

高延性水泥基复合材料拉伸开裂行为多尺度模拟研究进展

雷东移¹, 武志盈¹, 贾昊瑄¹, 于 龙¹, 王 冰¹, 汤金辉², 李 莹¹, 李炎隆³, 刘加平²(1. 青岛理工大学土木工程学院, 海洋环境混凝土技术教育部工程研究中心, 山东 青岛 266520;
2. 东南大学材料科学与工程学院, 南京 211189; 3. 西安理工大学水利水电学院, 西安 710048)

摘 要: 高延性水泥基复合材料(ECC)克服了普通混凝土延性差、裂缝控制能力弱的缺点, 当前针对混凝土断裂力学的机理分析主要依据微、宏观试验数据进行, 但该过程耗时耗力且无法直观展示开裂过程中纤维-基体间的应力传递及异相物质间的分子或原子交互作用, 而计算机模拟技术凭借高效、可视化、低成本的优势为精准预测、深入分析试验结果提供了强力支撑。为全面了解当前 ECC 拉伸开裂行为多尺度模拟的研究现状, 将分子动力学、数值模拟(有限元模拟)、近场动力学和人工神经网络按纳、介、宏观 3 类尺度、4 类方法分类概述其对 ECC 拉伸开裂行为的模拟。纳观尺度方面, 分子动力学从分子或原子层面出发, 着重分析未改性及改性纤维对 ECC 变形过程中纤维-基体界面结合性能的影响机理。介观尺度方面, 数值(有限元)模拟重点关注纤维、基体及其界面特性等宏、细观因素对 ECC 拉伸应变硬化行为的影响规律。宏观尺度方面: 近场动力学模拟针对 ECC 多缝开裂特性研究较少, 其主要基于非局部作用分析了普通及纤维增强混凝土在不同方向荷载下的开裂演化行为; 人工神经网络对 ECC 的力学性能预测有一定研究, 但该方法主要通过建立预测模型, 实现混凝土配合比设计并预测相关参数与力学性能之间的关联性。同时, 论述了 4 种模拟技术在 ECC 拉伸开裂行为中的不足及发展趋势。

关键词: 高延性; 拉伸应变硬化; 分子动力学; 数值(有限元); 近场动力学; 人工神经网络

中图分类号: TU528 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2025)01-0173-17

网络出版时间: 2024-11-06



混凝土结构抗压强度高, 与钢筋粘结性能良好, 但因混凝土基材抗拉强度低、脆性大, 易发生脆性断裂致突然破坏^[1-2], 为减少此类隐患发生, 近年来研究人员一直朝着提高水泥基材料的延性和韧性方向努力。高延性水泥基复合材料(Engineered cementitious composites, ECC)通过严格的配合比设计, 最大裂缝宽度可控制在 100 μm 以内, 其极限拉伸应变可超过 3%^[3], 凭借应变硬化和多缝开裂特性有效改善了混凝土延性差、韧性低、裂缝控制能力弱的缺陷, 极大提高其抗冲击特性和耐久性。目前 ECC 已被广泛用于砌体结构的加固且较多地区已颁布相应技术标准^[4], 同时在桥面板连接^[3, 5]、结构修复^[6]、抗渗加固^[7-8]和结构减震^[9]等方面也均获得良好应用。

尽管试验研究可获得真实试验数据, 但试验过程及结果分析耗时耗力^[10-11], 且试验结果与预定目

标可能存在巨大偏差, 而精确的试验数据是精准机理分析的基础。然而, 计算机模拟为精细分析水泥基复合材料工作机理提供了重要研究工具, 有助于更好理解使得水泥基复合材料具备特殊性能的深层次原理。同样, 为提高 ECC 试验效率、精确预测其试验结果, 并从不同尺度分析相关参数的影响规律, 众多国内外学者^[12-14]依据不同尺度计算机模拟技术各自的优势针对 ECC 拉伸过程中的纳、介、宏观开裂特性进行了一定研究, 但鲜有对 ECC 不同尺度模拟方法的特点、区别及关联性进行系统归纳总结。

ECC 拉伸开裂行为的多尺度模拟可根据原材料特性预测拉伸应变硬化行为, 作为配合比设计的辅助工具, 极大节约时间、人力、物力成本。因此, 将分子动力学、数值(有限元)模拟、近场动力学及人工神经网络按纳、介、宏观 3 类尺度、4 类方法

收稿日期: 2024-07-19。 修订日期: 2024-09-08。

基金项目: 国家自然科学基金(U23A20673, 52478261, U22A20244); 中国博士后科学基金面上项目(2024M750580); 青岛西海岸新区科技计划惠民专项(2022-41, 2021-102); 青创科技支持计划(2021KJ045)。

第一作者: 雷东移(1986—), 男, 博士, 副教授。

通信作者: 李 莹(1988—), 女, 博士, 副教授。

Received date: 2024-07-19. Revised date: 2024-09-08.

First author: LEI Dongyi (1986—), male, Ph.D., Associate Professor.

E-mail: leidongyi@qut.edu.cn

Correspondent author: LI Ying (1988—), female, Ph.D., Associate Professor.

E-mail: liying@qut.edu.cn

分类概述其在 ECC 拉伸开裂行为模拟方面的研究现状(图 1^[15–33])。其中,分子动力学模拟可从分子或原子层面解释纤维–基体之间的物理或化学作用,分析纤维–基体界面结合能力进而阐释 ECC 的应变硬化行为;数值(有限元)模拟^[34–37]可被用于描述 ECC 的裂纹宽度和裂纹间距等开裂特征,并通过数值算法分析 ECC 中纤维、基体及其界面协同效应诱导的

应变硬化行为;近场动力学模拟在 ECC 应变硬化行为模拟方面的研究较少,在此概述其对普通及纤维增强混凝土在不同方向荷载作用下的开裂演化行为;人工神经网络可预测纤维增强混凝土的配合比参数与力学性能之间响应关系,为配合比设计提供依据;同时分析了 4 种模拟方法在 ECC 应变硬化行为研究中的不足,并展望未来发展方向。

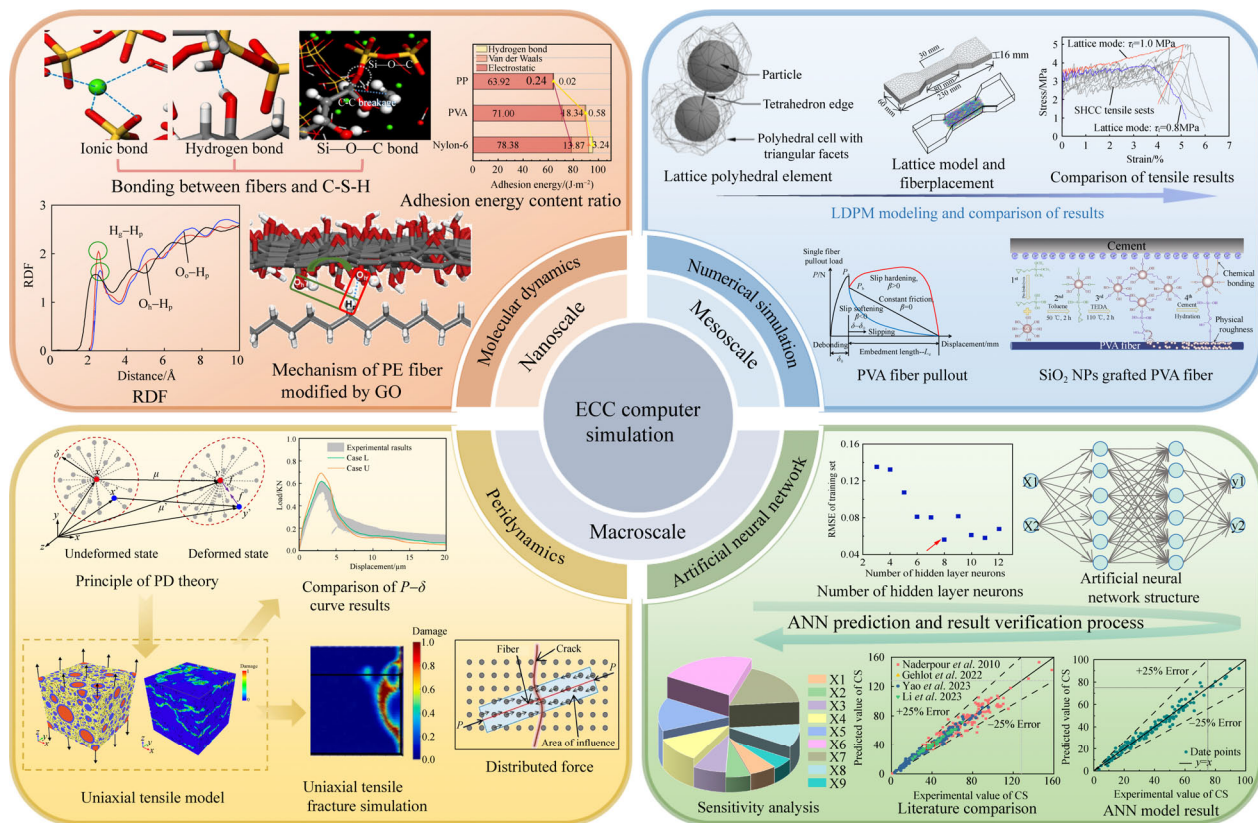


图 1 ECC 拉伸开裂行为的多尺度模拟概况^[15–33]

Fig. 1 Multi-scale simulation of ECC tensile cracking behavior^[15–33]

1 ECC 纤维–基体界面结合性能分子动力学模拟–纳观尺度

分子动力学(Molecular dynamics, MD)模拟基于牛顿经典力学模拟分子运动、计算分子间的相互作用力,从分子或原子层面解释和展示异相物质间的物理、化学作用过程,越来越多的学者将其用于展示纤维、基体及其界面间的相互作用。

适当的纤维–基体界面结合强度是实现纤维增强效果的基础,一旦纤维因弱粘结而从水泥基体滑脱,或因强粘结而被过早拔断,将无法起到增强效果,有时需对纤维进行表面改性以达到适当的纤维–基体界面结合性能。纤维与水泥水化产物水化硅酸钙(calciumsilicate-hydrate, C-S-H)凝胶之间的界面结合主要通过二者之间形成聚合物、静电作用、化

学键、氢键和 van der Waals 力而实现,而分子动力学模拟为不易通过试验手段展示的纤维–基体界面结合性能提供了一种有效、直观的研究方法,有力支撑研究者从“纳观→介观→宏观”多尺度角度分析“纤维–基体键合成因→纤维桥联能力发挥→ECC 多缝开裂特性呈现”的跨尺度应力传递过程。

1.1 未改性纤维–基体界面结合性能的分子动力学模拟

MD 模拟可从分子或原子层面解释聚合物形成、静电及化学键等作用致使纤维–基体界面结合性能增强的根本原因。Shalchy 等^[29]提出了纤维/C-S-H 的界面分子模型(图 2a),发现官能团主要通过改变界面处 C-S-H 的 C/S 比(图 2b),及吸收 C-S-H 凝胶中额外的 Ca 离子来影响粘附能(图 2c),且纤维与 C-S-H 凝胶之间的粘附能主要由静电作用所致(图 2e)。

Zhou 等^[22]采用 MD 模拟研究聚合物纤维加入 C-S-H 凝胶夹层后的界面相互作用,发现形成的 Si—O—C 键(图 2d)可桥接相邻硅酸盐片层,致使纳米复合材料的层间区域得到加强,延展性也相应提高。Wang 等^[10]利用 MD 模拟分析聚乙烯醇(Polyvinyl alcohol, PVA)、聚丙烯酸(Polyacrylic acid, PAA)等聚合物纤维与 C-S-H 凝胶之间的界面结合性能,发现界面中的 Ca 原子、C-S-H 凝胶、纤维三者可在界面处形成 $O_{CSH}-Ca-O_{polymer}$ 聚合物,从而起到键合作用,同时聚合物纤维与 C-S-H 凝胶可形成氢键以进一步增强

界面结合性能(图 3)。

除静电作用、聚合物和氢键对纤维-基体界面结合性能的贡献外,纤维表面的其它含氧基团均对其具有一定贡献,樊其昌等^[38]利用 MD 模拟在原子尺度上发现具有羧基的纤维素纳米晶须与水泥基体的吸附性能强于具有羟基的纤维素纳米晶须,并试验证实了该现象。由于羧基的氢键结合能力比羟基高 1.5 倍^[39],因此纤维表面的羧基比羟基更易与 C-S-H 凝胶结合,形成更致密的界面结构,有效支撑了纤维与基体界面的结合能力。

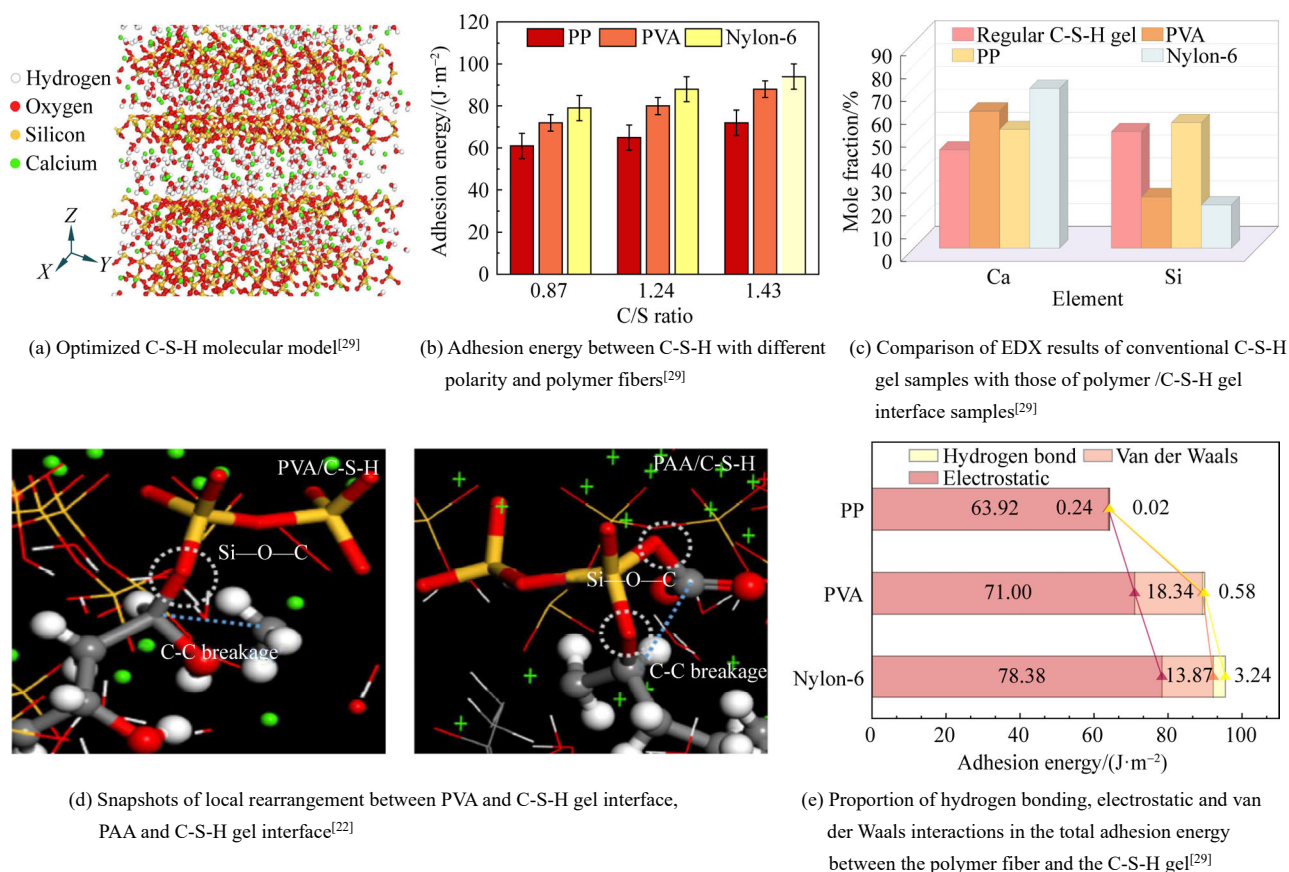


图 2 C-S-H 分子模型及键能展示

Fig. 2 C-S-H molecular model and bond energy display

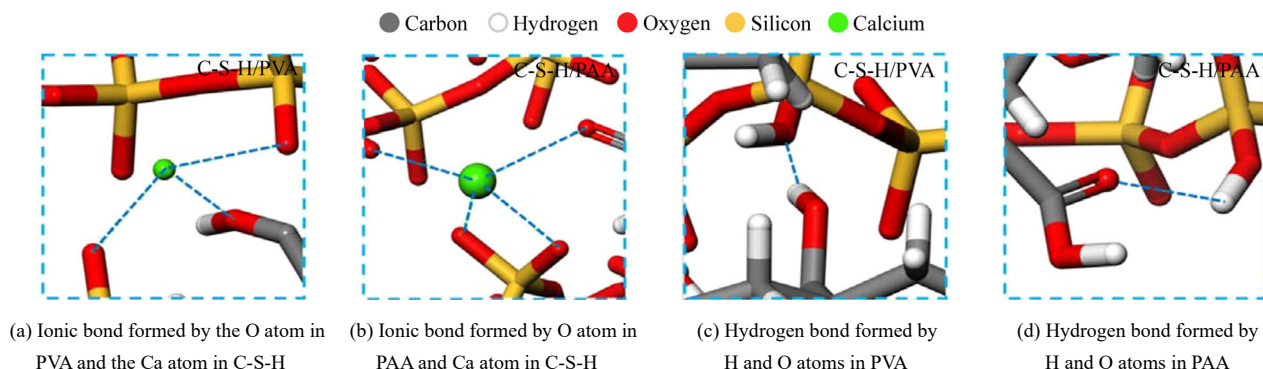


图 3 C-S-H 与 PVA 或 PAA 的键合作用^[10]

Fig. 3 Bonding of C-S-H with PVA or PAA^[10]

1.2 改性纤维-基体界面结合性能的分子动力学模拟

对纤维表面改性是调控纤维-基体界面性能的常用方法,可通过纳米接枝机理增强纤维-基体间的物理或化学作用。He 等^[40]通过疏水作用原理^[41]将碳纳米纤维(Carbon nanofibers, CNFs)接枝于(聚乙烯(Polyethylene, PE)纤维表面,借助 CNFs 填充纤维-基体界面处的纳米孔并增强对纳米裂缝的桥接效应,从而有效提高了纤维-基体界面结合强度。径

向分布函数(Radial distribution function, RDF)表示某粒子依据给定粒子坐标所得出的空间分布几率,可用来表征原子间的空间相关性,进而分析其成键情况,有助于理解界面结构。Lu 等^[15]利用 MD 模拟基于原子间的 RDF 所出现的尖锐峰(图 4a~图 4c)而判定 PE 纤维涂覆氧化石墨烯(Graphene oxide, GO)后在 C-S-H/GO 和 GO/PE 界面处均形成了新的分子间氢键,界面键能的提高减弱了 C-S-H 凝胶与 PE 纤维之间的相对运动(图 4d),使 PE 纤维较难拔出。

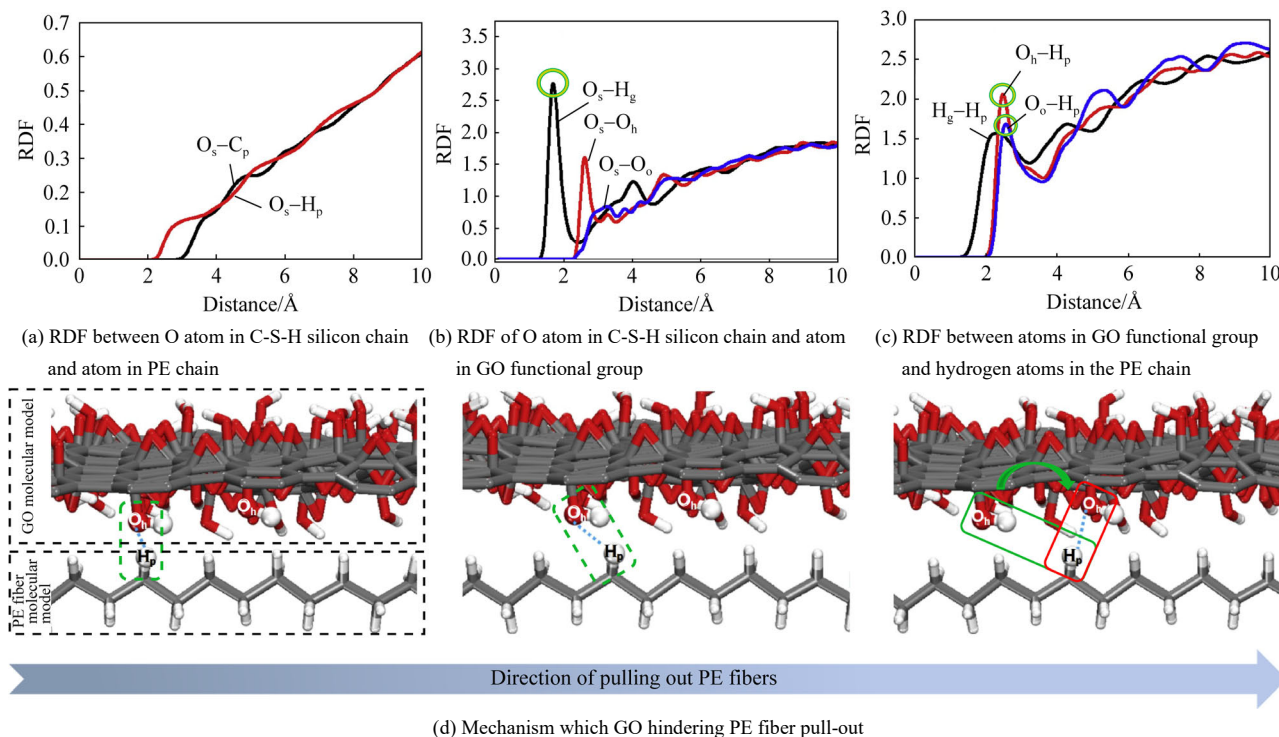
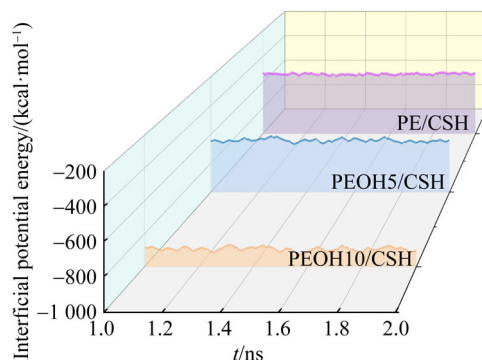


图 4 C-S-H 硅链、GO 官能团与 PE 链三者原子间的 RDF 及 GO 改性 PE 纤维作用机理^[15]

Fig. 4 Radial distribution function (RDF) between atoms of C-S-H silicon chain, GO functional group and PE chain, the mechanism of GO modified PE fiber^[15]

也可在纤维表面接枝含氧官能团实现对其改性,可通过高级氧化工艺(Advanced oxidation processes, AOPs)将含氧官能团接枝到 PE 纤维表面以激活表面特性。Lu 等^[42]通过 MD 模拟发现经 AOPs 处理后,在 PE 纤维与 C-S-H 界面处形成了新的氢键,使二者之间的界面势能大大提高(图 5),促进更致密界面结构的形成,有利于 ECC 延性的提高。Huang 等^[39]利用 MD 模拟发现接枝到碳纤维(Carbon fiber, CF)表面的含氧基团($-\text{OH}$, $=\text{O}$ 和 $-\text{COOH}$)可与 C-S-H 凝胶形成较强的 van der Waals 力,同时,羟基和羧基因较高的电负性可与 C-S-H 凝胶中的氧原子形成更强的氢键,增强界面结合强度。纤维改性极大优化了纤维-基体界面结合性能,对 ECC 拉伸延性的实现至关重要,MD 模拟可直观



PEOH5 is the PE fiber containing 5% hydroxyl after AOPs treatment, and PEOH10 is the same as above; 1 kcal=4 185.85 J.

图 5 MD 模拟经 AOPs 处理前后的 PE 纤维与 C-S-H 之间的界面势能^[42]

Fig. 5 Interfacial potential energy between the PE fiber before and after AOPs treatment and C-S-H by MD simulation^[42]

演示纤维-基体界面键合作用, 有效弥补分子/原子间作用不可视的弊端。

2 ECC 应变硬化行为数值(有限元)模拟-介观尺度

针对 ECC 有限元模拟从以原材料配比主导的简单宏观力学性能数值模拟, 逐步过度为针对细观力学的精细化有限元(Finite element method, FEM)模拟, 在细观层面展示纤维、基体及其界面间协同效应对 ECC 应变硬化多缝开裂力学性能的影响规律, 进一步建立与原材料特性之间的联系, 从而为配合比设计及原材料选择提供反向指导。

2.1 纤维特性对 ECC 应变硬化行为影响的数值(有限元)模拟

纤维种类、分布情况、表面特征等特性均会对 ECC 的拉伸性能产生影响, 不同的纤维表面物理化学特性导致了不同的纤维-基体界面特性及不同的单根纤维拔出行为, 以至不同的宏观拉伸力学性能。当前用于分析纤维特性对 ECC 拉伸性能影响的数值(有限元)模型已有多种, 其中, 晶格离散粒子模型最为普遍。

2.1.1 分析纤维特性对 ECC 应变硬化行为影响的

晶格离散粒子模型 晶格离散粒子模型(Lattice discrete particle model, LDPM)通过三维多面体粒子组合来模拟准脆性材料的细观结构, 然后利用 LDPM-F 模块(F 指对单根纤维进行建模)研究纤维的增强效果^[26](图 6a~图 6d)。Luković 等^[17]通过 LDPM-F 模型发现纤维增强水泥基复合材料(Fiber reinforced cementitious composite, FRCC)的微裂纹分布状态和延性优于非增强水泥基材料, 数值模拟结果与试验一致。Jin 等^[16]利用 LDPM 模型研究不同纤维类型(钢纤维和有机纤维)及含量对棱柱体试件力学性能的影响, 发现 LDPM-F 模型可精确分析不同类型纤维的增韧特性及机理。Feng 等^[2]利用 LDPM-F 模型成功预测了 ECC 的拉伸多裂缝特征(图 6e), 模拟结果显示 18 mm 长 PVA 纤维 ECC 的拉伸力学性能最佳。LDPM-F 模型对单根纤维的表征为模拟纤维分散特性对 ECC 开裂行为及其它性能的影响提供了机会, 但该模型假定纤维为随机分散, 未涉及纤维不同分散率(低、中、高)对开裂特性的影响差异, 致使模拟结果较为固定。

2.1.2 分析纤维特性对 ECC 应变硬化行为影响的其他数值(有限元)模型 除 LDPM-F 模型外, 基于细观力学的数值(有限元)模型也被用于模拟 ECC 的多缝开裂和应变硬化行为。吴畅等^[44]发现相较于

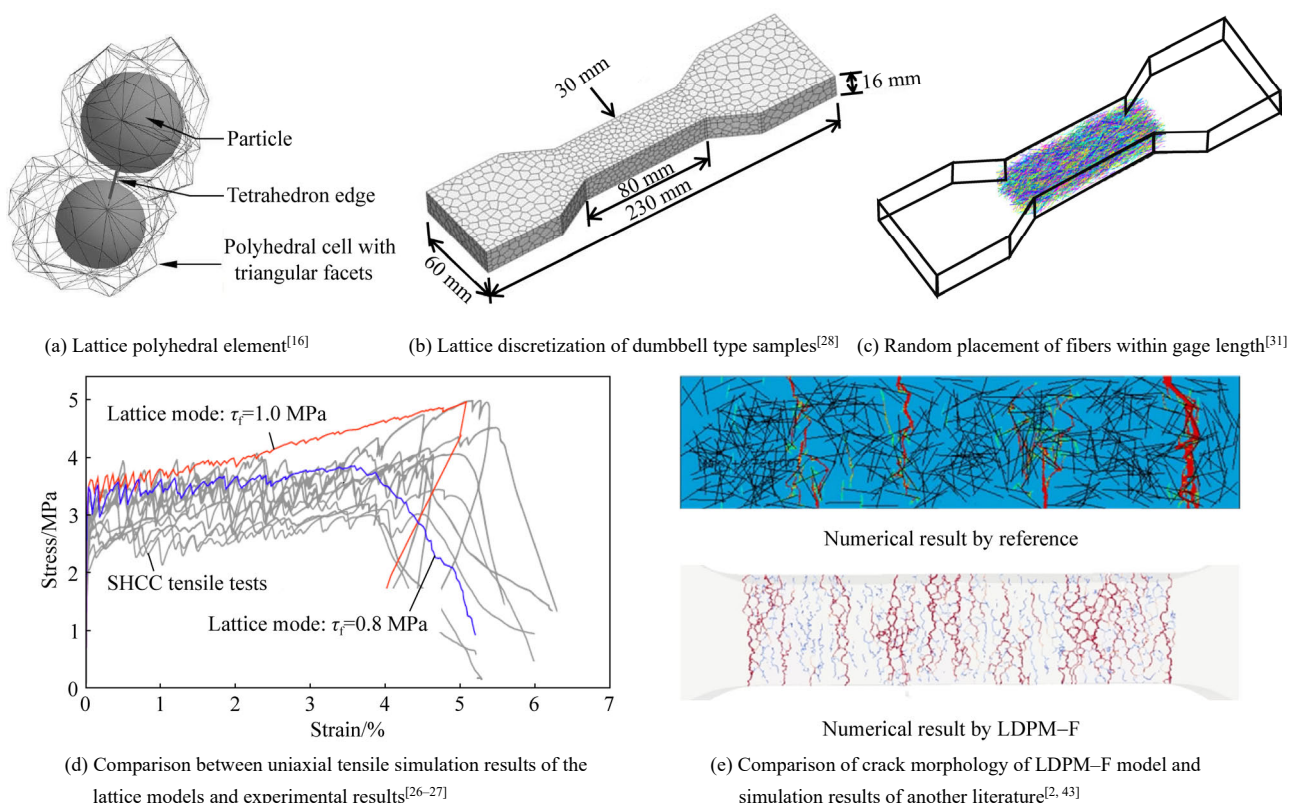


图 6 LDPM 建模及结果对比

Fig. 6 LDPM modeling and result comparison

摩擦滑轮模型, 所提出的等效地基梁模型因较高的峰值桥接应力致使所预测的极限拉伸强度和极限拉伸应变都更高(图 7), 且 2 种模型预测的 PE-ECC 极限拉伸强度都高于 PVA-ECC 的, 但预测的 PVA-ECC 极限拉伸应变反而高于 PE-ECC 的。此外, Kang 等^[45]在 LDPM-F 模型基础上进一步利用分布力方法^[31] (可表征非线性滑移特征)建立了应变硬化水泥基复合材料(Strain-hardening cementitious composites, SHCC)的多尺度模型, 发现纤维的不均匀分散降低了极限拉伸强度和极限拉伸应变。Zhang 等^[46]建立 I 型裂纹扩展模型以研究纤维含量对拉伸裂纹数量和形状的影响, 发现纤维含量达到 1%时, FRCC 开始出现显著的应变硬化行为。Krahl 等^[47]基于不同纤维含量超高性能纤维增强混凝土(Ultra-high performance fiber reinforced concrete, UHPFRC)的循环拉伸性能, 建立了塑性损伤数学本构模型, 将其用于预测拉伸过程中的损伤演变和循环包络线。

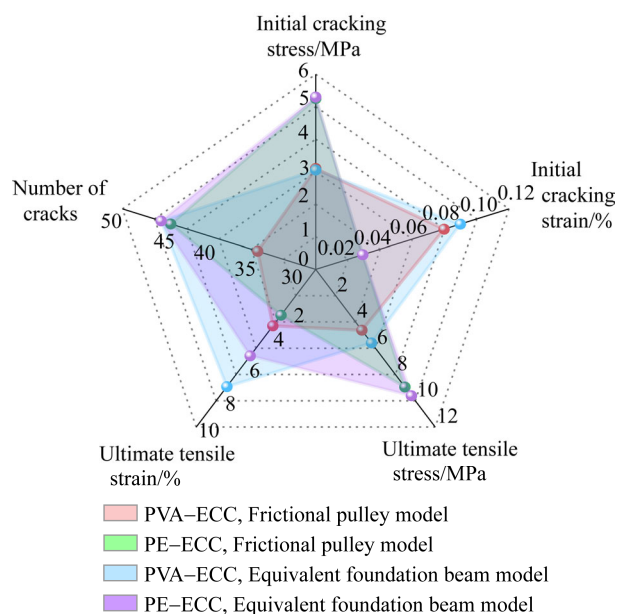


图 7 摩擦滑轮模型和等效地基梁模型对 PVA-ECC 和 PE-ECC 单轴拉伸模拟结果的对比^[44]

Fig. 7 Comparison of relevant parameters between friction pulley model and equivalent foundation beam model for the uniaxial tensile simulation results of PVA-ECC and PE-ECC materials^[44]

利用数值(有限元)模拟可根据原材料特性预测 ECC 应变硬化状态, 为配合比设计提供一定反向指导, 但主导 ECC 应变硬化行为的纤维桥联效应是纤维在水泥基材料中的掺量、分散性、取向、纤维-基体界面特性等性能的综合表现, 当前鲜有能将水

泥基体特性与纤维分散性及纤维-基体界面性能建立精确联系的 ECC 应变硬化多缝开裂数值(有限元)模型。

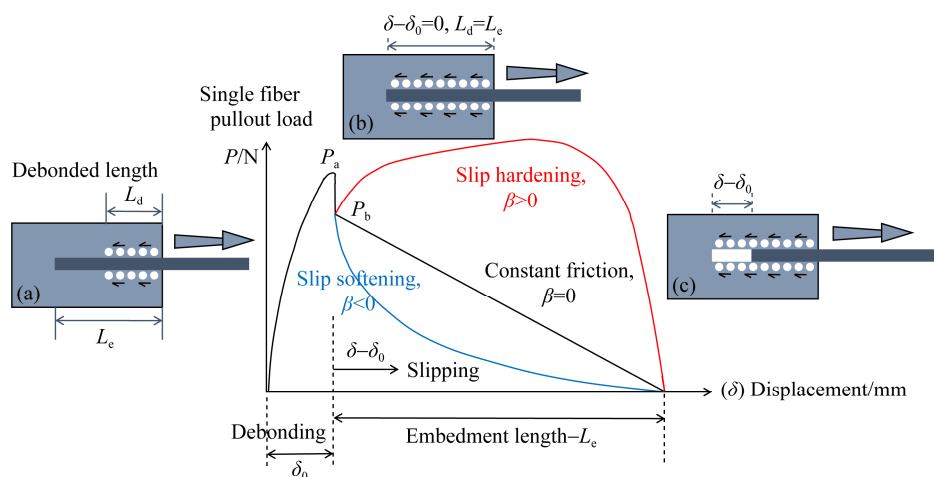
2.2 基体特性对 ECC 应变硬化行为影响的数值(有限元)模拟

水泥基体的密实度决定了自身的断裂韧度和纤维-基体界面结合强度, 进一步决定了 ECC 的初裂应力, 也即实现应变硬化行为的门槛。为高效分析颗粒紧密堆积程度、内部孔结构、基体断裂韧度、拉伸强度等基体特性对 ECC 应变硬化行为的影响规律, 一些学者有针对性的建立了与之相关的数学本构模型和裂纹扩展有限元模型。

阐释裂缝饱和度的经典 ECC 理论认为, 硬化试样中的孔隙等缺陷是新裂缝生成的启动器, 缺陷的尺寸和数量则是关键影响因素。Spagnoli 等^[48]基于 ECC 中缺陷(孔隙)尺寸的空间分布随机性, 提出了一种估算 ECC 拉伸应变能的微观力学数学本构模型, 并利用二维晶格有限元模型模拟 ECC 在拉伸载荷下的裂缝扩展状态^[49], 发现拉伸应变随孔隙最小尺寸的增大而增大。Zhang 等^[46]利用 I 型裂纹扩展模型也验证了水泥基体中初始缺陷尺寸的增大会增强 FRCC 的应变硬化行为和多缝开裂潜力, 并发现水泥基体断裂韧度的降低会增加 FRCC 多缝开裂的几率, 且该模型被认为是一个更准确描述 FRCC 开裂过程的方法。Kunieda 等^[50]通过一种用于分析 SHCC 三维断裂的数值模型发现 SHCC 的应变能力随基体拉伸强度的降低而提高。对于颗粒紧密堆积程度, 通常利用离散元(Discrete element method, DEM)建模以研究颗粒填充效果, 然后将微观尺度上的颗粒离散特征与宏观尺度上的连续有限元方法相结合以有效克服了传统有限元方法建模的困难, 但目前还未有从颗粒紧密堆积程度出发建立水泥基材料拉伸特性有限元模型报道。

2.3 纤维-基体界面特性对 ECC 应变硬化行为影响的数值(有限元)模拟

ECC 优异的拉伸延性源于纤维与水泥基体协同作用下的纤维桥联能力, 而纤维桥联能力的发挥又依赖于纤维-基体的界面粘结性能^[51], 因此, 了解纤维-基体界面特性对于分析 ECC 应变硬化行为至关重要。纤维-基体界面特性对 ECC 应变硬化行为的影响通过纤维拔出过程中的应力传递实现, 单根纤维从水泥基体中的拔出过程可分为脱粘和滑移 2 个阶段(图 8), 可通过单根纤维拔出载荷-位移曲线计算出用于表征纤维拔出过程中纤维-基体界面

图 8 PVA 单根纤维拔出过程中的荷载-位移关系示意图^[32, 53]Fig. 8 Schematic diagram on the load-displacement during single PVA fiber pullout^[32, 53]

特性的化学粘结力(G_d)、界面摩擦力(τ_0)和滑移硬化系数(β)。

化学粘结力的计算如式(1)^[52]:

$$G_d = \frac{2(P_a - P_b)^2}{\pi^2 E_f d_f^3} \quad (1)$$

其中: G_d 为化学粘结力; P_a 为脱粘前的最大载荷, 纤维脱粘后进入滑移阶段; P_b 为初始滑移载荷; E_f 为纤维拉伸弹性模量; d_f 为纤维直径。

τ_0 为界面摩擦力, 计算如式(2):

$$\tau_0 = \frac{P_b}{\pi d_f L_e} \quad (2)$$

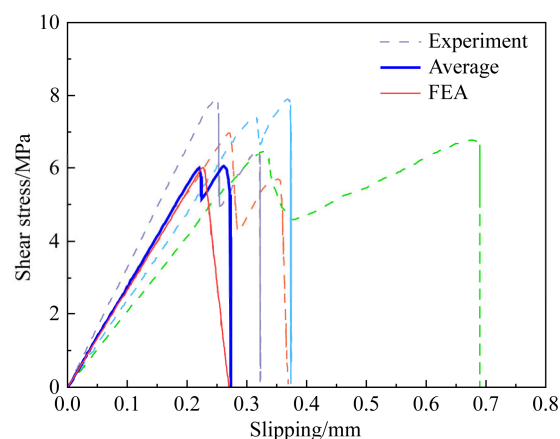
其中: L_e 为纤维埋入水泥基体的长度。

在滑移阶段, 根据纤维与水泥基体弹性模量的差异度, 滑移过程可表现为滑移硬化、滑移软化或恒摩擦应力 3 种行为, 为表征非线性滑移过程, 引入无量纲滑移硬化系数 β 来修正 τ_0 , β 的正值、负值和零则分别对应上述 3 种滑移类型, 计算如式(3):

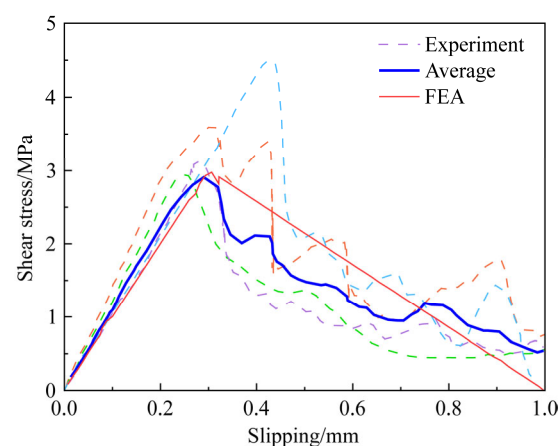
$$\beta = \left(\frac{d_f}{L_f} \right) \left[\left(\frac{1}{\tau_0 \pi d_f} \right) \left(\frac{\Delta P}{\Delta(\delta - \delta_0)'} \right)_{|(\delta - \delta_0)'} + 1 \right] \quad (3)$$

其中: L_f 为纤维长度; δ_0 为纤维完全脱粘时的位移。

以单根纤维拔出过程中纤维-基体界面特性和纤维受力-滑移位移关系为基础, 可建立模拟单根纤维拔出过程的数值(有限元)模型, 进一步分析 ECC 应变硬化行为。Arain 等^[54]利用数值(有限元)方法模拟 SHCC 单根纤维拔出过程(图 9), 发现对 PVA 油化处理后, 纤维-基体界面参数 G_d 和 τ_0 均下降, 并通过拉伸试验验证经油化处理的 PVA-SHCC 的极限拉伸应力和拉伸应变性能分别提高了 95% 和 64%。Zhang 等^[20]通过对比单根 PVA 纤维拔出的试



(a) Surface of the fiber is not treated



(b) Surface of the fiber is oiled

图 9 PVA 单根纤维拔出应力-位移关系的试验与有限元模拟结果对比^[54]Fig. 9 Comparison of the results of PVA single fiber pull-out shear stress-displacement test and finite element simulation^[54]

验和有限元模拟结果, 证实在 PVA 纤维上接枝 SiO_2 纳米颗粒(图 10)可提高纤维-基体界面参数 G_d 和 τ_0 ,

从而有效提高水泥基材料的强度及抗裂性。Park 等^[55]基于纤维-基体界面处剪切应力传递的数学本构模

型对纤维进行离散性表示,成功模拟了 SHCC 的直接拉伸行为和多重裂纹特性。

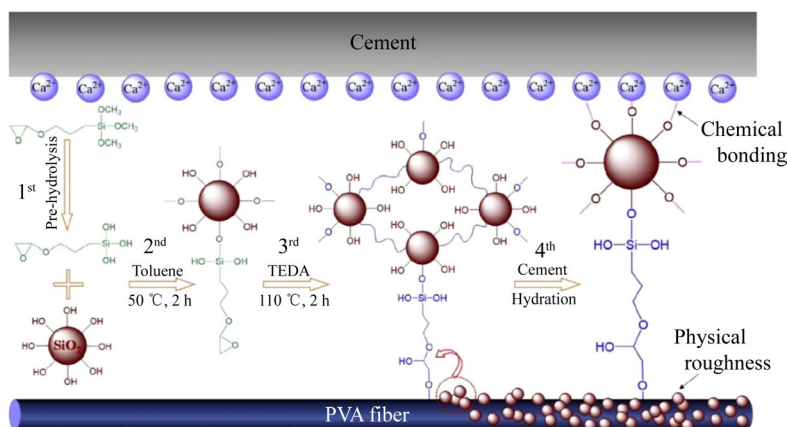


图 10 SiO₂ NPs 在 PVA 纤维上的接枝过程及水化后与水泥的界面强化示意图^[20]

Fig. 10 Schematic of the grafting procedure of SiO₂ NPs on PVA fibers and interfacial strengthening with cement upon hydration^[20]

另外,纤维埋入倾角和埋入深度对单根纤维拔出行为也具有较大影响。刘丰^[35]建立 FRCC 内聚力模型以模拟钢纤维-水泥基体界面粘结性能,发现拔出荷载随纤维埋入深度的增加而增大。Ranjbarian 等^[56]利用有限元模拟单根纤维拔出过程,解释了 PVA 纤维在水泥基体中的拔出应力与埋入深度不成比例。张鹏^[14]运用 ABAQUS 软件考虑纤维埋入倾角和平均埋入深度,建立纤维、基体两相三维有限元模型,探究 PVA-ECC 的应变硬化性能,霍彦霖^[57]在张鹏^[14]的基础上,进一步引入纤维临界埋入深度、摩擦和滑移效应等影响因素,建立了关于混杂纤维 ECC 的有限元模型。Zhu 等^[58]提出了一种用于预测 ECC 应变硬化和多缝开裂行为的微观力学分析模型,发现在纤维用量恒定时,PE-ECC 的拉伸延性主要由纤维-基体界面特性决定。

通过数值(有限元)模拟研究单根纤维拔出过程中纤维-基体界面特性,可从微观力学角度分析并建立与 ECC 宏观拉伸力学性能之间的联系。研究证实表面改性 PVA 纤维对 ECC 拉伸应变性能增强的可行性,引入纤维埋入倾角和埋入深度建立 ECC 的微观力学有限元模型,但对于纤维与水泥基体在相对运动时的荷载传递性质还需深入研究,进而引入到有限元建模中。

2.4 其它因素对 ECC 应变硬化行为影响的数值(有限元)模拟

除纤维、基体及二者之间的界面特性外,试样形状和尺寸对 ECC 拉伸应变硬化性能也有一定影响。目前关于 ECC 拉伸试样尺寸效应的数值(有限元)模拟方面的研究较少。Kesner 等^[59]对矩形棱柱体、

哑铃型和圆柱体试样分别进行单轴拉伸测试(图 11),发现最高的拉伸应变能力从哑铃型试样中获得,不同形状试样应变能力的差异归因于样品厚度、纤维排列分布和初始缺陷的差异。相关学者为了开发准确的 ECC 材料拉伸性能有限元模型,研究了 ECC 材料在不同尺寸和几何形状时的拉伸性能。Lu 等^[60]

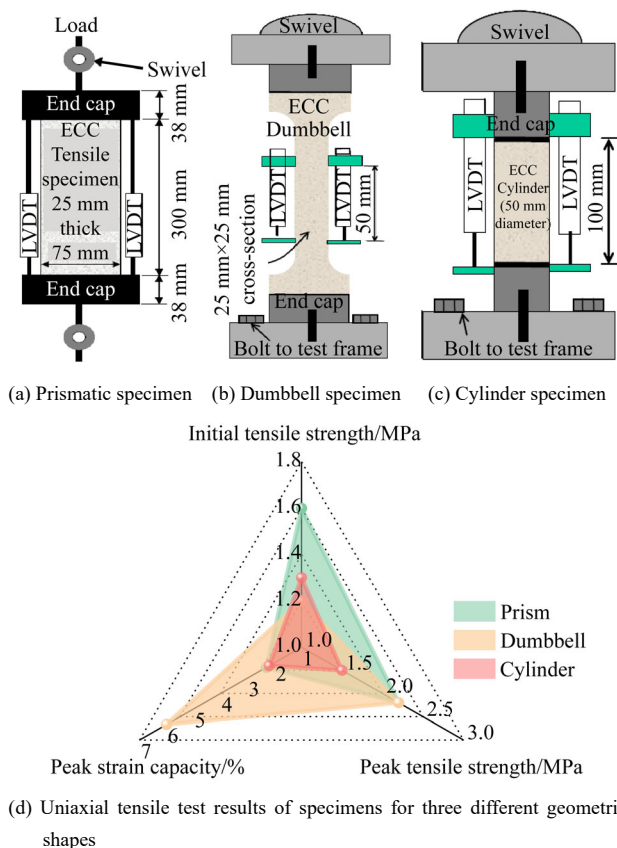


图 11 ECC 单轴拉伸测试试样示意图^[59]

Fig. 11 Schematic diagram of ECC uniaxial tensile specimens^[59]

利用数值模型模拟多缝开裂过程,发现 ECC 的拉伸强度和延性随试样厚度的增加而降低, Wu 等^[61]进一步试验验证了该现象,并发现拉伸强度和延性随试样宽度的增加同样降低。Zhao 等^[62]依据 280 mm×40 mm×13 mm 的薄板试件建立了 ECC 单轴拉伸损伤数学本构模型,并将其应用于高强度不锈钢钢丝绳增强 ECC 哑铃型试样的拉伸性能有限元分析,证明了该模型的有效性。

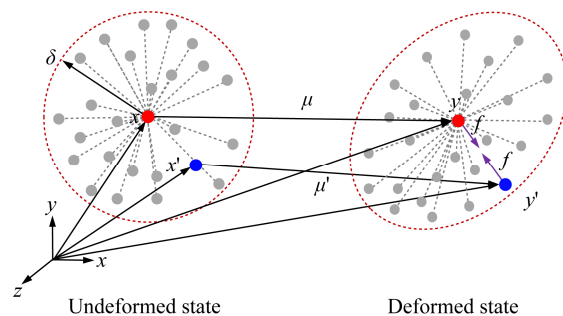
试件的形状和尺寸均会对 ECC 应变硬化性能产生影响,目前较多学者利用哑铃型试样进行水泥基材料的拉伸测试,但如果直接利用哑铃型试样拉伸测试结果进行模型建立,而忽略其中的纤维精细化分布参数、缺陷数量及分布情况对拉伸性能的影响,很可能导致结构应用中 ECC 应变硬化能力的过高估计。因此,需考虑纤维排布和内部缺陷分布情况,以建立更加准确的 ECC 拉伸本构模型。

3 混凝土开裂行为近场动力学模拟—宏观尺度 1

混凝土在浇筑、成型等过程中一些不可避免的缺陷进一步加大其脆性特性,促使过早开裂脆断。尽管 FEM、有限差分法(Finite difference method, FDM)、边界元法(Boundary element method, BEM)等数值(有限元)模拟可针对混凝土的连续开裂及脆断进行理论分析和预测,但针对裂纹引起的不连续开裂模型的构建则变得异常复杂^[63],扩展有限元法(Extended finite element method, XFEM)虽能解决裂纹的不连续问题,但在分析几何非线性问题时存在缺陷^[64]。

近场动力学(Peridynamics, PD)理论是由 Silling^[65]提出的一种新型数值模拟方法,研究质点 x 与其影响范围内其它质点 x' 间的相互作用(图 12),从而基于非局部作用建模,通过空间积分方程(而非偏微分方程)有效避免了传统 FEM、FDM 和 XFEM 等模拟在解决断裂问题时需对位移场微分的操作^[66],已被广泛应用于分析损伤破坏等不连续问题。但针对 ECC 的拉伸多缝开裂行为,PD 模拟研究较少,在此概述了普通及纤维增强混凝土在不同方向荷载作用下的开裂演化行为,以期 PD 理论在 ECC 拉伸开裂行为模拟方面的应用提供借鉴。

目前,针对普通及纤维增强混凝土在不同方向荷载作用下开裂演化行为的 PD 模拟已被广泛报道^[67-70],Hou 等^[18]利用 PD 理论,通过改变水灰比、养护龄期、加载方向等参数模拟水泥浆体在单轴拉



δ represents the near-field range; μ and μ' represent the deformation displacement of x and x' , respectively; y and y' represent the position vectors of particle x and x' under deformation, respectively; f represents the force density vector acting on the particle.

图 12 PD 中材料质点 x 与质点 x' 之间的相互作用^[21]

Fig. 12 Interactions between material points x and x' in PD theory^[21]

伸作用下的宏观力学性能和微裂纹扩展过程(图 13a~图 13b),证明该方法有效可行,并利用 PD 模拟进一步^[71]解释了水泥浆体的荷载-位移响应和断裂过程,证实试验与模拟结果一致(图 13c)。Khosravani 等^[19]利用 PD 模拟超高性能混凝土(Ultra-high performance concrete, UHPC)在动态压缩载荷下的断裂过程(图 14a),Yan 等^[72]基于 PD 理论、通过三维中尺度方法模拟 UHPC 在单轴拉伸和单轴压缩作用下的断裂过程(图 14b~图 14d),均证实 PD 模拟可预测其裂纹扩展路径。PD 模拟不仅能够处理不连续破坏问题,其裂纹可自然萌生并自由扩展,不依赖网格建立,且允许多条裂纹同时扩展,体现了 PD 模拟在水泥基材料裂纹随机扩展及不连续开裂建模中的优势。

再者,Cheng 等^[30]基于 PD 理论对纤维与基体之间的相互作用进行建模,采用分布力方法表示纤维受力情况(图 15),建立了 ECC 半离散模型以研究其不连续性开裂过程,接着对 ECC 板单轴拉伸试验结果与模拟结果比较,证明了该 PD 模型的准确性。Zhang 等^[11]提出一种全离散的 PD 理论分析方法,将其用于模拟 FRCC 的拉伸断裂行为,Gu 等^[73]基于 PD 理论提出了一种改进型的隐混混合计算框架,可用于预测 FRCC 的开裂行为及应力-应变曲线、最大拉伸应变等宏观力学性能,为 FRCC 的 PD 多尺度建模提供研究基础。描述 FRCC 开裂行为的 PD 建模方法是将纤维、基体、纤维-基体界面单独建模以分析不连续开裂问题,针对多缝开裂过程中纤维与基体之间的应力传递作用鲜有涉及,针对水泥基复合材料微/宏观不连续力学的求解精度还需进一步提高。

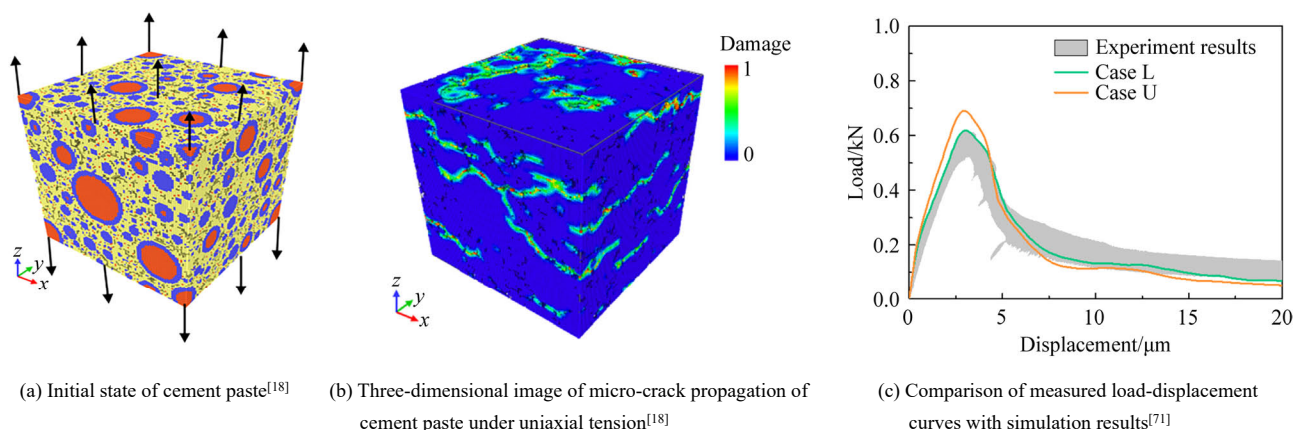
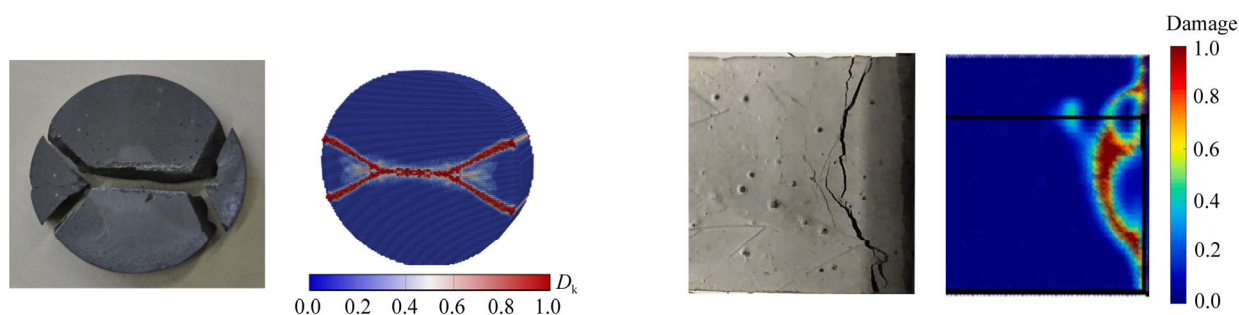


图 13 水泥浆体 PD 模拟

Fig. 13 PD simulation of cement paste



D_k /Damage represents the crack failure state, and the color gradient from blue to red indicates that the failure mode gradually increases.

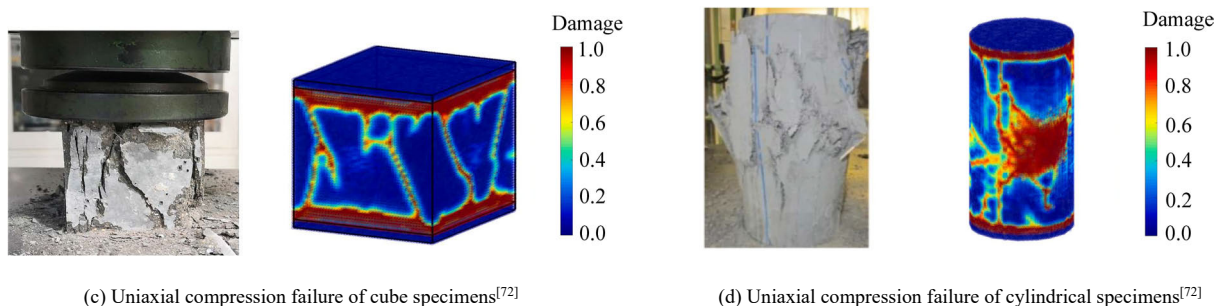
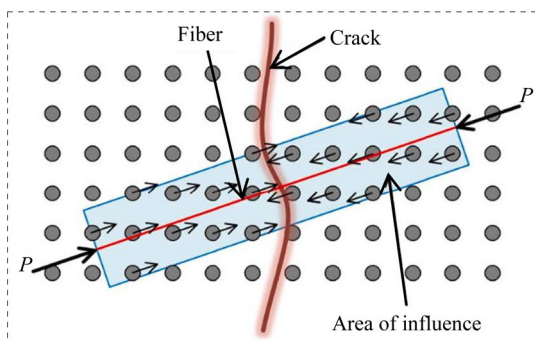


图 14 UHPC 的试验与 PD 模拟结果对比

Fig. 14 Comparison of UHPC test and PD simulation results

图 15 半离散模型中纤维按分布力方法的受力情况^[30]Fig. 15 Stress distribution of fibers according to the distributed force method in the semi-discrete model^[30]

4 预测 ECC 力学性能指标的人工神经网络(ANN)-宏观尺度 2

人工神经网络(Artificial Neural Networks, ANN)是一种受人脑学习能力启发的信息处理范式,通过一组互连神经元来反映大量输入和输出信息之间复杂的非线性和不确定关系。典型的多层前馈神经网络由输入层、1个或多个隐藏层及输出层组成,每1层通过互连的神经元相互发送消息,其中隐藏层神经元的数量由多次试验来确定^[74]。

ANN 因对未知、非线性、难处理的输入与输出

数据之间相互关系的强大处理能力,在 ECC 的拉伸强度、拉伸应变、抗压强度等基本力学特性预测方面已有一定研究,但更多被应用于对普通混凝土的配合比设计及纤维增强混凝土(Fibre reinforced

concrete, FRC)力学性能等指标的预测。同时,将 ANN 与遗传算法(Genetic algorithm, GA)联合^[75-77](图 16)以预测某一目标如抗压强度、坍落度、粘结强度等,可极大提高预测精度。

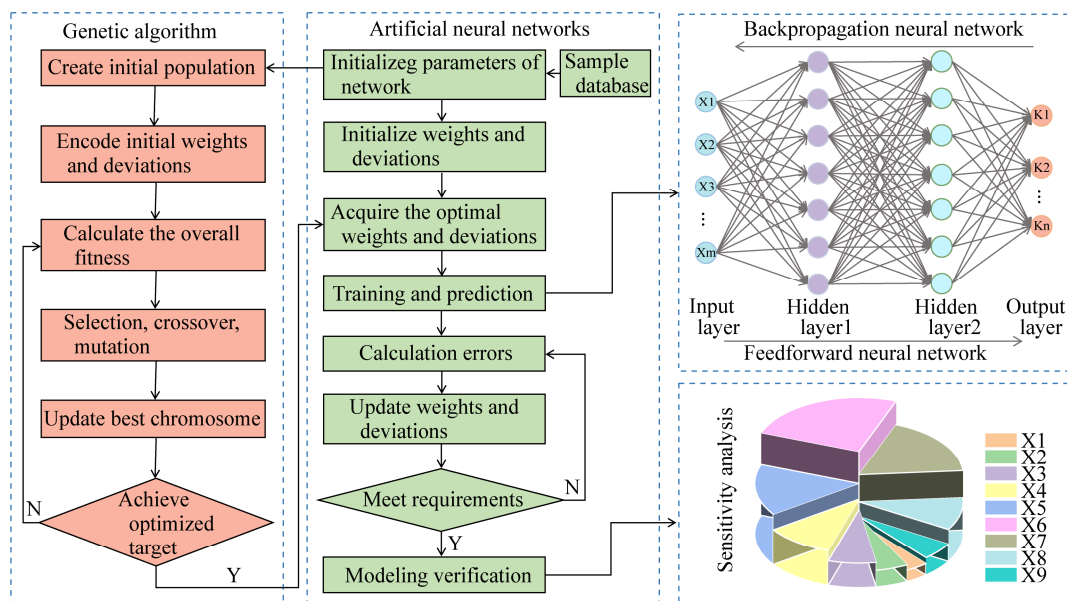


图 16 基于遗传算法的人工神经网络求解过程^[75-77]

Fig. 16 Solution process of artificial neural network based on genetic algorithm^[75-77]

4.1 ANN 在 ECC 力学性能指标预测方面的应用

当前,将 ANN 用于 ECC 性能指标预测的研究正陆续展开。Shi 等^[78]利用 ANN 预测了 ECC 的拉伸强度、拉伸应变等拉伸性能指标,证实了 ANN 在 ECC 性能预测方面切实可行。Shanmugasundaram 等^[79]利用 ANN 预测了含有粉煤灰和粒化高炉矿渣 ECC 的抗压强度,其结果与试验结果较为一致。Nasir Uddin 等^[80]基于 ANN 预测了 PVA-ECC 的抗压和抗拉强度。Yu 等^[81]利用 ANN 预测了 ECC 的拉伸性能,成功建立了 ECC 的配合比设计模型。

ANN 对 ECC 力学性能指标的预测证实该模型可用于 ECC 性能优化设计。但总体而言,ANN 关于 ECC 拉伸特性预测的研究仍较少,关于裂缝宽度、裂缝数量、应变硬化能量、应变硬化指数等微观力学特性指标的预测未见报道。

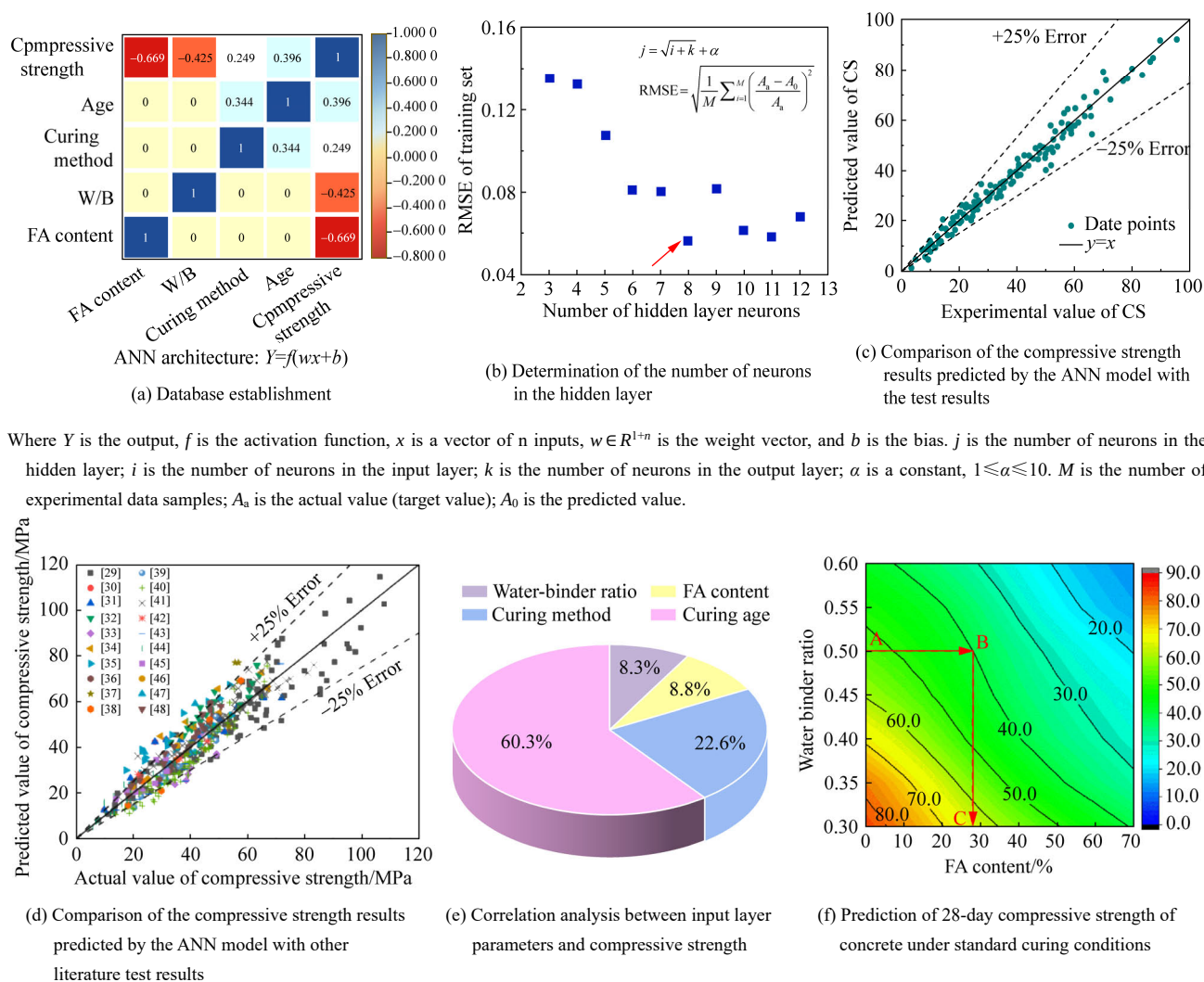
4.2 ANN 在混凝土配合比优化、纤维增强混凝土(FRC)力学性能预测方面的应用

4.2.1 ANN 在混凝土配合比优化设计方面的应用 早在 10 多年前,众多学者基于原材料特性对混凝土性能的不同影响,便利用 ANN 预测优化混凝土配合比,从而节约了大量试错成本。Ji 等^[82]基于当量水灰比、细骨料颗粒体积分数等 5 个参数,利用 ANN

提出了一种混凝土配合比设计算法,有效减少试错次数,节省成本、劳动力和时间。闫康^[83]综述了多人利用 ANN 基于多种原材料参数预测混凝土的配合比,均有效缩短了试验设计时间。Açıkgenç 等^[84]发现具有多输出参数的单个 ANN 系统可用于钢纤维增强混凝土(Steel fiber reinforced concrete, SFRC)的混合设计。Yao 等^[33]基于 ANN 提出了多因素耦合作用下的等强度大体积粉煤灰混凝土关键配合比参数设计方法(图 17)。李战国等^[24]利用 ANN 预测混凝土的抗压强度,得到了抗压强度与配合比的函数关系,并利用 GA 得到以经济性为目标的优化配合比。

随着大数据时代的发展,在未来,根据输入层与输出层数据的不断扩充和复杂化,ANN 模型也将不断更新,以便更加精确的输出预测结果。

4.2.2 ANN 在 FRC 力学性能预测方面的应用 在纤维增强混凝土领域,ANN 及由此引申的神经网络可根据特定数据库预测某一目标如抗剪强度、抗压强度、抗拉强度等,其预测结果比传统软件工具更加精确可靠。Hossain 等^[85]发现使用 ANN 模型可以精准预测中等到超高强度 SFRC 梁的抗剪强度。Ikumi 等^[86]开发多层感知器神经网络以预测 FRC 的



Literature marked in Fig. 17(d) is from the literature^[33], not the literature cited in this article.

图 17 ANN 模型预测混凝土配合比设计方法的步骤^[33]

Fig. 17 Steps of predicting concrete mix design method by ANN model^[33]

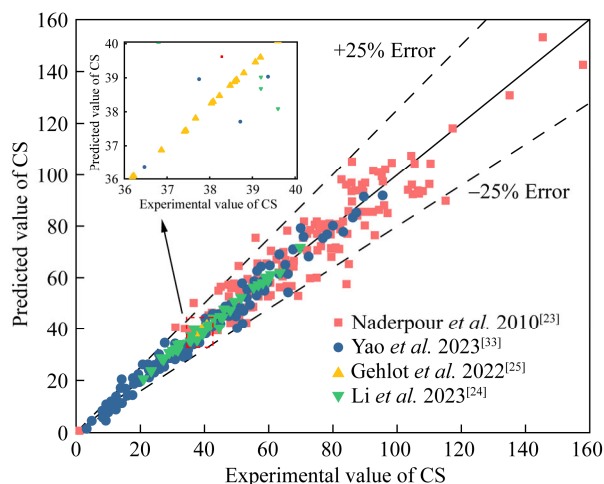
开裂后拉伸强度。多名学者^[23, 25, 87–88]均证明了 ANN 可精准预测 FRC 的抗压强度(图 18)。Rahman 等^[89]基于 ANN 准确预测了玄武岩纤维增强自密实地质聚合物混凝土梁在各种暴露条件下的弯曲强度。Hemmatian 等^[90]利用 ANN 建立了预测纤维最大拉拔应力和相应粘结滑移位移的计算模型,通过灵敏度分析确定了纤维的形状和拉伸强度对输出层的影响最大。

另外, Tsai 等^[91]提出了一种基于理论指导的机器学习框架,可将界面内聚效应纳入有限元分析,能够根据数据深度训练神经网络,从而预测 SFRC 的应力–应变曲线。人工神经网络基于数据库规模对 FRC 的特定指标进行预测,随着数据库的不断更新补充,影响因素随之增加,ANN 也将更好的用于预测设计 FRC。

4.3 ANN 联合遗传算法(GA)在 FRC 方面的应用

ANN 联合 GA 可有效提高对混凝土抗压强度、坍落度、界面粘结强度等性能指标的预测精度。利用 GA 的随机搜索能力来优化 ANN 的初始最优权重和偏差,从而最小化神经网络陷入局部最小值的概率并使其缓慢收敛到全局最优,使 ANN 模型精度更高,预测结果更准确。

Yuan 等^[92]利用 GA 优化 ANN 以预测混凝土的抗压强度,其结果在实际生产中较传统回归模型更精确。Chandwani 等^[77]将 ANN 与 GA 混合,经训练的混合模型可用于快速给定所设计混凝土的坍落度。Yan 等^[75]通过 ANN 与 GA 联合对玻璃纤维增强聚合物(Glass fibre-reinforced polymer, GFRP)与混凝土的锚固性进行可靠性分析,并预测 GFRP 棒与混凝土的粘结强度^[76],证实其预测精度比传统 ANN



CS refers to compressive strength.

图 18 ANN 模型预测的抗压强度与文献试验结果对比^[23-25, 33]
Fig. 18 Comparison between the predicted compressive strength results of ANN model and the experimental results in the literature^[23-25, 33]

模型更高。Su 等^[93]建立反向传播(Back Propagation, BP)神经网络以预测混凝土表面所嵌贴的碳纤维增强复合材料板条与界面的粘结强度,其预测结果与试验结果吻合较好。

研究表明,利用 GA 优化 ANN 可以提高人工神经网络的收敛速度和预测精度。但在某些方面如界面粘结强度,所收集数据的多样性可能会导致预测结果的偏差,所以需要进行更多试验来研究影响粘结强度的因素从而使预测结果更加精确。

5 结论与展望

ECC 具有显著的拉伸应变硬化特性,本文将分子动力学、数值(有限元)模拟、近场动力学和人工神经网络 4 种模拟技术按纳、介、宏观三类尺度阐述其在 ECC 拉伸开裂行为方面的研究和应用现状:

1) 纳观尺度-分子动力学: MD 模拟可有效弥补分子/原子间作用不可视的弊端,直观展示纤维-基体界面键合作用,如,从分子或原子角度解释在纤维上接枝含氧官能团、涂覆氧化石墨烯等改性方式使纤维-基体界面间形成聚合物、静电作用、化学键、氢键和 van der Waals 力以增强界面相互作用的物化机理;还可分析将 CNFs 等纳米材料接枝到 PE 纤维表面,通过 CNFs 填充纤维-基体界面处的纳米孔并桥接纳米裂缝以提高纤维-基体界面结合强度并提高 ECC 拉伸应变能力的微观作用过程。

当前,MD 模拟针对 ECC 主要关注其开裂前未改性/改性纤维与 C-S-H 结合性能,针对 ECC 开裂

后纤维-基体界面性能如何变化及如何影响裂缝扩展行为未能涉及。

2) 介观尺度-数值(有限元)模拟: 细观尺度模型-晶格离散粒子模型对纤维单独建模以分析纤维的加入对 ECC 拉伸应变硬化特性的提高;基于细观力学的数值(有限元)模型发现纤维的不均匀分散会降低 ECC 的极限拉伸应变和极限拉伸强度;二维晶格有限元模型发现拉伸应变随基体中最小孔隙尺寸的增大而增大,随基体自身拉伸强度的降低而增强;经涂油处理的 PVA-SHCC 因纤维-基体界面化学粘结力和界面摩擦力的提高而增强了自身的拉伸应变能力;ECC 的拉伸应变能力随试件厚度和宽度的增加而降低,相较于矩形棱柱体和圆柱形试样,哑铃型试样的拉伸应变最大。

数值(有限元)模拟从细观尺度分析不同因素对 ECC 应变硬化行为的影响,但还未有从砂浆基体颗粒紧密堆积角度对 ECC 拉伸应变的数值(有限元)模拟,还需分析纤维排列分布、内部缺陷分布及试件几何形状对 ECC 拉伸响应的影响,从而建立更加准确的 ECC 拉伸数学本构模型。

3) 宏观尺度 1-近场动力学: PD 理论以较高的求解精度和效率可用于解决水泥基材料的微/宏观力学不连续问题,一些学者将其用于水泥浆体的微裂纹扩展模拟,或利用其建立 ECC 半离散/离散模型以模拟拉伸断裂行为,或预测 FRCC 的最大拉伸应变等,均证实了该方法的可行性。

尽管 PD 模拟可用于预测水泥基材料断裂过程,但针对 ECC 多缝开裂过程中纤维-基体间的应力传递作用及受力后裂纹扩展路径的预测鲜有涉及。

4) 宏观尺度 2-人工神经网络: ANN 模型根据输入层参数的不同可预测 ECC 基本力学性能指标、混凝土抗压、抗拉强度及 FRC 的应力-应变曲线,并优化混凝土配合比;将 ANN 与 GA 联合预测混凝土的抗压强度、坍落度、界面粘结强度等指标时,其预测精度更高。

目前,关于 ANN 对 ECC 拉伸应变硬化特性预测的研究较少,应考虑将 ANN 模型扩展到针对 ECC 微观力学指标的预测;且随着输入层与输出层数据的不断扩充和复杂化,如何保证 ANN 预测模型的精确性值得考虑。

5) 需要强调的是,各类尺度的相关模型均有一定适用范围,其关键输入参数仍需人工反复调控以实现预测目标与真实结果的匹配,降低了模型精度和使用效率,未来,如何依据设计目标以实现与输

入参数的智能匹配, 即, 如何达到输入参数–预测目标的双向智能寻优, 值得深入探究。

参考文献:

- [1] YUAN F, PAN J L, WU Y F. Numerical study on flexural behaviors of steel reinforced engineered cementitious composite (ECC) and ECC/concrete composite beams[J]. *Sci China Technol Sci*, 2014, 57(3): 637–645.
- [2] FENG J, SUN W W, CHEN L, et al. Engineered Cementitious Composites using Chinese local ingredients: Material preparation and numerical investigation[J]. *Case Stud Constr Mater*, 2022, 16: e00852.
- [3] LI Victor C, 张亚梅. 高延性纤维增强水泥基复合材料的研究进展及应用[J]. *硅酸盐学报*, 2007, 35(4): 531–536.
LI Victor C, ZHANG Yamei. *J Chin Ceram Soc*, 2007, 35(4): 531–536.
- [4] DBJ61/T 112—2016 高延性混凝土应用技术规程[S]. 北京: 中国建材工业出版社, 2016.
DBJ61/T 112—2016. Technical specification for application of high ductility concrete[S]. Beijing: CBM Press, 2016.
- [5] 刘霁, 潘金龙, 姜波, 等. 超早强 ECC 材料在模数式伸缩缝中的应用研究[J]. *公路*, 2023, 68(4): 298–305.
LIU Ji, PAN Jinlong, JIANG Bo, et al. *Highway*, 2023, 68(4): 298–305.
- [6] 徐世烺, 周斌, 李庆华, 等. 喷射超高韧性水泥基复合材料的力学性能研究[J]. *水利学报*, 2015, 46(5): 619–625.
XU Shilang, ZHOU Bin, LI Qinghua, et al. *J Hydraul Eng*, 2015, 46(5): 619–625.
- [7] KUNIEDA M, ROKUGO K. Recent progress on HPFRCC in Japan required performance and applications[J]. *J Adv Concr Technol*, 2006, 4(1): 19–33.
- [8] LI V C, FISCHER G, LEPECH M D. Shotcreting with ECC[C]// *Spritzbeton-Tagung*, Alpbach, Austria, 2009: 1–16.
- [9] LI V C. On engineered cementitious composites (ECC)[J]. *J Adv Concr Technol*, 2003, 1(3): 215–230.
- [10] WANG P, QIAO G, ZHANG Y, et al. Molecular dynamics simulation study on interfacial shear strength between calcium-silicate-hydrate and polymer fibers[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 257: 119557.
- [11] ZHANG Y, QIAO P Z. A fully-discrete peridynamic modeling approach for tensile fracture of fiber-reinforced cementitious composites[J]. *Eng Fract Mech*, 2021, 242: 107454.
- [12] GENCTURK B, ELNASHAI A S. Numerical modeling and analysis of ECC structures[J]. *Mater Struct*, 2013, 46(4): 663–682.
- [13] 熊阳. PVA 纤维混凝土的力学性能研究及有限元分析[D]. 武汉: 湖北工业大学, 2016.
XIONG Yang. Study on mechanical properties and finite element analysis of PVA fiber concrete[D]. Wuhan: Hubei University of Technology, 2016.
- [14] 张鹏. 应变硬化纤维增强水泥基复合材料的有限元模拟研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2017.
ZHANG Peng. Finite element simulation of strain hardening fiber reinforced cement-based composites[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2017.
- [15] LU Z Y, YU J, YAO J, et al. Experimental and molecular modeling of polyethylene fiber/cement interface strengthened by graphene oxide[J]. *Cem Concr Compos*, 2020, 112: 103676.
- [16] JIN C R, BURATTI N, STACCHINI M, et al. Lattice discrete particle modeling of fiber reinforced concrete: Experiments and simulations[J]. *Eur J Mech A*, 2016, 57: 85–107.
- [17] LUKOVIĆ M, DONG H, ŠAVIJA B, et al. Tailoring strain-hardening cementitious composite repair systems through numerical experimentation[J]. *Cem Concr Compos*, 2014, 53: 200–213.
- [18] HOU D S, ZHANG W, WANG P, et al. Microscale peridynamic simulation of damage process of hydrated cement paste subjected to tension[J]. *Constr Build Mater*, 2019, 228: 117053.
- [19] KHOSRAVANI M R, FRIEBERTSHÄUSER K, WEINBERG K. On the use of peridynamics in fracture of ultra-high performance concrete[J]. *Mech Res Commun*, 2022, 123: 103899.
- [20] ZHANG W, ZOU X S, WEI F Y, et al. Grafting SiO₂ nanoparticles on polyvinyl alcohol fibers to enhance the interfacial bonding strength with cement[J]. *Compos Part B Eng*, 2019, 162: 500–507.
- [21] MADENCI E, OTERKUS E. *Peridynamic Theory and Its Applications*[M]. New York, NY: Springer New York, 2014.
- [22] ZHOU Y, HOU D S, GENG G Q, et al. Insights into the interfacial strengthening mechanisms of calcium-silicate-hydrate/polymer nanocomposites[J]. *Phys Chem Chem Phys*, 2018, 20(12): 8247–8266.
- [23] NADERPOUR H, KHEYRODDIN A, AMIRI G G. Prediction of FRP-confined compressive strength of concrete using artificial neural networks[J]. *Compos Struct*, 2010, 92(12): 2817–2829.
- [24] 李战国, 张浩, 李洪文, 等. 基于人工神经网络和遗传算法的砖混再生粗骨料混凝土配合比优化设计[J]. *混凝土*, 2023(10): 1–6.
LI Zhanguo, ZHANG Hao, LI Hongwen, et al. *Concrete*, 2023(10): 1–6.
- [25] GEHLOT T, DAVE M, SOLANKI D. Neural network model to predict compressive strength of steel fiber reinforced concrete elements incorporating supplementary cementitious materials[J]. *Mater Today Proc*, 2022, 62: 6498–6506.
- [26] KANG J G, BOLANDER J E. Event-based lattice modeling of strain-hardening cementitious composites[J]. *Int J Fract*, 2017, 206(2): 245–261.
- [27] BOSHOF W P, ADENDORFF C J. Effect of sustained tensile loading on SHCC crack widths[J]. *Cem Concr Compos*, 2013, 37: 119–125.
- [28] KANG J, BOLANDER J E. Simulating crack width distributions in SHCC under tensile loading[C]//the VIII International conference on fracture mechanics of concrete and concrete structures, Toledo Spain, 2013: 10–14.
- [29] SHALCHY F, RAHBAR N. Nanostructural characteristics and interfacial properties of polymer fibers in cement matrix[J]. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2015, 7(31): 17278–17286.
- [30] CHENG Z Q, HU Y Y, CHU L S, et al. Peridynamic modeling of engineered cementitious composite with fiber effects[J]. *Eng Fract Mech*, 2021, 245: 107601.
- [31] KANG J G, KIM K, LIM Y M, et al. Modeling of fiber-reinforced cement composites: Discrete representation of fiber pullout[J]. *Int J Solids Struct*, 2014, 51(10): 1970–1979.
- [32] 雷东移. 生态纳米超高强超高延性水泥基复合材料设计与关键性能[D]. 南京: 东南大学, 2019.
LEI Dongyi. Design and key properties of eco-nano ultra-high strength and ultra-high ductility cement-based composites[D]. Nanjing: Southeast University, 2019.
- [33] YAO J K, HUANG S L, XU Y W, et al. Mix design of equal strength high volume fly ash concrete with artificial neural network[J]. *Case Stud Constr Mater*, 2023, 19: e02294.
- [34] 苑坤兴. 聚丙烯纤维混凝土力学性能及微观结构的数值模拟[D].

- 青岛: 中国石油大学(华东), 2011.
- YUAN Kunxing. Numerical simulation of mechanical properties and microstructure of polypropylene fiber reinforced concrete[D]. Qingdao: China University of Petroleum (East China), 2011.
- [35] 刘丰. 钢纤维混凝土细观层次数值模拟研究[D]. 广州: 华南理工大学, 2014.
- LIU Feng. Numerical simulation study on meso-level of steel fiber reinforced concrete[D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2014.
- [36] CAI X R, XU S L, FU B Q. A statistical micromechanical model of multiple cracking for ultra high toughness cementitious composites[J]. Eng Fract Mech, 2011, 78(6): 1091–1100.
- [37] HUANG T, ZHANG Y X, YANG C H. Multiscale modelling of multiple-cracking tensile fracture behaviour of engineered cementitious composites[J]. Eng Fract Mech, 2016, 160: 52–66.
- [38] 樊其昌, 王展鹏, 孟雪, 等. 纤维素纳米晶须水泥基复合材料试验及分子动力学模拟[J]. 复合材料学报, 2022, 40(9): 5315–5329.
- FAN Qichang, WANG Zhanpeng, MENG Xue, et al. Acta Mater Compos Sin, 2022, 40(9): 5315–5329.
- [39] HUANG H L, LUO J, PENG C H, et al. Interfacial bond between modified micro carbon fiber and high-strength cement paste in UHPC: Bond-slip tests and molecular dynamic simulation[J]. Cem Concr Compos, 2023, 142: 105168.
- [40] HE S, QIU J S, LI J X, et al. Strain hardening ultra-high performance concrete (SHUHP) incorporating CNF-coated polyethylene fibers[J]. Cem Concr Res, 2017, 98: 50–60.
- [41] MEYER E E, ROSENBERG K J, ISRAELACHVILI J. Recent progress in understanding hydrophobic interactions[J]. Proc Natl Acad Sci USA, 2006, 103(43): 15739–15746.
- [42] LU Z Y, YIN R, YAO J, et al. Experimental and molecular dynamic study on the interfacial strengthening mechanism of PE fiber/cement mortar using advanced oxidation processes[J]. Constr Build Mater, 2021, 309: 125144.
- [43] ZHANG H, HUANG Y J, YANG Z J, et al. A discrete-continuum coupled finite element modelling approach for fibre reinforced concrete[J]. Cem Concr Res, 2018, 106: 130–143.
- [44] 吴畅, 王欣汝, 许铭纹, 等. 基于梁理论的 ECC 拉伸应变硬化与多缝开裂行为的数值模拟[J]. 复合材料学报, 2022, 39(11): 5216–5227.
- WU Chang, WANG Xinru, XU Mingwen, et al. Acta Mater Compos Sin, 2022, 39(11): 5216–5227.
- [45] KANG J G, BOLANDER J E. Multiscale modeling of strain-hardening cementitious composites[J]. Mech Res Commun, 2016, 78: 47–54.
- [46] ZHANG J, LEUNG C K Y, GAO Y. Simulation of crack propagation of fiber reinforced cementitious composite under direct tension[J]. Eng Fract Mech, 2011, 78(12): 2439–2454.
- [47] KRAHL P A, CARRAZEDO R, EL DEBS M K. Mechanical damage evolution in UHPFRC: Experimental and numerical investigation[J]. Eng Struct, 2018, 170: 63–77.
- [48] SPAGNOLI A, YANG E H, LI V C. Micromechanical modelling of multiple fracture in Engineered Cementitious Composites[C]//the 17th Biennial European Conference on Fracture, Brno Czech Republic, 2008: 2407–2414.
- [49] SPAGNOLI A. A micromechanical lattice model to describe the fracture behaviour of engineered cementitious composites[J]. Comput Mater Sci, 2009, 46(1): 7–14.
- [50] KUNIEDA M, OGURA H, UEDA N, et al. Tensile fracture process of strain hardening cementitious composites by means of three-dimensional meso-scale analysis[J]. Cem Concr Compos, 2011, 33(9): 956–965.
- [51] 丁聪. 高延性水泥基复合材料的细观力学修正模型及其调控机制[D]. 南京: 东南大学, 2021.
- DING Cong. Meso-mechanical correction model of high ductility cement-based composites and its regulation mechanism[D]. Nanjing: Southeast University, 2021.
- [52] REDON C, LI V C, WU C, et al. Measuring and modifying interface properties of PVA fibers in ECC matrix[J]. J Mater Civ Eng, 2001, 13(6): 399–406.
- [53] 雷东移, 李明昂, 张鹏, 等. 水泥基材料多尺度抗裂增韧机理研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(11): 2876–2889.
- LEI Dongyi, LI Ming'ang, ZHANG Peng, et al. J Chin Ceram Soc, 2023, 51(11): 2876–2889.
- [54] ARAIN M F, WANG M X, CHEN J Y, et al. Experimental and numerical study on tensile behavior of surface modified PVA fiber reinforced strain-hardening cementitious composites (PVA-SHCC)[J]. Constr Build Mater, 2019, 217: 403–415.
- [55] PARK J W, CHOO B, BOLANDER J E, et al. Investigation of high strain rate effects on strain-hardening cementitious composites using Voronoi-cell lattice models[J]. Cem Concr Compos, 2024, 147: 105408.
- [56] RANJBARIAN M, MECHTCHERINE V, ZHANG Z Y, et al. Locking Front Model for pull-out behaviour of PVA microfibre embedded in cementitious matrix[J]. Cem Concr Compos, 2019, 103: 318–330.
- [57] 霍彦霖. 混杂纤维应变硬化水泥基复合材料的细观数值模拟[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2020.
- HUO Yanlin. Meso-numerical simulation of hybrid fiber strain hardening cement-based composites[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2020.
- [58] ZHU B R, PAN J L, ZHANG M Z, et al. Predicting the strain-hardening behaviour of polyethylene fibre reinforced engineered cementitious composites accounting for fibre-matrix interaction[J]. Cem Concr Compos, 2022, 134: 104770.
- [59] KESNER K, BILLINGTON S L. Tension, compression and cyclic testing of engineered cementitious composite materials[J]. Mceer, 2004(7): 107.
- [60] LU C, LEUNG C K Y. Theoretical evaluation of fiber orientation and its effects on mechanical properties in engineered cementitious composites (ECC) with various thicknesses[J]. Cem Concr Res, 2017, 95: 240–246.
- [61] WU C, YAO J, CHEN M K, et al. Theoretical modification of the laboratory-determined tensile stress-strain relationship of strain hardening cementitious composites (SHCCs) for large-scale specimens[J]. Constr Build Mater, 2022, 326: 126879.
- [62] ZHAO D P, WANG C J, LI K, et al. An experimental and analytical study on a damage constitutive model of engineered cementitious composites under uniaxial tension[J]. Materials, 2022, 15(17): 6063.
- [63] SHAHBEYK S, HOSSEINI M, YAGHOobi M. Mesoscale finite element prediction of concrete failure[J]. Comput Mater Sci, 2011, 50(7): 1973–1990.
- [64] SUKUMAR N, CHOPP D L, MOËS N, et al. Modeling holes and inclusions by level sets in the extended finite-element method[J]. Comput Meth Appl Mech Eng, 2001, 190(46–47): 6183–6200.
- [65] SILLING S A. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces[J]. J Mech Phys Solids, 2000, 48(1): 175–209.
- [66] SILLING S A, LEHOUCQ R B. Convergence of peridynamics to classical elasticity theory[J]. J Elast, 2008, 93(1): 13–37.

- [67] WU P, YANG F, CHEN Z G, et al. Stochastically homogenized peridynamic model for dynamic fracture analysis of concrete[J]. Eng Fract Mech, 2021, 253: 107863.
- [68] YANG D, DONG W, LIU X F, et al. Investigation on mode-I crack propagation in concrete using bond-based peridynamics with a new damage model[J]. Eng Fract Mech, 2018, 199: 567–581.
- [69] LI W J, GUO L. Meso-fracture simulation of cracking process in concrete incorporating three-phase characteristics by peridynamic method[J]. Constr Build Mater, 2018, 161: 665–675.
- [70] HUANG D, ZHANG Q, QIAO P Z. Damage and progressive failure of concrete structures using non-local peridynamic modeling[J]. Sci China Technol Sci, 2011, 54(3): 591–596.
- [71] HOU D S, ZHANG W, GE Z, et al. Experimentally validated peridynamic fracture modelling of mortar at the meso-scale[J]. Constr Build Mater, 2021, 267: 120939.
- [72] YAN X F, LI W J, ZHANG R, et al. A three-dimensional meso-scale approach to the fracture analysis of ultrahigh performance concrete based on micropolar peridynamics[J]. Constr Build Mater, 2023, 382: 131303.
- [73] GU X, LI X, XIA X Z, et al. A robust peridynamic computational framework for predicting mechanical properties of porous quasi-brittle materials[J]. Compos Struct, 2023, 303: 116245.
- [74] GOLAFSHANI E M, RAHAI A, SEBT M H, et al. Prediction of bond strength of spliced steel bars in concrete using artificial neural network and fuzzy logic[J]. Constr Build Mater, 2012, 36: 411–418.
- [75] YAN F, LIN Z B. New strategy for anchorage reliability assessment of GFRP bars to concrete using hybrid artificial neural network with genetic algorithm[J]. Compos Part B Eng, 2016, 92: 420–433.
- [76] YAN F, LIN Z B, WANG X Y, et al. Evaluation and prediction of bond strength of GFRP-bar reinforced concrete using artificial neural network optimized with genetic algorithm[J]. Compos Struct, 2017, 161: 441–452.
- [77] CHANDWANI V, AGRAWAL V, NAGAR R. Modeling slump of ready mix concrete using genetic algorithms assisted training of artificial neural networks[J]. Expert Syst Appl, 2015, 42(2): 885–893.
- [78] SHI L, LIN S T K, LU Y, et al. Artificial neural network based mechanical and electrical property prediction of engineered cementitious composites[J]. Constr Build Mater, 2018, 174: 667–674.
- [79] SHANMUGASUNDARAM N, PRAVEENKUMAR S, GAYATHIRI K, et al. Prediction on compressive strength of engineered cementitious composites using machine learning approach[J]. Constr Build Mater, 2022, 342: 127933.
- [80] NASIR UDDIN M, LI L Z, AHMED A, et al. Prediction of PVA fiber effect in engineered composite cement (ECC) by artificial neural network (ANN)[J]. Mater Today Proc, 2022, 65: 537–542.
- [81] YU J, WENG Y W, YU J T, et al. Generative AI for performance-based design of engineered cementitious composite[J]. Compos Part B Eng, 2023, 266: 110993.
- [82] JI T, LIN T W, LIN X J. A concrete mix proportion design algorithm based on artificial neural networks[J]. Cem Concr Res, 2006, 36(7): 1399–1408.
- [83] 闫康. 人工智能神经网络技术在现代混凝土配合比设计中的应用[J]. 中国建材科技, 2008, 17(6): 21–23.
- YAN Kang. China Build Mater Sci Technol, 2008, 17(6): 21–23.
- [84] AÇIKGENÇ M, ULAŞ M, ALYAMAÇ K E. Using an artificial neural network to predict mix compositions of steel fiber-reinforced concrete[J]. Arab J Sci Eng, 2015, 40(2): 407–419.
- [85] HOSSAIN K M A, GLADSON L R, ANWAR M S. Modeling shear strength of medium- to ultra-high-strength steel fiber-reinforced concrete beams using artificial neural network[J]. Neural Comput Appl, 2017, 28(1): 1119–1130.
- [86] IKUMI T, GALEOTE E, PUJADAS P, et al. Neural network-aided prediction of post-cracking tensile strength of fibre-reinforced concrete[J]. Comput Struct, 2021, 256: 106640.
- [87] LIU F Y, DING W Q, QIAO Y F, et al. Compressive behavior of hybrid steel-polyvinyl alcohol fiber-reinforced concrete containing fly ash and slag powder: Experiments and an artificial neural network model[J]. J Zhejiang Univ SCIENCE A, 2021, 22(9): 721–735.
- [88] MAHESH R R, SATHYAN D. Modelling the hardened properties of steel fiber reinforced concrete using ANN[J]. Mater Today Proc, 2022, 49: 2081–2089.
- [89] RAHMAN S K, AL-AMERI R. Structural assessment of Basalt FRP reinforced self-compacting geopolymer concrete using artificial neural network (ANN) modelling[J]. Constr Build Mater, 2023, 397: 132464.
- [90] HEMMATIAN A, JALALI M, NADERPOUR H, et al. Machine learning prediction of fiber pull-out and bond-slip in fiber-reinforced cementitious composites[J]. J Build Eng, 2023, 63: 105474.
- [91] TSAI M L, HUANG C W, CHANG S W. Theory-inspired machine learning for stress-strain curve prediction of short fiber-reinforced composites with unseen design space[J]. Extreme Mech Lett, 2023, 65: 102097.
- [92] YUAN Z, WANG L N, JI X. Prediction of concrete compressive strength: Research on hybrid models genetic based algorithms and ANFIS[J]. Adv Eng Softw, 2014, 67: 156–163.
- [93] SU M, PENG H, LI S F. Application of an interpretable artificial neural network to predict the interface strength of a near-surface mounted fiber-reinforced polymer to concrete joint[J]. J Zhejiang Univ Science A, 2021, 22(6): 427–440.

Progress on Multi-Scale Simulation on Tensile Cracking Behavior of Engineered Cementitious Composites

LEI Dongyi¹, WU Zhiying¹, JIA Haoxuan¹, YU Long¹, WANG Bing¹, TANG Jinhui², LI Ying¹, LI Yanlong³, LIU Jiaping²
 (1. Department of Civil Engineering, Engineering Research Center of Concrete Technology under Marine Environment, Ministry of Education, Qingdao University of Technology, Qingdao 266520, Shandong, China; 2. School of Materials Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China; 3. School of Water Resources and Hydropower, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

Extended Abstract

Engineered cementitious composites (ECC) are widely used in masonry structure reinforcement, bridge deck connection and

structural repair due to the strain hardening and multi-crack cracking characteristics, which can overcome some shortcomings as poor ductility and weak crack control ability from ordinary concrete. The existing mechanism analysis for concrete fracture mechanics is mainly based on the micro- and macro-experimental results. Although a research can obtain experimental data, the experimental process and result analysis are time-consuming and labor-intensive, and there is a huge deviation between the experimental results and the intended target. Computer simulation provides an effective research tool for accurately analyzing the working mechanism of cement-based composites. Computer simulation can accurately predict and deeply analyze the experiment results due to the advantages of high efficiency, visualization and low cost, which helps to better understand the achievement criteria of special properties for cement-based composites. The related research on the nano-, meso-, and macro-scopic cracking characteristics during the tensile process of ECC by computer simulation technologies in different scales becomes popular. However, there are a few systematic work for the characteristics, differences and correlations of different scale simulation methods on ECC.

In the nano-scale simulation of ECC, the molecular dynamics (MD) can analyze the influence mechanism of unmodified fiber and modified fiber on the bonding performance at fiber-matrix interface during ECC deformation from the molecular or atomic level. MD can be used to establish the fiber/C-S-H interface molecular model, which can visually display the fiber-matrix interface bonding, and reveal that the interface bonding between unmodified/modified fibers, and C-S-H gel can be achieved *via* forming polymer, electrostatic interaction, chemical bond, hydrogen bond and the van der Waals force.

In the mesoscopic scale simulation of ECC, the numerical (finite element) simulation can analyze the influence of macroscopic and mesoscopic factors such as fiber, matrix and their interface on the tensile strain hardening behavior of ECC. Firstly, the mesoscopic scale model-the lattice discrete particle model can analyze the influences fiber type and dosage. Secondly, crack propagation mode I can simulate the influence of matrix characteristics such as matrix internal pore structure and matrix fracture toughness. A numerical (finite element) model is established to simulate the single fiber pullout process to analyze the influence of fiber-matrix interface parameters on the tensile properties of ECC. The ECC tensile finite element model is proposed to analyze the influence of sample shape and size on the tensile properties of ECC.

In the macroscale simulation of ECC, there are a few studies on the multi-crack cracking characteristics of ECC from peridynamic (PD) simulation. The fiber-matrix interaction using PD is simulated to investigate the discontinuous cracking process of ECC, or predict the maximum tensile strain of fiber reinforced cementitious composites, indicating the feasibility of PD simulation in this aspect. In addition, this review introduces how to establish an artificial neural network (ANN) prediction model to achieve concrete mix ratio design, predict the correlation between relevant parameters and mechanical properties, and extend the ANN model to the prediction of ECC micro-mechanical properties indicators.

Summary and prospects This review represents the research status of four types of simulation technologies according to nano-, meso-, and macro-scale in tensile cracking behavior of ECC. In the nanoscale simulation of ECC, MD can be used to analyze the bonding performance of fiber-matrix interface by virtue of its visualization advantage for molecular/atomic interaction. Using MD model in the molecular or atomic level for investigation of the interface interaction between unmodified/modified fibers and C-S-H gel is enhanced *via* forming hydrogen bonds, the van der Waals forces, *etc.*, or filling nanopores and bridging nanocracks with nanomaterials, thus improving the tensile properties of ECC. However, the MD simulation on the fiber-matrix interface performance after ECC cracking and the crack propagation behavior is lack. For the mesoscopic scale simulation of ECC, the numerical (finite element) model based on meso-mechanics shows that the uneven dispersion of fibers can reduce the ultimate tensile strain and ultimate tensile strength of ECC, and show that the tensile strain and tensile strength of ECC decrease with the increase of sample width and thickness. However, there is a lack on numerical (finite element) simulation for the tensile strain of ECC from the perspective of the close packing of mortar matrix particles. In the macroscale simulation of ECC, PD can be used to solve the discontinuous cracking problem of micro-/macro-mechanics of cement-based materials. However, the stress transfer between fiber and matrix during ECC multi-cracks cracking and the prediction of crack propagation path after loading are rarely involved. The ANN model can predict the basic mechanical property indexes of ECC and the stress-strain curve of FRC, and optimize the concrete mix proportion. When it is combined with a genetic algorithm to predict the compressive strength, slump and interfacial bond strength of concrete, the prediction accuracy becomes greater. However, the ANN prediction model on ECC micro-mechanical indicators is not reported. In addition, it is also crucial for the improvement of the prediction accuracy and efficiency of computer models to explore how to achieve two-path intelligent optimization of input parameters and prediction targets.

Keywords high ductility; tensile strain hardening; molecular dynamics; numerical (finite element); peridynamics; artificial neural network