

考虑材料非均质与初始微孔洞的地聚物混凝土力学性能数值模拟

林俊华¹, 左义兵¹, 郑志善², 甘屹东¹

(1. 华中科技大学土木与水利工程学院, 武汉 430074; 2. 武汉市政工程设计研究院有限责任公司, 武汉 430023)

摘 要: 地聚物混凝土化学组成复杂, 力学性能影响因素较多, 为探究不同条件下其力学性能变化规律, 利用数值模拟进行研究。在构建非均质细观模型上假定混凝土由骨料、砂浆、混凝土界面过渡区三相组成, 材料属性服从 Weibull 分布, 并采用等效单元拟合求解非均质参数; 通过多尺度建模, 提出采用折减系数表征初始微孔洞对材料力学性能的影响; 采用模拟正交法反推求解砂浆单元的力学性能参数。为验证非均质细观模型, 进行了地聚物混凝土力学性能试验。基于验证后的非均质细观模型, 进一步探讨了试件尺寸、骨料体积分、初始微孔洞率等因素对地聚物混凝土力学性能的影响。结果表明: 三维细观模型能准确描述地聚物混凝土的力学性能, 所提出的模型构建和参数确定方法具有可靠性, 对于模拟研究地聚物混凝土力学性能具有指导意义。

关键词: 地聚物混凝土; 力学性能; 数值模拟; 非均质模型; 初始缺陷
中图分类号: TU526 **文献标志码:** A **文章编号:** 0454-5648(2025)01-0071-13
网络出版时间: 2024-11-20



地聚物是由富含硅铝酸盐的前驱体材料(如矿渣、粉煤灰等), 在碱性环境下反应形成的一种绿色胶凝材料^[1]。相比于普通硅酸盐水泥, 地聚物具有更优异的力学性能^[2-4]、耐久性^[5]和耐高温性能^[6]。然而, 地聚物原材料多样、反应过程复杂, 导致其力学性能的影响因素较多, 难以进行准确的控制和预测。

随着计算机科学技术的发展, 数值模拟成为研究混凝土力学性能的有效方法, 各国学者通过建立数值模型对普通混凝土力学性能进行了一系列研究^[7-11]。然而, 地聚物混凝土力学性能研究大多停留在试验层面, 较少使用数值模拟方法进行研究。尽管已有较多研究普通混凝土力学性能的数值模型, 但地聚物混凝土与普通混凝土在砂浆基质和混凝土界面过渡区(ITZ)物化性质及其本构模型方面存在显著差异, 导致无法直接套用现有模型进行研究。

在混凝土细观尺度的数值模拟研究中, 一般将混凝土视作由均质的粗骨料、砂浆、ITZ 三相组成^[12]。但这种简化忽略了混凝土内部的随机性, 实际混凝土中骨料与砂浆基质具有较强的非均质性。大部分学者假定混凝土材料力学性能分布服从 Weibull 分布^[13-15],

但目前关于各相材料的非均质参数选取并不统一。

除了砂浆基质自身的非均质性, 硬化混凝土内部还存在搅拌过程中引入的微孔和缺陷^[16], 多尺度下的缺陷导致其具有复杂的力学性能, 并且对弹性模量和强度具有较大的影响^[17-18]。目前部分学者通过在模型中直接建模孔洞来模拟初始缺陷^[15, 19-23], 但实际混凝土中大部分缺陷属于微观尺度, 难以在细观尺度模型中直接体现。

为此, 本工作构建了地聚物混凝土三维细观模型, 通过等效单元法拟合求解非均质参数, 基于多尺度建模, 考虑初始微孔洞缺陷对材料力学性能的影响, 提出模拟正交法反推求解地聚物砂浆的力学参数。基于试验验证后的非均质细观模型, 研究了粗骨料含量、试件尺寸和微孔洞率等因素对地聚物混凝土力学性能的影响。

1 实验

1.1 试件制备

采用矿渣与粉煤灰制备地聚物混凝土。所用激发剂为 NaOH 与水玻璃。其中: NaOH 为 99%纯度

收稿日期: 2024-05-09。 修订日期: 2024-07-25。

基金项目: 国家重点研发计划(2023YFC3902802); 湖北省自然科学基金(2022CFB048, 2024AFB562)。

第一作者: 林俊华(2000—), 男, 硕士研究生。

通信作者: 左义兵(1986—), 男, 博士, 讲师。

Received date: 2024-05-09. Revised date: 2024-07-25.

First author: LIN Junhua (2000—), male, Master candidate.

E-mail: 506855826@qq.com

Correspondent author: ZUO Yibing (1986—), male, Ph.D., Lecturer.

E-mail: zuoyibing@hust.edu.cn

粉末状固体；水玻璃为含有 13.5% (质量分数，下同) Na_2O 、30% SiO_2 和 56.5% H_2O 的硅酸钠溶液。所用粗骨料为连续级配碎石，粒径范围为 5~20 mm；所用细骨料为标准砂，细度模数为 2.5。

为验证模型的准确性，制备试件尺寸为 $150\text{ mm} \times 150\text{ mm} \times 150\text{ mm}$ 的地聚物混凝土进行抗压试验，配比如表 1 所示。其中，碱当量(Na_2O 与前驱体质量百分比)为 4%，水胶比为 0.50，碱溶液模数($\text{SiO}_2/\text{Na}_2\text{O}$)为 1.2。为获取模型中砂浆相力学性能参数，设计地聚物砂浆试验，配比与混凝土中砂浆相组成保持一致，试件尺寸为 $40\text{ mm} \times 40\text{ mm} \times 160\text{ mm}$ 。

表 1 地聚物混凝土配比
Table 1 Mix proportion of geopolymer concrete

kg/m ³						
Slag	Fly ash	NaOH	Waterglass	Fine aggregate	Coarse aggregate	Water
200	200	9.86	61.94	666	1134	165.01

地聚物混凝土和砂浆浇筑后，采用保鲜膜密封，放入养护室进行养护，养护室温度为 $(20 \pm 1)^\circ\text{C}$ ，相对湿度为 95%，养护龄期为 28 d。

1.2 试验方法

参照罗甜恬^[24]工作与 GB/T 50081—2019《混凝土物理力学性能试验方法标准》进行轴心抗压强度试验与弹性模量试验。地聚物混凝土立方体抗压试验在济南试金集团的 TYE-2000E 型压力试验机上完成，加载速率为 0.5 MPa/s。地聚物砂浆试件提前 1 d 取出并粘贴应变片，继续养护 1 d 后在无锡建仪仪器机械有限公司的 WDW-100 型电子万能试验机进行试验，为消除加载速率对力学性能的影响，加载速率均为 0.5 mm/min。

2 细观模型的建立

为充分体现混凝土材料内部各组分的非均质性，采用 MPIA 流程构建随机骨料模型^[25]，主要包括网格(Mesh)—放置(Placement)—识别(Identification)—分配(Assignment)。

2.1 背景网格法

在放置粗骨料前预先划分规则的有限元网格单元，网格单元尺寸需综合考虑计算精度与计算效率，不同尺寸模型的网格单元尺寸需保持一致。考虑后续模拟分析对于网格质量要求较高，模型内单元尺寸保持一致，易于后续迭代分析^[25]。划分网格单元尺寸为 1 mm。

2.2 骨料放置

2.2.1 骨料级配 为了与试验保持一致，内部粗

骨料采用碎石，体积分数为 40%，骨料粒径范围分别为 5~10 mm、10~15 mm、15~20 mm。为获得更佳的密实度与力学性能，试验与模拟中骨料级配均采用富勒级配^[26]，如式(1)所示：

$$P(d) = 100 \left(\frac{d}{d_{\max}} \right)^n \quad (1)$$

其中： $P(d)$ 为通过直径为 d 筛孔的骨料质量分数； $d_{\max}$ 为最大骨料粒径； d 为筛孔直径； n 为经验参数，取值为 0.45~0.70 (本工作采用 0.5)^[27]。

2.2.2 骨料生成与放置 为了更准确描述混凝土的力学性能与破坏形态，采用几何多面体模拟碎石骨料，骨料顶点数量选取 15~25 个较为合理^[28–30]。粒径范围为 $[d_i, d_{i+1}]$ 的骨料，其顶点 (x_i, y_i, z_i) 根据式(2)~式(3)进行随机选取。

$$\begin{cases} \theta_i = \eta \times 2\pi \\ \phi_i = \xi \times 2\pi \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{cases} x_i = r \times \sin \phi_i \times \cos \theta_i \\ y_i = r \times \sin \phi_i \times \sin \theta_i \\ z_i = r \times \cos \phi_i \end{cases} \quad (3)$$

选定顶点后根据几何拓扑关系确定骨料形状，使用 Delaunay 三角剖分技术与凸包算法确定，所生成骨料如图 1a 所示。生成粗骨料后，通过对其形心位置的控制进行骨料的放置，放置过程中需避免骨料之间重叠，最终生成细观模型如图 1b 所示。采用状态矩阵法^[25]进行骨料顶点与已放置骨料之间位置关系的判定，相比于常用的体积法，计算效率提高了 90%。

2.3 各相材料识别

粗骨料放置结束后，根据单元与骨料的位置关系，将各单元分别识别为骨料单元、砂浆单元以及 ITZ 单元。传统识别方法是通过判断单元顶点与骨料的位置关系进行判定：1) 当单元节点都位于同一骨料内部时，识别该单元为骨料单元；2) 当单元节点都位于骨料外部时，识别该单元为砂浆单元；3) 其余情况识别为 ITZ 单元。但这会导致骨料单元体积分数偏小，而 ITZ 单元体积分数偏大。为此，提出一种新的识别方法，识别过程如下：

1) 识别骨料和砂浆单元：判断单元质心与骨料的位置关系，若质心位于骨料内或骨料上则识别为骨料单元；若质心位于骨料外则识别为砂浆单元；

2) 识别邻单元：将已识别为 i 骨料单元的集合记为 E_i ，提取 E_i 里所有单元的邻单元进行下一步判定。(与单元面接触或点接触皆识别为邻单元，一个单元共有 26 个邻单元)。

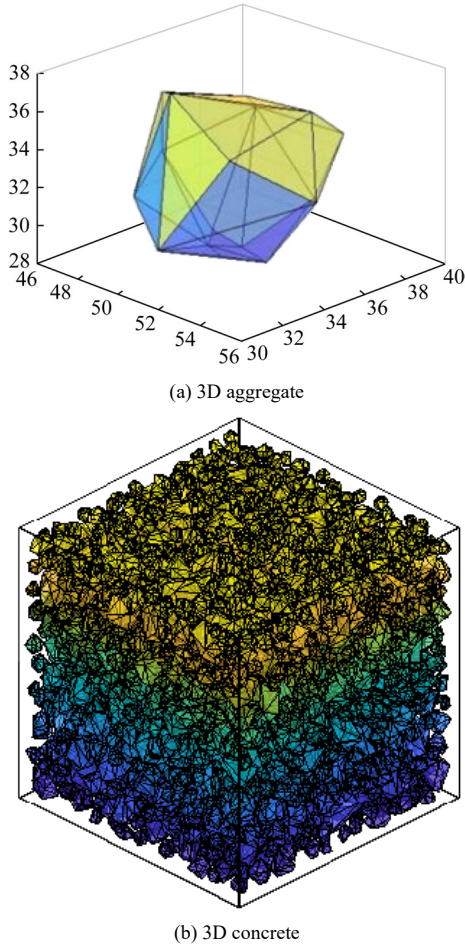


图 1 三维骨料及三维混凝土模型
Fig. 1 3D aggregate and 3D concrete model

3) 识别 ITZ 单元: 对 E_i 的邻单元进行识别, 若某个邻单元识别为 i 骨料单元或 ITZ 单元, 则单元属性不发生改变; 若识别为砂浆单元或其余骨料的骨料单元, 则变更单元属性为 ITZ 单元。

对于粗骨料体积分数为 40% 的细观模型, 采用新的识别方法, 骨料单元体积分数为 37.1%, 比传统识别方法提升了 4.8%, 更接近预设值。

2.4 非均质参数确定

混凝土作为一种非均质材料, 内部各相材料力学性能服从 Weibull 分布^[31-32], 其分布函数为:

$$F(x) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{x - x_0}{\beta} \right)^m \right] \quad (4)$$

其概率密度函数为:

$$f(x) = \frac{m}{\beta} \left(\frac{x - x_0}{\beta} \right)^{m-1} \exp \left[- \left(\frac{x - x_0}{\beta} \right)^m \right] \quad (5)$$

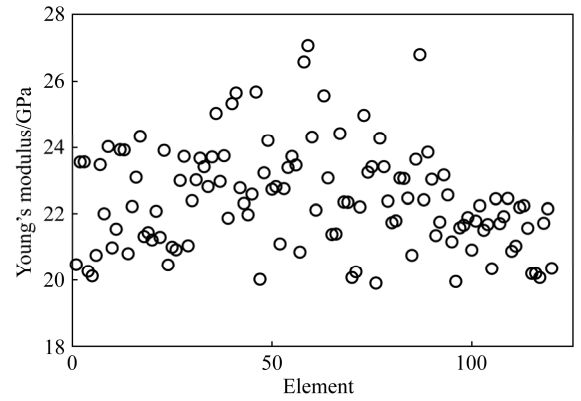
其中: $f(x)$ 表示满足该分布的各项力学参数(如弹性模量、强度等); m 为形状参数, 定义概率密度函数的形状, 也作为非均质参数表示材料均质程度; β

为尺度参数; x_0 为位置参数, 当 $x_0=0$ 时公式为双参数 Weibull 概率密度分布函数。

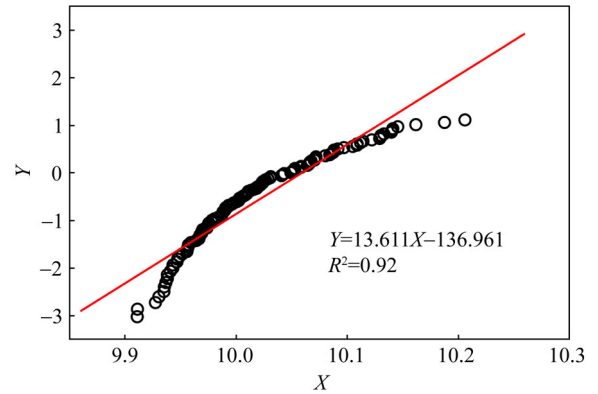
地聚物砂浆模型内部细骨料采用球形砂砾; 进行单元划分后, 根据 Voigt 并联模型求得特征单元的等效弹性模量 E^* [式(6)], 等效单元弹性模量分布情况如图 2a 所示。

$$E^* = C_{\text{sand}} E_{\text{sand}} + C_{\text{paste}} E_{\text{paste}} \quad (6)$$

式中: E^* 为等效弹性模量; C_{sand} 和 C_{paste} 分别为细骨料和净浆体积分数, 此模型细骨料体积分数为 52%, 其余为净浆; E_{sand} 和 E_{paste} 分别为细骨料和净浆弹性模量, 分别取值为 34.5 GPa 和 12.8 GPa^[24]。



(a) Elastic modulus distribution of equivalent unit



(b) Weibull parameter fitting

图 2 等效单元弹性模量分布及 Weibull 参数拟合
Fig. 2 Elastic modulus distribution of equivalent unit and parameter fitting via Weibull

对各特征单元的等效弹性模量进行概率分布分析, 其概率分布满足式(7):

$$F(x) = \frac{(n-0.5)}{N} \quad (7)$$

其中: N 为总样本数量; n 为第 n 个样本数量, $n \leq N$ 。对于双参数 Weibull 概率分布函数, 可通过式(8)和(9)求得形状参数 m 与尺度参数 β , 其中形状参数即可用于描述材料的非均质性。

$$F(x) = 1 - \exp \left[- \left(\frac{x}{\beta} \right)^m \right] \quad (8)$$

$$\ln[-\ln(1-F(x))] = m \ln x - m \ln \beta \quad (9)$$

在 Weibull 概率分布图上规定 $\ln x$ 为横坐标, 记为 X ; $\ln[-\ln(1-F(x))]$ 为纵坐标, 记为 Y , 通过式(10)线性拟合换算求得 m 、 β , 如图 2b 所示。

$$\begin{cases} Y = bX + a \\ b = m \\ a = -m \ln \beta \end{cases} \quad (10)$$

采用该方法求解非均质参数时, 需注意划分单元尺寸的选择。材料内部非均质程度存在一个合理的细观单元尺度表述的事实, 即采用该尺度进行单元划分足以表征材料的非均质性, 这一合理尺度称为特征单元尺度^[33]。采取不同尺寸网格划分模型后, 对各单元等效弹性模量进行统计分析, 同时采用 K-S 检验法进行验证, 结果如图 3 所示。可以看出随单元尺寸减小, 弹性模量变异系数 C 呈增大趋势, 形状参数 m 减小, 即材料非均质性增强; 当尺寸减小到一个特定值后, 变异系数趋于平稳, 表示该尺度网格足以表征材料内部的非均质性。当单元尺寸过小时未通过 K-S 检验, 即内部单元力学性能不服从 Weibull 分布。因此, 本工作在建立地聚物砂浆模型时, 采用 $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ 尺寸单元为特征单元, 对应的非均质参数 m 表征地聚物砂浆内部由细骨料分布引起的非均质性, 计算得到 m 值为 13.61。

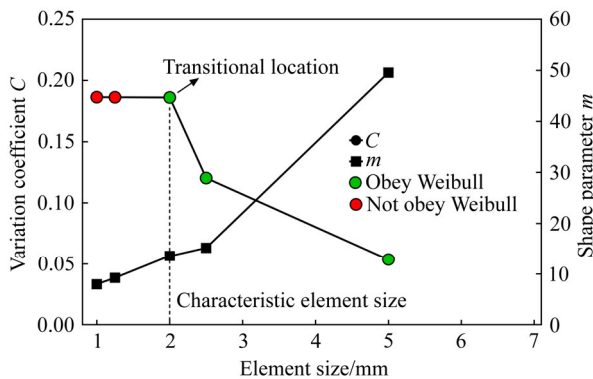


图 3 不同单元尺度下弹性模量变异系数 C 、非均质参数 m 及 K-S 检验

Fig. 3 Variation coefficient C of elastic modulus, heterogeneity parameter m and K-S test under different unit sizes

2.5 初始缺陷引入及其折减系数计算

除了材料本身的非均质性, 混凝土内部的初始缺陷对力学性能也具有不可忽视的影响。现有研究在建立细观模型时, 直接引入毫米级的孔洞作为混凝土内部初始缺陷^[15, 19–21]。但混凝土内部孔洞尺寸

大多为微米级别, 在细观尺度的模型中难以体现。本文采取多尺度模拟的方法, 在尺寸为 $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ 的 ITZ 和砂浆单元内部引入微米级气泡作为初始缺陷, 并探究缺陷单元的力学性能, 提出折减系数表征初始缺陷对单元力学性能的影响。最后将含缺陷单元按一定比例随机分布在混凝土细观模型中, 视为在模型中引入初始缺陷。

参考杨鲁工作^[34], 在 ITZ 单元中通过单元删除的方式引入不同尺寸的气泡。首先使用 $100 \mu\text{m}$ 的网格对尺寸为 $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ 的 ITZ 单元进行划分, 1 个 ITZ 单元被均匀的划分为 1000 个微米级单元; 随后, 通过删除 ITZ 单元内的部分微米级单元, 视作引入气泡。根据删除微米级单元的个数控制引入气泡的尺寸和体积, 不同粒径范围的气泡选取一个特征尺寸气泡进行表示, 其特征气泡所需删除的单元数如表 2 所示。为达到简化模型的目的, 在单元中引入的气泡采用立方体表示。

表 2 引入气泡所需删除微单元数量

Table 2 Number of deleted micro units for introducing bubbles

Type of pores	Volume of pores $\times 10^{-3}/\text{mm}^3$	Volume of deleted unites $\times 10^{-3}/\text{mm}^3$	Number of deleted unites
0–150	0–1.8	1	1
150–300	1.8–14.1	8	8
300–500	14.1–65.4	64	64
500–1000	65.4–523.3	343	343
1000–2000	523.3–4 186.7	1000	1000

为探究初始缺陷位置对单元的影响, 保证结果的可靠性, 对每组孔径气泡都进行 10 次随机引入, 如图 4 所示。其中 $>1000 \mu\text{m}$ 孔径范围删除单元数为 1000, 即将所有微观单元删除, 故将其力学性能视为零。将引入气泡后的单元进行受压模拟, 计算其各项力学性能的均值、标准差和离散系数, 探究其力学性能的变化情况。图 5 展示了不同缺陷单元各项力学性能变异系数变化趋势, 多次模拟结果中变异系数始终在 5% 以内, 数据离散性较小, 因此认为以该法进行含缺陷单元的力学性能分析合理且有效。采用折减系数表征不同尺寸气泡对单元力学性能的影响, 结果如表 3 所示。

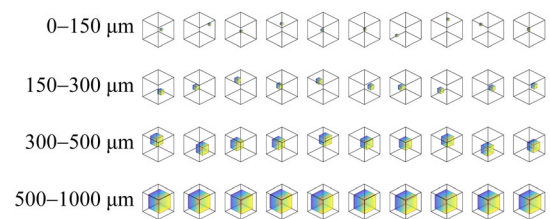
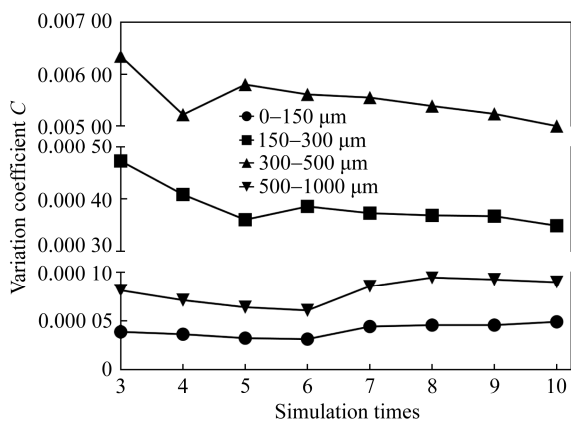
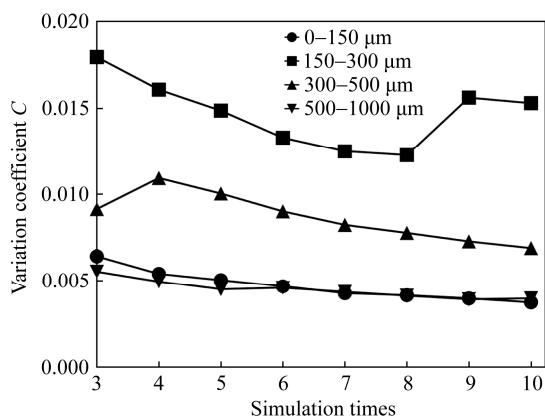


图 4 缺陷单元模型建立

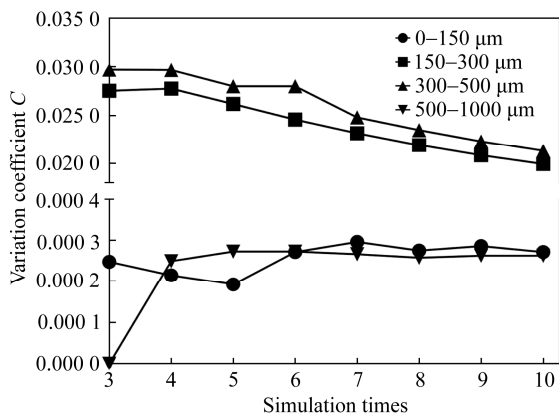
Fig. 4 Establishment of defective units



(a) Variation coefficient of elastic modulus



(b) Variation coefficient of peak stress



(c) Variation coefficient of peak strain

图 5 力学参数的变异系数

Fig. 5 Variation coefficients of mechanical parameters

另外,按照此方法研究了气泡缺陷对砂浆单元力学性能的影响,结果表明气泡含量相同时,单元类型对折减系数无明显影响。因此,后续模型中,含气泡砂浆相的折减系数参照表 3 选取。

获得 ITZ 相与砂浆相缺陷单元力学性能参数后,通过试算法确定气泡在砂浆单元和 ITZ 单元中的分布情况。考虑到“墙效应”,ITZ 相气泡含量应

多于砂浆相,得到 ITZ 相中气泡含量占总含量的 70%,砂浆相中气泡含量占总含量的 30%,且两相中气泡孔径分布状况一致。

表 3 含不同尺寸气泡的 ITZ 单元力学性能折减系数(γ)
Table 3 Reduction coefficient (γ) of mechanical properties of ITZ units containing bubbles with different sizes

Pore size/ μm	Elastic modulus/MPa		Peak strength/MPa		Peak strain	
	Average	γ_E	Average	γ_σ	Average	γ_ϵ
No pores	19 228		44.93		0.003 1	
0-150	19 207	0.999	44.71	0.995	0.003 1	0.999
150-300	18 903	0.983	41.87	0.932	0.003 1	0.990
300-500	16 838	0.876	33.45	0.745	0.002 8	0.898
500-1000	9 996	0.520	19.54	0.435	0.002 7	0.861

2.6 荷载及边界条件设置

将建立完成后的模型导入 Abaqus 中进行荷载与边界条件的设置,如图 6 所示。为获得模型应力-应变曲线,荷载施加方式采用位移控制。首先将模型底部节点固定,然后设置顶部节点垂直于加载面进行随时间均匀增加的压缩位移,并约束其水平自由度。加载时间需综合考虑计算成本与准静态加载,为避免产生动态响应,总动能与总内能的比率始终控制在 5% 以下^[7,35]。设定加载时间为 0.2 s,加载位移为 1.5 mm。

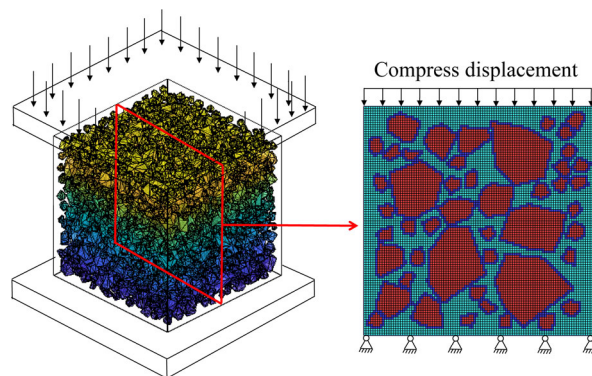


图 6 边界条件设置及三相分布示意图

Fig. 6 Schematic diagram of boundary setting and phase distributions

参考前人研究^[36-37],地聚物砂浆的本构关系上升段符合多项式的特点^[24],经过比对后采用吴有名公式^[38]对地聚物砂浆试验所得应力-应变曲线上进行拟合。由于地聚物砂浆具有较强的脆性,试验无法测得应力-应变曲线下下降段,因此参考罗甜恬^[24]工作,采用过镇海公式^[37]对曲线下下降段进行修正。拟合所得本构曲线如图 7 所示,所采用本构模型如式(11)所示。

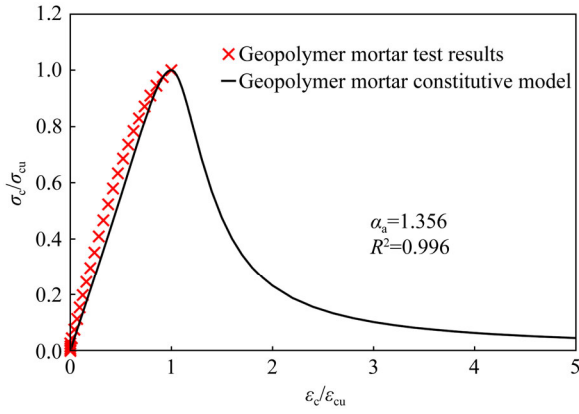


图7 地聚物砂浆本构曲线拟合

Fig. 7 Fitting of constitutive curve for geopolymer mortar

$$\frac{\sigma_c}{\sigma_{cu}} = \begin{cases} \alpha_a \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}} + (6 - 5\alpha_a) \left(\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}} \right)^5 + \\ (4\alpha_a - 5) \left(\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}} \right)^6, \left(\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}} \leq 1 \right) \\ \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}}, \\ \alpha_d \left(\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}} - 1 \right)^2 + \frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}}, \\ \left(\frac{\varepsilon_c}{\varepsilon_{cu}} > 1, \alpha_d = 0.157 \sigma_{cu}^{0.785} - 0.905 \right) \end{cases} \quad (11)$$

式中： ε_c 和 σ_c 分别为受压应变和受压应力； ε_{cu} 为峰值应力 σ_{cu} 对应的峰值应变； α_a 和 α_d 为系数。其中 α_a 通过拟合而得， α_d 通过公式计算而得。为了分析压缩过程中损伤的演化过程，采用压缩损伤因子 d_c 来表示混凝土中的损伤或裂缝发展，如式(12)所示^[39]：

$$d_c = 1 - \frac{\sigma_c / E_0}{\varepsilon_c^{pl} \left(\frac{1}{b_c} - 1 \right) + \sigma_c / E_0} \quad (12)$$

式中： E_0 为初始弹性模量； ε_c^{pl} 为压缩等效塑性应变； b_c 为常数因子，由 $b_c = \varepsilon_c^{pl} / \varepsilon_c^{in}$ 计算得到， ε_c^{in} 为非弹性应变，此处 b_c 取 0.7^[39]。

对于单轴拉伸本构，地聚物砂浆在达到拉伸强度之前表现为弹性段，拉伸软化行为基于文献[40]进行确定，并且在 Abaqus 中设置“Type=Displacement”定义材料拉伸开裂行为，以减轻网格敏感性^[14]。使用 Abaqus 中的 CDP (混凝土损伤塑性)模型来描述砂浆和 ITZ^[8]的损伤情况。关于 CDP 模型具体说明，可参阅文献[10–11]和 Abaqus 分析用户指南。

2.7 地聚物砂浆单元力学参数确定及模型验证

2.7.1 砂浆单元参数确定 基于地聚物砂浆试验

所得参数，对地聚物砂浆试件进行抗压模拟。砂浆采用均质模型，尺寸为 40 mm×40 mm×160 mm，网格尺寸为 1 mm，边界条件同 2.6 节，加载位移为 0.96 mm。模拟情况如图 8 所示，可以看出模拟结果与试验结果之间存在较大的偏差。这是因为试验试件与模型中砂浆单元的尺寸具有显著差异，由于尺寸效应，试验所测得数据难以直接用于模型中的砂浆单元。为此，设计模拟正交表，探讨地聚物砂浆试验值与模型中砂浆单元参数之间的关系。根据试验所测数据，确定 3 个主要力学参数及参数水平，分别为弹性模量(E , 1.1 E , 1.2 E , 1.3 E)，峰值应力(σ , 1.05 σ , 1.10 σ , 1.15 σ)，和峰值应变(ε , 1.15 ε , 1.30 ε , 1.45 ε)。

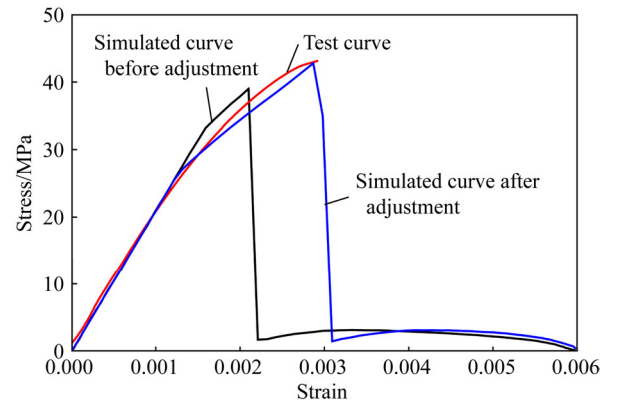


图8 地聚物砂浆参数调整前后应力-应变曲线对比

Fig. 8 Comparison of stress-strain curves of geopolymer mortar before and after parameter adjustment

考虑到参数设置需符合 2.6 节中 CDP 模型的规定，去除塑性应变小于零的不合理参数组后，共进行了 13 次模拟，表 4 记录模拟参数与对应的模拟结果。经过比对发现，第 4 组模拟结果与试验结果上升段较为吻合，到达峰值应力后模拟曲线迅速下降，模型几乎不具备强度，表现出与试验情况相同的脆性，如图 8 所示。后续模型中砂浆单元力学参数将基于此进行确定，即：弹性模量不变，峰值应力提高 15%，峰值应变提高 45%。

2.7.2 模型验证 ITZ 相作为粗骨料和砂浆之间过渡的薄弱相，往往被视作“弱”砂浆相，通常用 ITZ 与砂浆之间的材料强度比来描述 ITZ 的力学性能，一般在 0.7~0.9 之间^[41–44]，设置材料强度比为 0.8，并建立边长为 150 mm 的地聚物混凝土立方体模型进行模拟计算，模型采用材料参数如表 5 所示，其中标*数据取自文献[25]，试验和模型中试件破坏形态如图 9 所示。

表 4 模拟正交

Table 4 Simulation orthogonality

	Parameters of mortar elements in model			Simulation results of mortar model		
	Elastic modulus	Peak stress	Peak strain	Elastic modulus	Peak stress	Peak strain
1	20 795	43.21	0.002 9	20 968	39.05	0.002 1
2	20 795	45.37	0.003 3	20 970	40.92	0.002 3
3	20 795	47.53	0.003 8	20 970	41.50	0.002 4
4	20 795	49.69	0.004 2	20 970	42.82	0.002 9
5	22 875	43.21	0.003 3	23 064	37.37	0.002 0
6	22 875	45.37	0.002 9	23 064	40.59	0.002 0
7	22 875	49.69	0.003 8	23 066	42.32	0.002 2
8	24 954	43.21	0.003 8	25 160	36.25	0.002 0
9	24 954	47.53	0.002 9	25 160	42.42	0.002 0
10	24 954	49.69	0.003 3	25 160	43.46	0.002 1
11	32 440	45.37	0.003 8	32 704	37.09	0.001 6
12	32 440	47.53	0.003 3	32 704	40.30	0.001 8
13	32 440	49.69	0.002 9	32 704	42.75	0.001 7

如图 9a 中所示,立方体受压破坏时,试件上下表面水平向自由度受到约束,形成环箍效应,裂缝由上下表面向试件中部呈倒三角延伸;模拟中裂缝扩展模式也体现这一特点,如图 9b 和图 9c 所示,

在荷载作用下模型中部发生大面积破坏,上下靠近约束面部分的混凝土无严重损伤,裂缝模式呈“X”形开裂。地聚物混凝土模拟抗压强度为 49.10 MPa,试验抗压强度为 48.39 MPa,相对误差为 1.47%。图 10 为模拟应力-应变曲线图,其上升段与下降段与文献[45]中相近强度等级地聚物混凝土的测试结果基本相似。综上,通过力学性能与破坏模式的对比,可以证明所建立地聚物混凝土模型具有较好的可靠性,后续将基于该细观模型开展研究。

3 结果与讨论

3.1 粗骨料体积分数对单轴抗压强度的影响

混凝土内部粗骨料通常占总体积的 40%~50%,与混凝土力学性能密切相关^[46]。一方面,骨料周围的界面过渡区作为混凝土内部的薄弱区,会一定程度降低力学性能;另一方面,骨料可以阻碍裂缝的扩展,增加破坏所需能量。为了分析骨料含量对地聚物混凝土力学性能的影响,分别建立骨料含量 30%、40%和 50%的混凝土模型并进行压缩模拟,模拟结果如图 11 所示。

表 5 地聚物混凝土细观模型各相材料参数

Table 5 Material parameters of various phases in microscopic model for geopolymers concrete

Different phase material	Density $\rho/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	Elastic modulus E/MPa	Poisson's ratio μ	Peak stress σ/MPa	Peak strain ε	Heterogeneous parameters m
Aggregate	2600*	50 000*	0.16*			24.00*
Mortar	2250	21 131	0.20*	50.62	0.004 2	13.61
ITZ	2250	16 905	0.20*	40.50	0.004 2	10.89

* denotes that the values are defined as per the numerical studies performed by Zheng *et al.* [25].

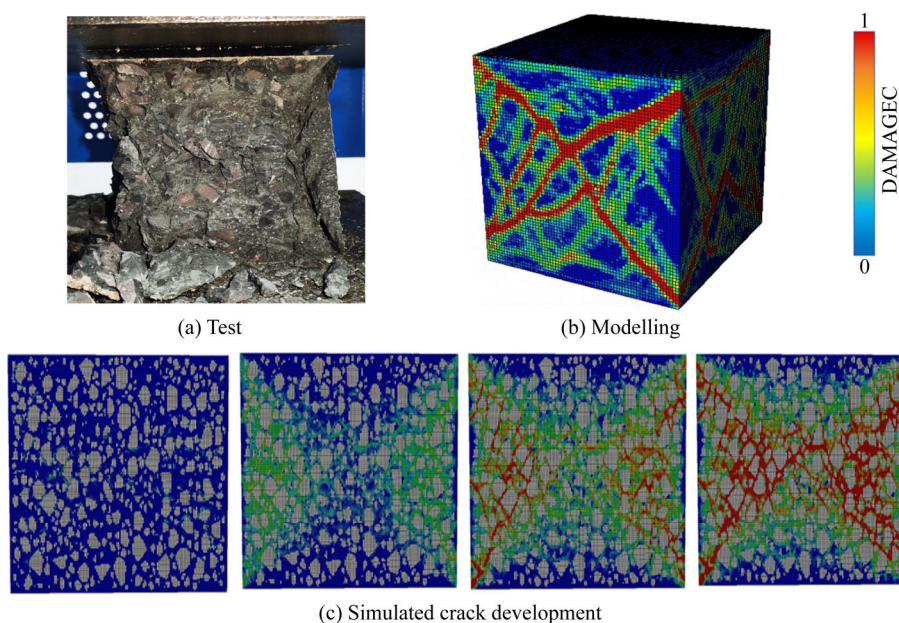


图 9 试验破坏模式、模拟破坏模式及模拟裂缝扩展

Fig. 9 Damage mode in test, damage mode in modelling and simulated crack development

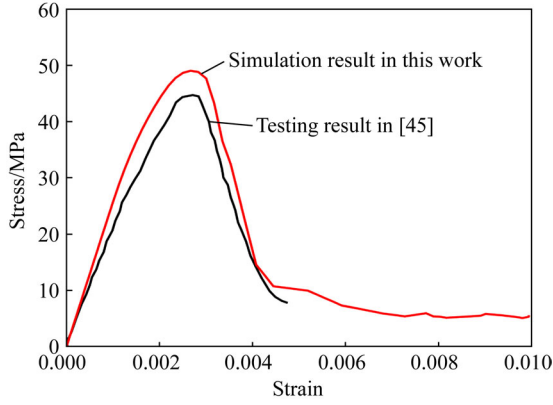


图 10 地聚物混凝土应力-应变曲线对比
Fig. 10 Comparison of stress-strain curves of GPC

从图 11 可以看出,地聚物混凝土的抗压强度随骨料含量的增加而增加。当骨料含量为 30%、40% 和 50% 时,模型的抗压强度分别为 46.36、49.10 MPa 和 50.97 MPa。图 12 分别为不同骨料含量下地聚物

混凝土受压破坏形态,可以看到随着骨料含量的增加,地聚物混凝土内部裂缝扩展受到骨料阻碍,路径趋于复杂。

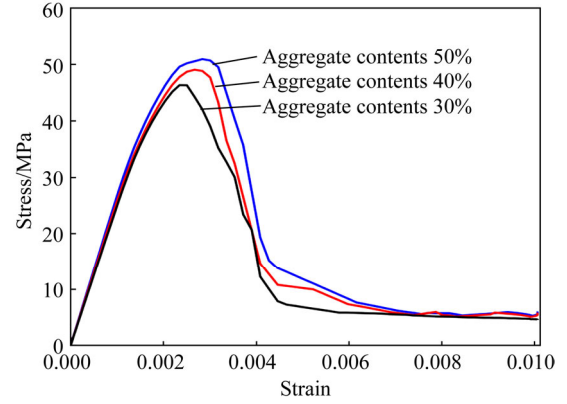


图 11 不同骨料含量下地聚物混凝土应力-应变曲线
Fig. 11 Stress-strain curves of geopolymer concrete under different aggregate contents

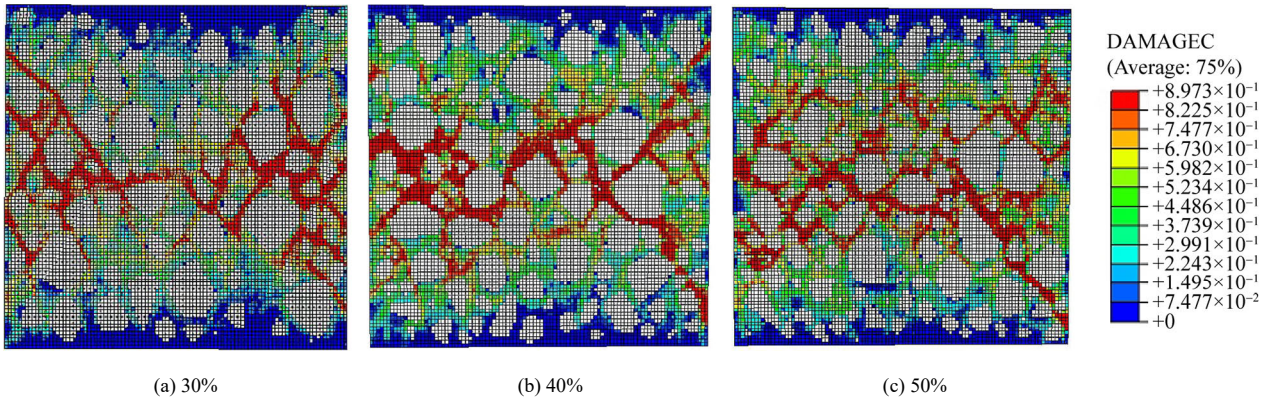


图 12 不同粗骨料含量地聚物混凝土受压破坏形态
Fig. 12 Damage modes of geopolymer concrete with different contents of coarse aggregate

考虑到骨料含量对裂缝扩展与试件破坏所需能量的影响,从能量角度进行探究。如图 13 所示,在加载过程中,试件受到外部荷载后所吸收的能量记为 U_0 , 其中一部分以弹性应变能 U_e 储存在材料内部, 另一部分由于试样变形和裂缝扩展等原因被消耗, 称为耗散能 U_d ^[47]。试件内部发生破坏时, 弹性模量受到损伤导致储能能力下降。使用损伤因子 d_c 表示模型损伤程度, U_{0e} 表示试件损伤前弹性应变能, $U_{0e'}$ 表示损伤后弹性应变能, U_{er} 表示残余应变能, 采用式(13)~式(19)求解各能量值并分析能量间关系:

$$U_0 = \int_0^{\varepsilon_{cr}} \sigma d\varepsilon \quad (13)$$

$$U_{0e} = \frac{1}{2} \sigma_{0c} \varepsilon_{0c}^{el} \quad (14)$$

$$U_{0e'} = \frac{1}{2} \sigma_{cr} \varepsilon_{0c}^{el} \quad (15)$$

$$U_{er} = \frac{1}{2} \sigma_{cr} \varepsilon_c^{el} \quad (16)$$

$$\varepsilon_c^{el} = \varepsilon_{0c}^{el} + \frac{d_c \sigma_{cr}}{(1-d_c)E_0} \quad (17)$$

$$d_c = 1 - \sqrt{\frac{\sigma_{cr}}{E_0 \varepsilon_{cr}}} \quad (18)$$

$$U_d = U_0 - U_{er} \quad (19)$$

为了简化模型, 本工作认为曲线上升段中, 应力小于 $0.4\sigma_0$ 时模型未受到破坏, $0.4\sigma_0$ 处的割线斜率为弹性模量 E_0 ^[25]; 曲线下降段中, 试件破坏后存在一定的残余强度, 本工作根据模拟情况规定 $0.3\sigma_0$ 为试件残余强度, 应力下降至 $0.3\sigma_0$ 前的曲线下包围面积为试件吸收能 U_0 。式中采用 σ_{0c} 和 ε_{0c}^{el} 表示上升

段中 $0.4\sigma_0$ 处对应的应力值和应变值, σ_{cr} 和 ε_{cr} 表示下降段的残余应力和与其对应的应变值, 表 6 列出计算后各能量值。

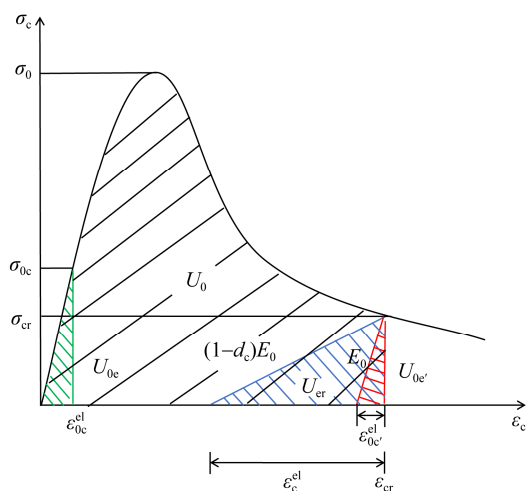


图 13 能量示意图

Fig. 13 Energy schematic diagram

表 6 单轴压缩下不同骨料含量地聚物混凝土能量值

Table 6 Energy value of geopolymer concrete with different aggregate contents under uniaxial compression

w(Aggregate)/ %	$U_0/$ (N·m ⁻¹)	$U_{0e}/$ (N·m ⁻¹)	$U_{0e'}/$ (N·m ⁻¹)	$U_{cr}/$ (N·m ⁻¹)	$U_d/$ (N·m ⁻¹)
30	0.119 1	0.005 4	0.000 4	0.004 2	0.114 9
40	0.130 9	0.005 6	0.000 6	0.005 1	0.125 8
50	0.150 6	0.005 8	0.000 6	0.005 4	0.145 2

w is mass fraction.

可以看出, 随粗骨料含量的增大, 吸收能 U_0 呈增大趋势, 试件破坏所需能量增多, 抵抗变形和破坏的能力增强。随骨料含量增大, 损伤前后的弹性应变能 U_{0e} 和 $U_{0e'}$ 均有上升, 试件储能极限增大, 抵抗外力变形破坏的能力增强。同时由于受到骨料阻碍, 裂缝扩展需要更多的能量, 耗散能 U_d 增大, 导致试件所需总吸收能 U_0 增大, 宏观上表现为力学性能增强。从能量的角度可以看出, 骨料对混凝土力学性能的积极作用大于骨料周围薄弱部分的负面影响, 增加地聚物混凝土内部的骨料含量在一定程度上可以提高力学性能。

3.2 立方体试样单轴抗压强度尺寸效应

为更好描述实际工程中大体积混凝土构件的力学性能, 尺寸效应一直是一个研究热点。目前关于普通混凝土的尺寸效应已经有大量研究和较成熟理论, 但地聚物混凝土尺寸效应的研究较为匮乏。本工作基于细观数值模型对地聚物混凝土单轴抗压强度尺寸效应进行研究, 分别建立边长为 70、100 mm

和 150 mm 的立方体模型进行模拟, 模拟结果如图 14 所示。

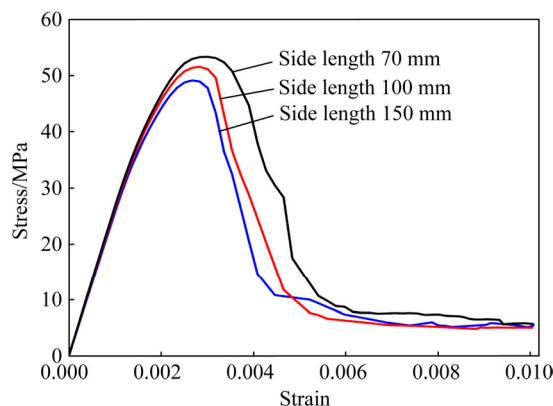


图 14 不同尺寸地聚物混凝土模型应力-应变曲线

Fig. 14 Stress-strain curves of geopolymer concrete models with different sizes

从图 14 可以看出, 地聚物混凝土的立方体抗压强度随试件尺寸的增加而下降。当试件边长分别为 70、100 mm 和 150 mm 时, 模型的抗压强度分别为 53.30、51.52 MPa 和 49.10 MPa。为进一步探究尺寸与力学性能之间的关系, 本工作使用尺寸换算系数[式(20)]与尺寸效应度[式(21)]进行表征, 计算结果如表 7 所示。边长为 70 mm 和 100 mm 的地聚物混凝土模型的尺寸效应度分别为 8.55% 和 4.93%, 而普通混凝土 70 mm 试件的尺寸效应度为 8.73%~9.77%^[48-49], 100 mm 试件的尺寸效应度为 3.62%~6.4%^[48-50]。可以看出地聚物混凝土展现出与普通混凝土相当的尺寸效应。

$$\alpha_a = f_{cu,a} / f_{cu,150} \quad (20)$$

$$\Delta\alpha_a = \frac{|f_{cu,150} - f_{cu,a}|}{f_{cu,150}} \times 100\% \quad (21)$$

表 7 地聚物混凝土立方体抗压强度尺寸效应参数

Table 7 Size effect parameters of compressive strength of geopolymer concrete

Size/mm	f_{cu}/MPa	α	$\Delta\alpha/\%$
70	53.30	1.09	8.55
100	51.52	1.05	4.93
150	49.10		

Bažant 在裂纹带模型的基础上建立了断裂力学的尺寸效应律, 提出混凝土与延性金属等材料的破坏裂缝尖端呈“钝”状, 材料表现出非线性特征^[51]。基于裂缝带模型, Bažant 提出了经典的尺寸效应定律, 如式(22)所示:

$$\sigma_N = \frac{Bf'_t}{\sqrt{1+\beta}}, \quad \beta = \frac{D}{D_0} \quad (22)$$

其中： σ_N 为几何相似试件名义强度； f'_t 为材料抗拉强度； B 为无量纲常数； D 为试件尺寸(指立方体试件边长)； D_0 为结构几何形状相关常数。

使用 Bažant 公式将立方体强度进行拟合，拟合情况如图 15 所示。可以看出，理论公式与模拟结果拟合情况良好，说明 Bažant 理论可以较好的描述地聚物混凝土尺寸效应现象。其中，常数 B 为 1.145，略小于文献中报道值 1.287~1.977^[50, 52–53]，常数 D_0 为 379.01，远大于报道值 135.6~223.36^[50, 52–53]。

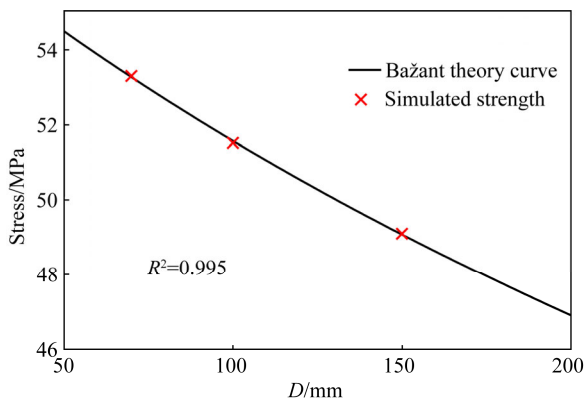


图 15 模拟结果与 Bažant 理论公式拟合图

Fig. 15 Fitting of simulation result and Bažant equation

3.3 微孔洞率对单轴抗压强度的影响

混凝土内部初始缺陷含量会对其力学性能有重要影响。陈青青^[23]指出，当孔隙率一定时，随着孔径减小，混凝土峰值应力下降；当孔径一定时，随着孔隙率增加，混凝土抗压强度显著下降。分别建立内含微孔洞率为 1.9%、4.3%和 5.9%的混凝土模型进行模拟，结果如图 16 所示。

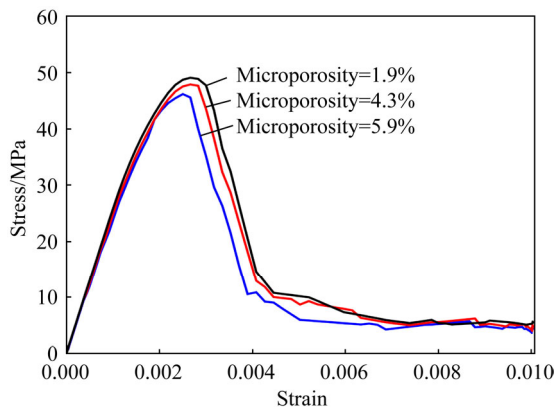


图 16 不同微孔洞率地聚物混凝土模型应力-应变曲线

Fig. 16 Stress-strain curves of geopolymer concrete models with different porosity

由图 16 可以看出，随初始微孔洞率的增加，地聚物混凝土的立方体抗压强度呈下降趋势。当模型微孔洞率为 1.9%、4.3%和 5.9%时，模型抗压强度分别为 49.10、47.90 MPa 和 46.19 MPa。随微孔洞率的提升，模型的力学性能下降程度并不明显。这与陈青青研究结果不同，根本原因在于引入孔洞方式的不同。陈采用直接引入圆形或椭圆形的毫米级孔洞。当试样内部孔洞尺寸一定时，孔洞率越大则孔洞数量越多，在外部荷载作用下内部产生多个应力集中处，裂缝发展和孔隙贯穿的概率提高，从而导致力学性能降低^[23]。通过多尺度建模，在毫米级单元内部引入微米级孔洞，然后将力学性能减弱的含缺陷单元输入模型。由于小尺寸微孔洞对细观单元力学性能影响较小，所以混凝土试件的宏观强度下降程度较低。

4 结论

1) 建立了模拟地聚物混凝土力学性能的非均质细观模型，试件破坏强度的模拟值与试验结果误差为 1.47%，试件破坏形态的模拟结果与试验结果一致，都呈“X”形开裂破坏。

2) 提出了描述地聚物混凝土非均质性的新方法：采用等效单元法确定材料自身非均质参数 m ，通过多尺度建模和折减系数表征初始微孔洞缺陷。

3) 基于砂浆试验与正交模拟，确定了地聚物混凝土模型中砂浆相力学参数，当砂浆峰值应力试验值提高 15%，峰值应变试验值提高 45%，弹性模量保持不变时，模拟结果与试验结果吻合较好。

4) 随骨料含量增加([30%, 50%])，地聚物混凝土的吸收能 U_0 ，弹性应变能 U_e 和耗散能 U_d 均呈上升趋势，储能极限增强，抗压强度上升。随模型尺寸增大([70 mm, 150 mm])，地聚物混凝土表现出明显的尺寸效应，其宏观力学性能下降，并与 Bažant 尺寸效应理论公式拟合良好。随初始微孔洞率增加([1.9%, 5.9%])，地聚物混凝土力学性能发生小幅度下降。

尽管非均质细观模型能够准确描述地聚物混凝土力学性能，但砂浆本构模型及其参数需要结合试验和模拟正交法确定。后续研究中，有必要从微观尺度出发，考虑地聚物主要反应产物 C-A-S-H、N-A-S-H 凝胶以及孔隙结构的影响，建立更具实际意义的地聚物混凝土细观多尺度非均质模型。

参考文献:

- [1] SHI C J, JIMÉNEZ A F, PALOMO A. New cements for the 21st

- century: The pursuit of an alternative to Portland cement[J]. *Cem Concr Res*, 2011, 41(7): 750–763.
- [2] 王峰, 张耀君, 宋强, 等. NaOH 碱激发矿渣地质聚合物的研究[J]. *非金属矿*, 2008, 31(3): 9–11.
- WANG Feng, ZHANG Yaojun, SONG Qiang, et al. *Non Met Mines*, 2008, 31(3): 9–11.
- [3] BERNAL S A, PROVIS J L. Durability of alkali-activated materials: Progress and perspectives[J]. *J Am Ceram Soc*, 2014, 97(4): 997–1008.
- [4] TURNER L K, COLLINS F G. Carbon dioxide equivalent (CO₂-e) emissions: A comparison between geopolymer and OPC cement concrete[J]. *Constr Build Mater*, 2013, 43: 125–130.
- [5] AL-OTAIBI S. Durability of concrete incorporating GGBS activated by water-glass[J]. *Constr Build Mater*, 2008, 22(10): 2059–2067.
- [6] 吕江波. 粉煤灰地质聚合物的制备与性能分析[D]. 西安: 西北大学, 2009.
- LYU Jiangbo. Preparation and performance analysis of fly ash geopolymer[D]. Xi'an: Northwest University, 2009.
- [7] NADERI S, TU W L, ZHANG M Z. Meso-scale modelling of compressive fracture in concrete with irregularly shaped aggregates[J]. *Cem Concr Res*, 2021, 140: 106317.
- [8] CHEN H B, XU B, WANG J, et al. Parametric analysis on compressive strain rate effect of concrete using mesoscale modeling approach[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 246: 118375.
- [9] 杜敏, 金浏, 李冬, 等. 骨料粒径对混凝土劈拉性能及尺寸效应影响的细观数值研究[J]. *工程力学*, 2017, 34(9): 54–63.
- DU Min, JIN Liu, LI Dong, et al. *Eng Mech*, 2017, 34(9): 54–63.
- [10] JIN L, XU C S, HAN Y Q, et al. Effect of end friction on the dynamic compressive mechanical behavior of concrete under medium and low strain rates[J]. *Shock Vib*, 2016, 2016: 6309073.
- [11] DU X L, JIN L, MA G W. Numerical simulation of dynamic tensile-failure of concrete at meso-scale[J]. *Int J Impact Eng*, 2014, 66: 5–17.
- [12] QIN X N, GU C S, SHAO C F, et al. Numerical analysis of fracturing behavior in fully-graded concrete with oversized aggregates from mesoscopic perspective[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 253: 119184.
- [13] 唐欣薇. 基于宏观力学的混凝土破坏行为研究[D]. 北京: 清华大学, 2009.
- TANG Xinwei. Study on concrete failure behavior based on macro-and micro-mechanics[D]. Beijing: Tsinghua University, 2009.
- [14] ZHENG Z S, ZENG C, TIAN C, et al. Mesoscale numerical investigation on the size effect of concrete uniaxial compressive strength under different contact friction[J]. *Constr Build Mater*, 2022, 346: 128416.
- [15] 赵吉坤. 混凝土细观损伤与断裂的数值模拟[D]. 南京: 河海大学, 2005.
- ZHAO Jikun. Numerical simulation of meso-damage and fracture of concrete[D]. Nanjing: Hohai University, 2005.
- [16] KIM K H, JANG S Y, JANG B S, et al. Modeling mechanical behavior of reinforced concrete due to corrosion of steel bar[J]. *ACI Mater J*, 2010, 107(2): 106–113.
- [17] LEE J, FENVES G L. Plastic-damage model for cyclic loading of concrete structures[J]. *J Eng Mech*, 1998, 124(8): 892–900.
- [18] LUBLINER J, OLIVER J, OLLER S, et al. A plastic-damage model for concrete[J]. *Int J Solids Struct*, 1989, 25(3): 299–326.
- [19] 尹月明. 初始缺陷对混凝土渗透性能影响研究[D]. 杨凌: 西北农林科技大学, 2019.
- YIN Yue ming. Study on influence of initial defects on permeability of concrete[D]. Yangling: Northwest A&F University, 2019.
- [20] 张永杰. 考虑套筒灌浆随机缺陷的装配式剪力墙结构建模分析方法[D]. 苏州: 苏州科技大学, 2022.
- ZHANG Yongjie. Modeling and analysis method of assembled shear wall structure considering random defects of sleeve grouting[D]. Suzhou: Suzhou University of Science and Technology, 2022.
- [21] CHEN W, LI K L, WU M M, et al. Influence of pore structure characteristics on the gas permeability of concrete[J]. *J Build Eng*, 2023, 79: 107852.
- [22] XIAO J Z, LV Z Y, DUAN Z H, et al. Pore structure characteristics, modulation and its effect on concrete properties: A review[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 397: 132430.
- [23] 陈青青. 含孔隙混凝土细观建模方法与数值研究[D]. 太原: 太原理工大学, 2020.
- CHEN Qingqing. Meso-modeling method and numerical study of porous concrete[D]. Taiyuan: Taiyuan University of Technology, 2020.
- [24] 罗甜恬. 碱激发粉煤灰/矿渣砂浆力学性能及数值模拟研究[D]. 广州: 广州大学, 2021.
- LUO Tiantian. Study on mechanical properties and numerical simulation of alkali-activated fly ash/slag mortar[D]. Guangzhou: Guangzhou University, 2021.
- [25] ZHENG Z S, WEI X S, TIAN C. Mesoscale models and uniaxial tensile numerical simulations of concrete considering material heterogeneity and spatial correlation[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 312: 125428.
- [26] THILAKARATHNA P S M, KRISTOMBU BADUGE K S, MENDIS P, et al. Mesoscale modelling of concrete—A review of geometry generation, placing algorithms, constitutive relations and applications[J]. *Eng Fract Mech*, 2020, 231: 106974.
- [27] ZHANG Y H, CHEN Q Q, WANG Z Y, et al. 3D mesoscale fracture analysis of concrete under complex loading[J]. *Eng Fract Mech*, 2019, 220: 106646.
- [28] ZHOU R X, SONG Z H, LU Y. 3D mesoscale finite element modelling of concrete[J]. *Comput Struct*, 2017, 192: 96–113.
- [29] OUYANG H, CHEN X W. 3D meso-scale modeling of concrete with a local background grid method[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 257: 119382.
- [30] ZHENG Z S, WEI X S. Mesoscopic models and numerical simulations of the temperature field and hydration degree in early-age concrete[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 266: 121001.
- [31] VAN MIER J G M, VAN VLIET M R A, WANG T K. Fracture mechanisms in particle composites: Statistical aspects in lattice type analysis[J]. *Mech Mater*, 2002, 34(11): 705–724.
- [32] TRISTRUM K, DE S JAYATILAKA A. On estimating the Weibull modulus for a brittle material[J]. *J Mater Sci*, 1979, 14(5): 1080–1084.
- [33] 金浏. 细观混凝土分析模型与方法研究[D]. 北京: 北京工业大学, 2014.
- JIN Liu. Study on analysis model and method of meso-concrete[D]. Beijing: Beijing University of Technology, 2014.
- [34] 杨鲁. 新拌混凝土和硬化混凝土气泡参数研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2012.
- YANG Lu. Study on bubble parameters of fresh concrete and hardened concrete[D]. Chongqing: Chongqing University, 2012.
- [35] XIAO J Z, LI W G, CORR D J, et al. Effects of interfacial transition zones on the stress-strain behavior of modeled recycled aggregate concrete[J]. *Cem Concr Res*, 2013, 52: 82–99.

- [36] MATTOCK A H, KRIZ L B, HOGNESTAD E. Rectangular concrete stress distribution in ultimate strength design[J]. J Aci, 1961, 2: 138485239.
- [37] 过镇海, 张秀琴, 张达成, 等. 混凝土应力-应变全曲线的试验研究[J]. 建筑结构学报, 1982, 1: 3–14.
GUO Zhenhai, ZHANG Xiuqin, ZHANG Dacheng, et al. J Build Struc, 1982, 1: 3–14.
- [38] 吴有明. 活性粉末混凝土(RPC)受压应力-应变全曲线研究[D]. 广州: 广州大学, 2012.
WU Youming. Study on compressive stress-strain curve of reactive powder concrete (RPC)[D]. Guangzhou: Guangzhou University, 2012.
- [39] XIONG Q R, WANG X F, JIVKOV A P. A 3D multi-phase meso-scale model for modelling coupling of damage and transport properties in concrete[J]. Cem Concr Compos, 2020, 109: 103545.
- [40] ZERFU K, EKAPUTRI J J. Nonlinear finite element study on element size effects in alkali-activated fly ash based reinforced geopolymer concrete beam[J]. Case Stud Constr Mater, 2021, 15: e00765.
- [41] HUANG Y J, YANG Z J, CHEN X W, et al. Monte Carlo simulations of meso-scale dynamic compressive behavior of concrete based on X-ray computed tomography images[J]. Int J Impact Eng, 2016, 97: 102–115.
- [42] KIM S M, ABU AL-RUB R K. Meso-scale computational modeling of the plastic-damage response of cementitious composites[J]. Cem Concr Res, 2011, 41(3): 339–358.
- [43] LI W, XIAO J, CORR D J, et al. Numerical modeling on the stress-strain response and fracture of modeled recycled aggregate concrete[C]//13th International Conference on Fracture, 2013: 749–759.
- [44] JIN L, LI D, DU X L, et al. Experimental and numerical study on size effect in eccentrically loaded stocky RC columns[J]. J Struct Eng, 2017, 143(2): 04016170.
- [45] 毕继红, 王炯文, 赵云, 等. 钢纤维地聚物混凝土轴压性能细观数值模拟[J]. 石家庄铁道大学学报(自然科学版), 2023, 36(3): 77–84.
BI Jihong, WANG Jiongwen, ZHAO Yun, et al. J Shijiazhuang Tiedao Univ Nat Sci Ed, 2023, 36(3): 77–84.
- [46] 田梦云. 基于细观尺度的混凝土单轴力学性能的数值计算[D]. 太原: 太原理工大学, 2019.
TIAN Mengyun. Numerical calculation of uniaxial mechanical properties of concrete based on mesoscale[D]. Taiyuan: Taiyuan University of Technology, 2019.
- [47] 赵建清. 静-动载条件下轻骨料混凝土细观损伤与能量演化数值模拟研究[D]. 焦作: 河南理工大学, 2022.
ZHAO Jianqing. Numerical simulation study on meso-damage and energy evolution of lightweight aggregate concrete under static-dynamic load[D]. Jiaozuo: Henan Polytechnic University, 2022.
- [48] LI B, JIANG G L, HU J N, et al. Specimen size effect on compressive and splitting tensile strengths of sustainable geopolymeric recycled aggregate concrete: Experimental and theoretical analysis[J]. J Clean Prod, 2024, 434: 140154.
- [49] 周宏宇, 刘亚南, 周运. 混凝土立方体抗压强度速率特性尺寸效应理论研究[J]. 建筑结构学报, 2021, 51(S1): 1356–1360.
ZHOU Hongyu, LIU Yanan, ZHOU Yun. J Build Eng, 2021, 51(S1): 1356–1360.
- [50] 苏捷. 混凝土受压与受拉性能的尺寸效应研究[D]. 长沙: 湖南大学, 2013.
SU Jie. Study on size effect of concrete compressive and tensile properties[D]. Changsha: Hunan University, 2013.
- [51] BAŽANT Z P, OH B H. Crack band theory for fracture of concrete[J]. Matériaux Constr, 1983, 16(3): 155–177.
- [52] 王双星. 高温下粉煤灰地聚物混凝土抗压强度尺寸效应研究[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2023.
WANG Shuangxing. Study on size effect of compressive strength of fly ash geopolymer concrete at high temperature[D]. Xi'an: Xi'an University of Architecture and Technology, 2023.
- [53] 周红. 混凝土强度尺寸效应的实验研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2010.
ZHOU Hong. Experimental study on size effect of concrete strength[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2010.

Numerical Simulation of Mechanical Properties of Geopolymer Concrete Considering Material Heterogeneity and Initial Micro-Pores

LIN Junhua¹, ZUO Yibing¹, ZHENG Zhishan², GAN Yidong¹

(1. School of Civil and Hydraulic Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China;

2. Wuhan Municipal Engineering Design & Research Institute Co., Ltd., Wuhan 430023, China)

Extended Abstract

Introduction Geopolymer is a green cementitious material produced via the activation of silica-aluminate-rich precursor materials in an alkaline environment. It has outstanding mechanical qualities and durability. However, the different raw materials and complicated reaction process of geopolymers result in some parameters affecting mechanical qualities that are difficult to effectively manage and forecast. It is thus necessary to examine the variation rule of mechanical properties in geopolymer concrete (GPC) under various conditions via numerical simulation. Though the majority of existing numerical models are applicable to ordinary Portland cement (OPC), they cannot be directly applicable to GPC due to variations in the chemical characteristics as well as isomorphic model of mortar and interface transition zone (ITZ) in GPC and OPC. The existing studies lack clear criteria for material inhomogeneity in each phase of the model, and the majority of them neglect the impact of interior micropores on the model mechanical characteristics. In this work, an innovative method was used to account for non-homogeneity and determine the mechanical parameters and intrinsic model of geopolymer materials through experiment. In addition, the impacts of aggregate content, model size, and porosity on the mechanical properties of GPC were also investigated by the verified model.

Methods The mechanical parameters and intrinsic model were determined *via* a geopolymer mortar test, and the model reliability was verified *via* a geopolymer concrete test. To prepare the specimens, slag and fly ash were used as precursors, and NaOH and water glass were used as alkaline activators. A coarse aggregate was a continuously graded gravel with a particle size range of 5–20 mm. A fine aggregate was a standard sand with a fineness modulus of 2.5. In this proportion, the alkali equivalent (in mass proportion of Na₂O to precursor) was 4%, the water-cement ratio was 0.50, the modulus of alkali solution (SiO₂/Na₂O) was 1.2, and the mortar was kept in the same proportion of mortar phase in the concrete.

At the simulation level, the Mesh–Placement–Identification–Assignment (MPIA) procedure was utilized to create a 3D GPC meso-scale model, and the model fundamental conditions were consistent with the experiments. It was assumed that the mechanical characteristics of each phase material inside the concrete could follow the Weibull distribution, and the mortar phase element non-homogeneous parameters could be solved using an equivalent unit approach. Also, initial flaws were introduced into the model, and multi-scale analysis was utilized to assess their impact on mechanical characteristics because the mixing process could form air bubbles in the concrete. After the model was constructed, the material constitutive model was determined *via* mortar experimental curve fitting, and the mortar test results and test algorithms were used to estimate the material mechanical characteristics. The model was imported into ABAQUS to set the boundary and loading conditions before being compared to the GPC test results obtained after the simulation. The results indicated that the damage patterns and mechanical characteristics of the test and simulation results could be nearly compatible, and the model was regarded as reliable.

Results and discussion Based on the validated model, GPC models with different aggregate volume fractions of 30%, 40%, and 50% are simulated under uniaxial compression. The simulation findings reveal that the compressive strength of GPC increases as the aggregate volume percent increases, as does the energy absorbed for damage. This is because the aggregate plays a role in preventing crack development, so as the aggregate content increases in a specific range, the crack morphology inside the model becomes more complex, the energy required for damage increases, thus improving the macroscopic performance of the mechanical properties.

Under uniaxial compression, GPC cubes with the side lengths of 70, 100 mm, and 150 mm are simulated, respectively. According to the simulation results, the compressive strength of GPC descends when the specimen volume grows. Compared to OPC, GPC displays the same pronounced size effect phenomena and aligns well with the Bažant theoretical formulation.

The GPC models with internal porosities of 1.9%, 4.3%, and 5.9% are simulated under uniaxial compression, having the compressive strengths of 49.10, 47.90 MPa, and 46.19 MPa, respectively. The mechanical characteristics of the geopolymer concrete decrease slightly as the model inside porosity increases. This is since the introduction of pores in this study takes into account both porosity and pore size distribution, and the number of small-sized pores increases as the porosity increases. The small pores have less influence on the mechanical properties, and the results show that the model mechanical properties are insensitive to the change of porosity.

Conclusions A non-homogeneous meso-scale model of GPC was proposed, and the simulation results were similar to the experimental result. Also, an innovative approach to describe the non-homogeneity of GPC was proposed. The equivalent unit method was used to determine the non-homogeneity parameter, and the initial microporous defects were characterized *via* multiscale modeling and folding coefficients. The energy required to destroy GPC and the compressive strength increased with increasing aggregate content. As the model size increased, the mechanical characteristics of GPC decreased, aligning with Bažant's theory. The mechanical characteristics of geopolymer concrete diminished slightly as initial microporosity increased.

Keywords geopolymer concrete; mechanical properties; numerical simulation; heterogeneous model; initial defect