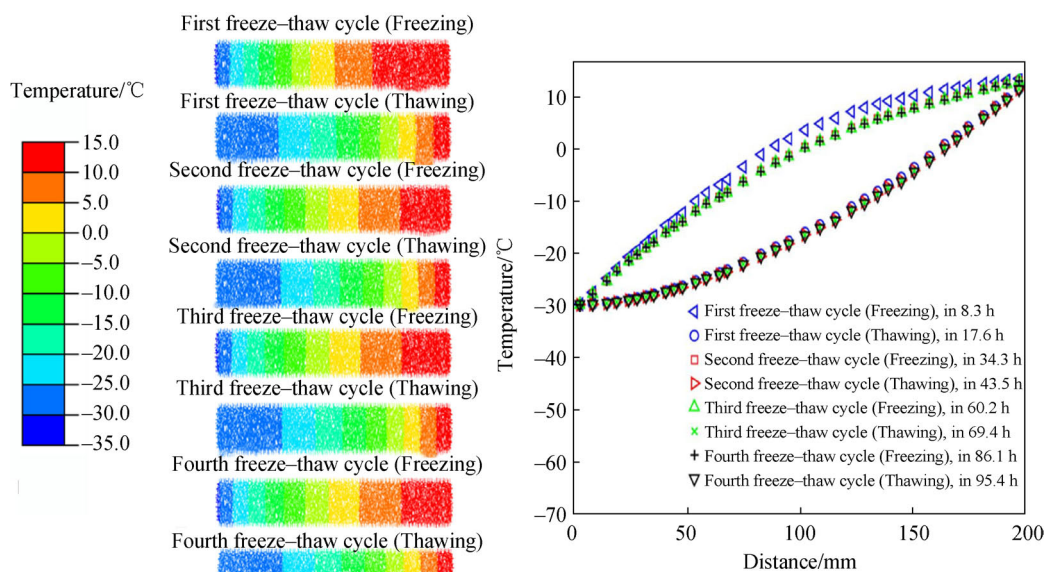
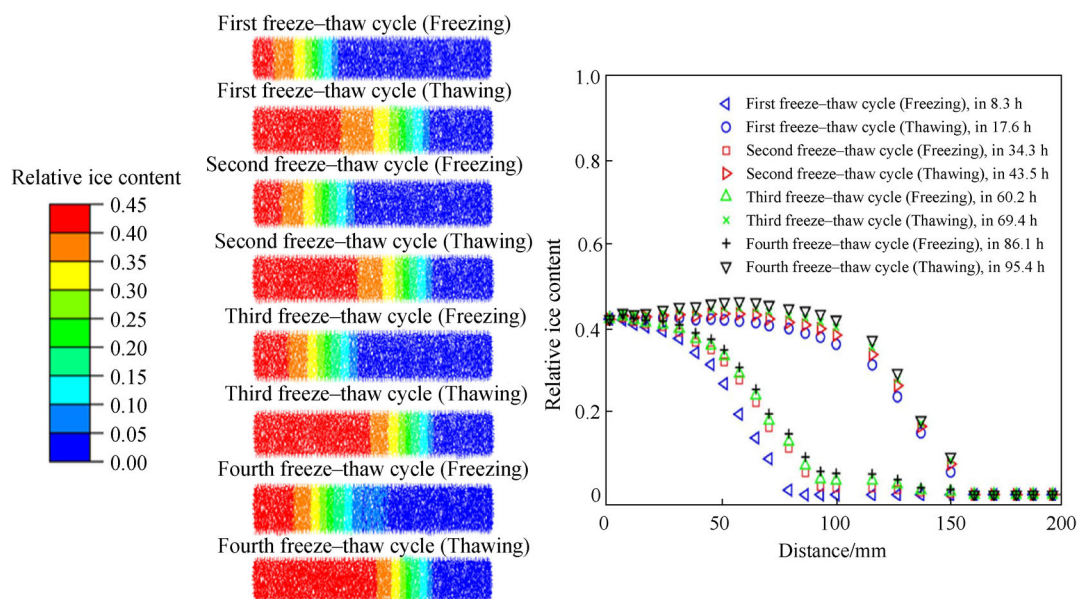


图 6 算例 2 试样

Fig. 6 Sample of example 2



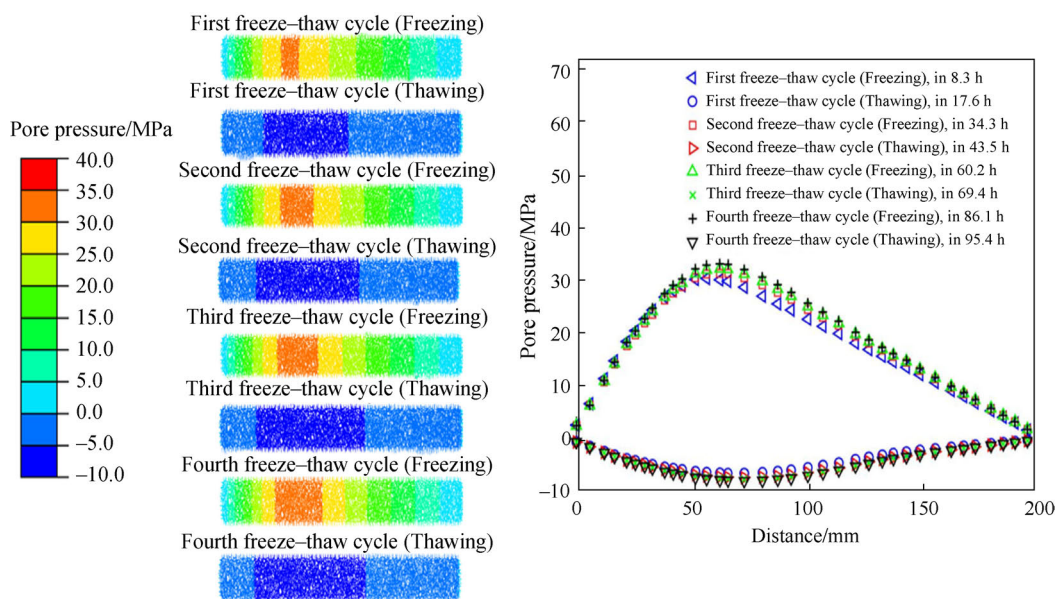
(a) Temperature changes with distance and number of freeze-thaw cycles



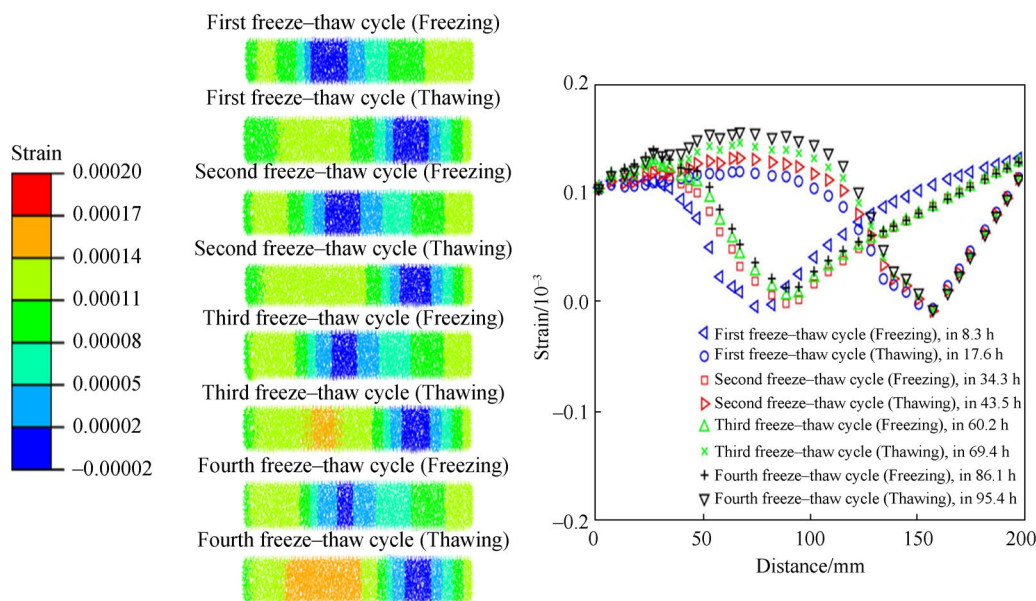
(b) Relative ice content changes with distance and number of freeze-thaw cycles

图 7 非均匀温变模拟结果(1)

Fig. 7 Simulation results (1) of non-uniform temperature change



(a) Pore pressure changes with distance and number of freeze-thaw cycles



(b) Strain changes with distance and number of freeze-thaw cycles

图 8 非均匀温变模拟结果(2)

Fig. 8 Simulation results (2) of non-uniform temperature change

### 3 结论

基于传输格构网络(FLN)空间离散化方法,提出了混凝土冻融循环热湿耦合模型,通过引入孔隙形状表征系数与温度演化关系,实现均匀与非均匀温变条件下冻融过程中冰含量滞回行为模拟。利用均匀温变冰含量实验与变形量试验对所提模型进行了验证,利用非均匀温变模拟分析了冻融循环下温度、冰含量、相对湿度、孔隙压力、冻胀应变随冻融次数和冷端距离的变化规律。结果表明,孔隙

压力和冻胀应变在冻融循环过程中呈现此消彼长的关系。孔隙压力的积聚与相对冰含量的增加直接关联,而此时孔隙压力对固体骨架的应力作用占据主导地位,即广义有效应力原理。随着冰含量增加,孔隙内饱和度减小,孔隙水的有效应力作用消失,冰胀变形对孔隙固体骨架作用占据主导地位,即多孔介质弹性力学理论。因此,在热湿力耦合模拟混凝土冻融损伤过程时,应当综合考虑流体对固体骨架引起的有效应力以及多孔介质弹性力学计算冻胀应变。

## 参考文献:

- [1] 慕儒, 田稳苓, 周明杰. 冻融循环条件下混凝土中的水分迁移[J]. 硅酸盐学报, 2010, 38(9): 1713–1717.  
MU Ru, TIAN Wenling, ZHOU Mingjie. J Chin Ceram Soc, 2010, 38(9): 1713–1717.
- [2] 邢秉元, 程鹏宇, 唐继朋, 等. 冻融循环作用下饱水砂浆孔结构的演变规律[J]. 硅酸盐学报, 2021, 49(2): 331–339.  
XING Bingyuan, CHENG Pengyu, TANG Jipeng, et al. J Chin Ceram Soc, 2021, 49(2): 331–339.
- [3] POWERS T C. Air requirement of frost-resistant concrete [J]. Highway Res Board Proc, 1950, 29: 184–211.
- [4] PICKETT G. Theory of volume changes in hardened port land-cement paste during freezing[J]. Highway Res Board Proc, 1953, 32(2): 285–297.
- [5] SCHERER G W, VALENZA J J. Mechanisms of frost damage [J]. J Am Ceram Soc, 2005, 7: 209–246.
- [6] SETZER M J. Micro-ice-lens formation in porous solid[J]. J Colloid Interface Sci, 2001, 243(1): 193–201.
- [7] SETZER M J. Micro ice lens formation, artificial saturation and damage during freeze thaw attack [M]. USA: Wiley, 2005.
- [8] VALENZA J J, SCHERER G W. Mechanisms of salt scaling[J]. Mater Struct, 2005, 38(4): 479–488.
- [9] COUSSY O, MONTEIRO P J M. Poroelastic model for concrete exposed to freezing temperatures[J]. Cem Concr Res, 2008, 38(1): 40–48.
- [10] ERIKSSON D, WAHLBOM D, MALM R, et al. Hygro-thermo-mechanical modeling of partially saturated air-entrained concrete containing dissolved salt and exposed to freeze-thaw cycles[J]. Cem Concr Res, 2021, 141: 106314.
- [11] GONG F Y, SICAT E, ZHANG D W, et al. Stress analysis for concrete materials under multiple freeze-thaw cycles[J]. J Adv Concr Technol, 2015, 13(3): 124–134.
- [12] ZHOU T, MIRZADEH M, PELLENQ R J, et al. Theory of freezing point depression in charged porous media[J]. Phys Rev E, 2021, 104(4–2): 045102.
- [13] ZHOU T T, MIRZADEH M, PELLENQ R J M, et al. Freezing point depression and freeze-thaw damage by nanofluidic salt trapping[J]. Phys Rev Fluids, 2020, 5(12): 124201.
- [14] CUSATIS G, PELESSONE D, MENCARELLI A. Lattice discrete particle model (LDPM) for failure behavior of concrete. I: Theory[J]. Cem Concr Compos, 2011, 33(9): 881–890.
- [15] YIN H, CIBELLI A, BROWN S A, et al. Flow lattice model for the simulation of chemistry dependent transport phenomena in cementitious materials[J]. Eur J Environ Civ Eng, 2024, 28(5): 1039–1063.
- [16] SHEN L, LI W X, ZHOU X W, et al. Multiphysics lattice discrete particle model for the simulation of concrete thermal spalling[J]. Cem Concr Compos, 2020, 106: 103457.
- [17] LI W X, ZHOU X W, CAREY J W, et al. Multiphysics lattice discrete particle modeling (M-LDPM) for the simulation of shale fracture permeability[J]. Rock Mech Rock Eng, 2018, 51(12): 3963–3981.
- [18] LIU L, QIN G, ZHOU Y, et al. Freezing behavior of unsaturated porous materials[J]. Constr Build Mater, 2021, 274: 122112.
- [19] ZUBER B, MARCHAND J. Predicting the volume instability of hydrated cement systems upon freezing using poro-mechanics and local phase equilibria[J]. Mater Struct, 2004, 37(4): 257–270.
- [20] ZUBER B, MARCHAND J. Modeling the deterioration of hydrated cement systems exposed to frost action[J]. Cem Concr Res, 2000, 30(12): 1929–1939.
- [21] COUSSY O. Poromechanics[M]. USA: Wiley, 2003.
- [22] COUSSY O. Poromechanics of freezing materials[J]. J Mech Phys Solids, 2005, 53(8): 1689–1718.
- [23] FAGERLUND G. Determination of pore-size distribution from freezing-point depression[J]. Matériaux Constr, 1973, 6(3): 215–225.
- [24] ZENG Q, FEN-CHONG T, LI K F. Elastic behavior of saturated porous materials under undrained freezing[J]. Acta Mech Sin, 2013, 29(6): 9.
- [25] 袁海峰, 陈惠芬. 冻融破坏下水泥基材料中裂缝连通行为的模拟 [J]. 东南大学学报(自然科学版), 2010, 40(S2): 126–132.  
YUAN Haifeng, CHEN Huisu. J Southeast Univ Nat Sci Ed, 2010, 40(S2): 126–132.
- [26] LI D, NIU D T, FU Q, et al. Fractal characteristics of pore structure of hybrid Basalt–Polypropylene fibre-reinforced concrete[J]. Cem Concr Compos, 2020, 109: 103555.
- [27] GONG F Y, JACOBSEN S. Modeling of water transport in highly saturated concrete with wet surface during freeze/thaw[J]. Cem Concr Res, 2019, 115: 294–307.
- [28] ZENG Q, FEN-CHONG T, DANGLA P, et al. A study of freezing behavior of cementitious materials by poromechanical approach[J]. Int J Solids Struct, 2011, 48(22/23): 3267–3273.
- [29] CHEN Y J, AL-NESHAWY F, PUNKKI J. Investigation on the effect of entrained air on pore structure in hardened concrete using MIP[J]. Constr Build Mater, 2021, 292: 123441.
- [30] GAWIN D, KONCA P, KONIORCZYK M, et al. Modeling the influence of micro-structure and permeability on water freezing in cementitious materials[C]//CONCREEP 10. Vienna, Austria. Reston, VA: American Society of Civil Engineers, 2015: 135479918.
- [31] LI K F, ZENG Q. Influence of freezing rate on cryo-damage of cementitious material[J]. J Zhejiang Univ Sci A, 2009, 10(1): 17–21.
- [32] 任青文, 沈雷, 孙立国, 等. 开裂混凝土有效导热系数的细观数值研究[J]. 水利学报, 2015, 46(8): 892–899.  
REN Qingwen, SHEN Lei, SUN Liguang, et al. J Hydraul Eng, 2015, 46(8): 892–899.
- [33] 沈雷, 任青文, 张林飞, 等. 开裂混凝土有效导热系数研究: 三维模拟与试验验证[J]. 水利学报, 2017, 48(6): 689–701.  
SHEN Lei, REN Qingwen, ZHANG Linfei, et al. J Hydraul Eng, 2017, 48(6): 689–701.
- [34] JOHANNESSON B. Dimensional and ice content changes of hardened concrete at different freezing and thawing temperatures[J]. Cem Concr Compos, 2010, 32(1): 73–83.
- [35] WU M, JOHANNESSON B, GEIKER M. Determination of ice content in hardened concrete by low-temperature calorimetry[J]. J Therm Anal Calorim, 2014, 115(2): 1335–1351.

## Thermo-Hydro Coupled Model of Concrete Under Freeze–Thaw Cycles Based on Mesoscopic Flow Lattice Network

ZHANG Li, SHEN Lei, ZHANG Jixun, DONG Yijia, XU Lei, NIZAR FAISAL ALKAYEM

(College of Hydraulic Conservation and Hydropower Engineering, Hohai University, Nanjing 210024, China)

### Extended Abstract

**Introduction** In cold regions, concrete is widely used as a material in hydraulic structures. Its durability is crucial for ensuring the stability of concrete structures over service life. As a porous medium, concrete undergoes freeze–thaw cycles where the water in the pores freezes and expands, causing water migration and pore pressure. This phenomenon results in internal structural damage and thus degradation of concrete performance. Therefore, it is important to analyze the relationship between temperature, humidity, and pore pressure of concrete during the freeze–thaw cycles. Scholars have proposed various mechanism theories, and a general knowledge is given that the thermo–hydro coupled behavior of concrete imposes the major machinal loads inducing the freeze–thaw damage. But the dominant mechanism is still not clear. The hydrostatic pressure theory and the crystallization pressure theory explain the freeze–thaw damage of concrete from the perspective of the effective stress principle of fluids. The theory of poroelasticity explains the freeze–thaw damage of concrete from the perspective of internal pressure and deformation generated by the pores inside the concrete during the formation and thawing of ice crystals. Hence, it is believed that an additional attention should be paid to the combined mechanical effect of solid phase expansion and the load contribution of the fluid phase. By conducting a detailed analysis of pore pressure and ice expansion deformation during the freeze–thaw process, the dominant mechanism of freeze–thaw damage can be further analyzed.

**Methods** The spatial discretization method of flow lattice network (FLN) considering the concrete mesoscopic heterogeneity is adopted to describe the heat transfer and mass transport behavior. Within the framework of FLN, a thermo–hydro coupled model for concrete during the freeze–thaw cycles is proposed and its mechanical mechanism are discussed based on the poroelasticity and effective stress principle. The proposed model implemented into UEL subroutine and solved by standard/implicit solver in ABAQUS. The proposed model is used to simulate the freeze–thaw process of concrete under uniform and non-uniform temperature change.

**Results and discussion** Firstly, the numerical simulations of concrete under freeze–thaw conditions are conducted based on existing concrete ice content and the corresponding deformation experiments. As the temperature decreases, the relative ice content predicted by the model begins to increase at 0 °C, and the ice crystallization first increases and then decreases. At –55 °C, the relative ice content reaches 0.42. Subsequently, due to the consideration of freeze–thaw hysteresis, the relative ice content does not decrease with the increase in temperature, but starts to gradually decrease only when the temperature rises to the melting temperature (–15 °C). The ice completely thawed at 0 °C, which is in good agreement with the experimental results. In the simulation with constant and temperature-dependent thermal expansion coefficient, the total deformation and deformation trend calculated by the freezing stage model are in good agreement with the freeze–thaw deformation test data. However, during the thawing stage, due to the damage (cracking strain) in the experimental, the model calculation results do not match the experimental results. The strain of  $\varepsilon_{\Sigma m}$  and  $\varepsilon_{\Delta p}$  show expansion, and  $\varepsilon_{th}$  shows contraction deformation.  $\varepsilon_{\Delta p}$  dominates the over deformation. Additionally, through the calculation of relative errors in deformation, it can be observed that the calculation results with constant  $a_i$  and  $a_c$  keep relatively consistent with the experimental results. During the cycling process, the peak pore pressure of 5 MPa during the freezing stage of concrete appears at 4.4 hours, and the peak pore suction pressure of 9 MPa during the thawing stage appears at 21.5 h. In the evolution of frost heave strain, the peak strain appears at 13 h.

In the simulation of non-uniform temperature distribution, the variation depth of relative ice content gradually expands towards the temperature invariant region as the number of freeze–thaw cycles increases. The peak value also increases with the pore pressure expands towards the rear side. In addition, the peak deformation occurs alternately with the peak pore pressure. During the process of water freezing and thawing, the mechanical loads of the ice–water mixture in pores on the solid skeleton presents two stages. The first stage is dominated by fluid pressure and is computed by the principle of generalized effective stress. The second stage is ice crystallization induced expansion computed by the poroelasticity.

**Conclusions** A thermo–hydro coupled model for concrete during the freeze–thaw cycles is proposed within the framework of FLN. The numerical results of relative ice content and the corresponding deformation are in good agreement with the experimental results, which verifies the accuracy of the proposed model. The consideration of the temperature-dependent mathematical pore distribution in the calculation of ice content can simulate the hysteresis of ice content during freezing and thawing. It is numerically found that the pore pressure and frost heave strain play the rotatory dominant role during the freeze–thaw cycle. One stage is dominated by fluid pressure and another stage is dominated by ice crystallization induced expansion computed. The effective stress caused by the pore fluid and the calculation of frost heave strain are comprehensively considered.

**Keywords** flow lattice network; freeze–thaw cycles; ice content; pore pressure; frost heave strain