

基于 Python 的再生混凝土细观性能模拟方法研究

姚泽良^{1,2}, 崔婷婷^{1,2}, 段东旭^{1,2}, 党发宁^{1,2}, 闻 硕^{1,2}

(1. 西安理工大学 土木建筑工程学院, 陕西 西安 710048; 2. 西北干旱地区生态水利国家重点实验室, 陕西 西安 710048)

摘要: 将再生混凝土看作由原生骨料、老砂浆基体、老界面区、新砂浆基体、新界面区组成的三维细观结构, 运用具有动态语义特征的 PYTHON 语言编写基于蒙特卡罗法生成三维再生混凝土随机骨料模型的算法, 通过 PYTHON 操纵 ABAQUS 软件内核, 实现模型构建与数值分析的合理整合, 采用该算法建立四种不同骨料含量的三维再生混凝土随机骨料模型, 并对 45% 骨料含量的模型力学性能进行了数值计算分析. 结果表明: 通过 PYTHON 建立的三维再生混凝土随机骨料模型与真实再生混凝土中骨料的随机性和投放率的切片细观结构相符合; 三维再生骨料模型的力学性能指标与试验结果吻合较好; 该方法较好地解决了构建再生混凝土三维随机骨料模型的技术难题, 满足工程应用的需要.

关键词: 再生混凝土; 三维细观结构; 蒙特卡罗法; 随机骨料; 数值计算

中图分类号: TU470

文献标志码: A

文章编号: 1006-7930(2021)02-0167-06

Research on the simulation method of mesoscopic performances of recycled concrete based on Python

YAO Zeliang^{1,2}, CUI Tingting^{1,2}, DUAN Dongxu^{1,2}, DANG Faning^{1,2}, WEN Shuo^{1,2}

(1. School of Civil Engineering and Architecture, Xi'an Univ. of Technology, Xi'an 710048, China;

2. State Key Laboratory of Eco-hydraulics in Northwest Arid Region, Xi'an 710048, China)

Abstract: A three-dimensional meso-structure model of recycled concrete is proposed which is composed of five-phase materials of newly hardened mortar, old hardened mortar, internal interface zone, external interface zone and natural aggregate. Using Python language with dynamic semantic features, an algorithm to generate three-dimensional recycled concrete random aggregate model is compiled based on Monte Carlo method. The kernel program of Abaqus software is manipulated by the algorithm to realize the reasonable integration of the model construction and numerical analysis. Three-dimensional recycled concrete random aggregate models are built with the above method based four different aggregate percent. The mechanical properties of the model with 45% aggregate percent are simulated and analyzed. The results show that the three-dimensional model established with Python is in good agreement with the real microstructure of recycled concrete. This method can meet the requirements of the aggregate generation randomness and the aggregate generation input rate. The mechanical properties of the model are in good agreement with the test results. This method is better able to solve the problem of constructing a three-dimensional random aggregate model of recycled concrete and can meet the needs of engineering applications.

Key words: recycled concrete; three-dimensional mesostructure; Monte Carlo method; random aggregate; numerical analysis

再生混凝土是指利用再生粗骨料部分或全部代替天然骨料配制而成的混凝土, 再生混凝土技术的开发和利用是建筑废弃物资源化利用的关键^[1]. 由于再生骨料细观结构的复杂性和试验条件的差异性, 单纯依赖试验的研究方法, 使再生混凝土的研究止步不前. 合理选取计算模型既可以减少由试验条件引起的系统性误差和由人为因素引起的偶然性误差, 又可以将细观结构和宏观结

构性能联系起来.

目前, 一些国内外学者在再生混凝土内部应力分布特征、随机骨料模型、不同级配下再生混凝土抗压强度等方面取得了一定的成果. Ma^[2]等提出通过运用某种数值分析方法实现骨料的高堆积密度. 肖建庄和李文贵^[3]等通过对模型再生混凝土的数值模拟, 研究了再生混凝土内部的应力分布特征和各项介质对再生混凝土试件力学性能的

收稿日期: 2020-09-18

修改稿日期: 2021-03-20

基金项目: 国家自然科学基金项目(51208422); 西安市科技计划项目(2017080CG/RC043(XALG030)); 陕西省教育厅重点项目(20JS092).

第一作者: 姚泽良(1976—), 女, 博士, 副教授, 研究方向为土木工程. E-mail: yaozeliang@xaut.edu.cn

影响。党娜娜和彭一江^[4]等基于蒙特卡罗法建立二维再生混凝土随机骨料模型,研究了再生混凝土的细观损伤机理。汪奔^[5]提出了一种基于网格预先生成的二维随机凹凸型骨料的混凝土细观建模方法。然而,现有的再生混凝土细观力学模型还存在诸多不足。固定颗粒数目的计算模型不能体现出骨料的随机性^[6],再生骨料细观结构复杂,在建立细观模型时未能考虑其多界面的特性;大多数的再生混凝土骨料模型是建立在 Matlab、Fortran、C++ 等计算机语言基础的开发,而这些语言并不具备定义材料属性、划分网格等功能,所以还需要建立好骨料模型后再导入有限元软件进行后续步骤,工作量很大,同时实际工程应用操作难度大。因此,再生混凝土细观力学模型有待深入研究。

为了解决构建符合真实骨料细观结构的再生混凝土骨料计算模型的关键技术难题,实现三维再生混凝土试件的仿真分析,本文将再生混凝土看作由原生骨料、老砂浆基体、老界面区、新砂浆基体、新界面区组成的三维细观结构,基于蒙特卡罗法运用具有动态语义特征的 Python 语言编写生成三维再生混凝土随机骨料模型的算法,通过 Python 语言对 Abaqus 件内核进行二次开发,实现模型构建和数值分析合理整合,采用该算法建立不同骨料含量的三维再生混凝土模型,主要分析投放率为 45% 的计算模型的力学性能,验证了该算法的有效性。

1 再生混凝土三维细观结构构建

1.1 三维细观设计

再生粗骨料来源于原生混凝土,本身性能就有很多差异,粗骨料的含量形状各不相同^[7-8],其细观结构较普通混凝土具有更高的复杂性和随机性。由于再生骨料附着砂浆(即老硬化砂浆),再生混凝土内部必存在较多过渡界面区。骨料的分配^[9-10],用量和类型^[11-12]在细观层次上对混凝土的抗压强度也有一定的影响,这里将再生混凝土看作由新砂浆基体、外界面区、老砂浆基体、内界面区、原生骨料五相材料组成^[13]。结合相关研究成果^[14],将再生骨料简化为球形。老砂浆基体、内外界面区由骨料进行面平移得来的球体,根据文献^[15],将老砂浆基体、内外界面区依据骨料半径占总骨料直径的比例关系设置合理的厚度值。经试算,选取 1 mm 厚度作为老砂浆基体的厚度,选取 0.5 mm 作为界面厚度,图 1 为再生混凝土剖面

的三维细观结构。

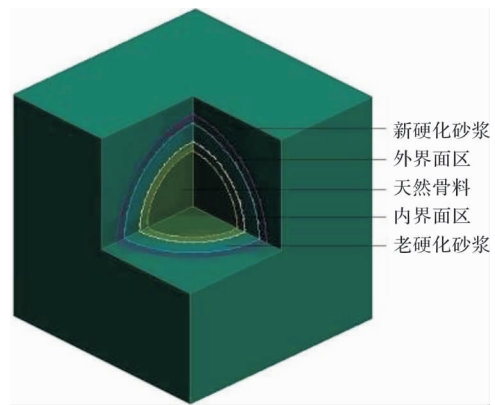


图 1 再生混凝土细观结构模型

Fig. 1 Microstructure model of recycled concrete

1.2 骨料级配

骨料级配是指骨料中大小不同的颗粒之间的数量比例,骨料级配的选取直接影响到再生混凝土硬化后的各种性能指标,如强度、耐久性等。由于富勒级配曲线可产生最优的结构密度和强度,因此选取此曲线作为最大密实度级配曲线。富勒抛物线方程如下:

$$p = 100(D/D_{\max})^{0.5} \quad (1)$$

$$F(D) = \frac{1/D_0^2 D_0^{1/2} - 1/D^2 D^{1/2}}{1/D_0^2 D_0^{1/2} - 1/D_{\max}^2 D_{\max}^{1/2}} \quad (2)$$

式(1)中, p 为骨料粒径在 D 以下的质量百分比; D_{\max} 为最大骨料粒径。式(2)中, $F(D)$ 为粒径为 D 的原生骨料出现的概率, D_0 、 D_{\max} 为最小、最大粒径。根据上述理论,计算出随机球型骨料的数量,骨料的取代率为 100%,骨料粒径为 5~20 mm,定义的模型尺寸 $x \times y \times z = 100 \text{ mm} \times 100 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ 。

2 再生混凝土三维模型程序研发

2.1 基本原理

利用蒙特卡罗法产生随机数的方法也称为随机抽样法。本文选用乘同余数法产生伪随机数,乘同余数法的一般形式是对任意初值 x_1 由如下递推公式确定:

$$x_{n+1} = ax_n(\text{mod}M), \xi_{n-1} = \frac{x_{n-1}}{M} \quad (3)$$

其中: x_n 表示数序列; a 表示乘子; M 表示模; $\text{mod}M$ 表示除以模后取余数。

通过构造随机模型使得某一随机变量的数学期望等于所求的解,最基本的随机变量在区间 $[0, 1]$ 上服从均匀分布。若产生 $[0, 1]$ 的均匀随机变量 x , 为了获取 $[a, b]$ 上的随机变量 X , 则由式(3)

经变换可得到:

$$X = a + (b - a)x \quad (4)$$

其中: X, x 均表示随机变量; a, b 表示常数.

基于上述的均匀分布函数, 随机生成骨料的中心点坐标, 以及用均匀分布的随机变量产生一个随机粒径 D_i . 蒙特卡罗法以其特有的优点被广泛应用于计算数学和物理工程领域, 成为解决许多复杂问题的重要手段. 蒙特卡罗法的优点有: 程序结构简单, 对计算机性能要求不高, 在计算机上容易实现; 收敛速度与问题维数无关, 受问题的条件限制影响较小.

2.2 程序研发

Abaqus 软件具有很强的通用性, 拥有前处理器、隐式求解器、显示求解器、后处理器等模块, 可以解决许多复杂的非线性问题. Abaqus 软件在混凝土和再生混凝土数值模拟方面应用较广, 但由于软件本身的局限性, 使得自动化建模、参数化分析等研究无法进行, 需要通过二次开发或结合其它软件才能实现. 结合 Python 语言, 程序设计流程如图 2 所示.

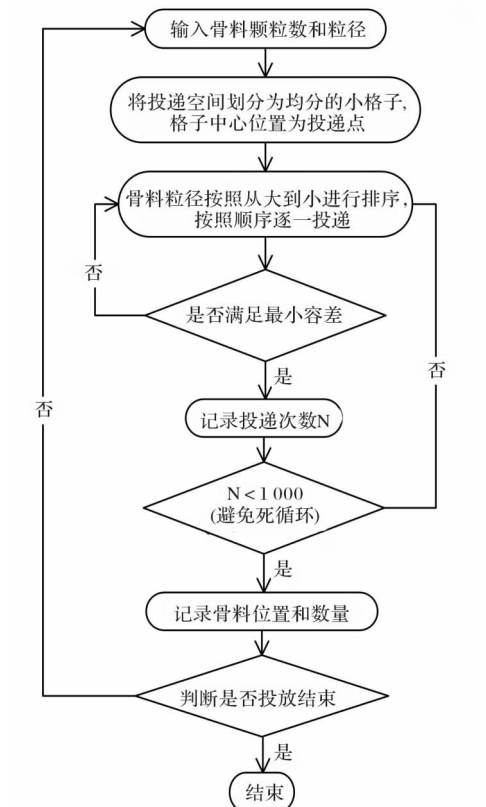


图 2 设计流程

Fig. 2 Design process

在 Python 脚本的编制过程中, 首先定义模型的尺寸、骨料所占的百分比、骨料界面区的厚度以及老砂浆的厚度, 其次根据基于以上骨料级配

理论内置一个粒径分布函数, 基于蒙特卡罗法内置一个 random 随机函数, 从粒径 d_1, d_2 中生成一个随机浮点数, 并获取粒径的随机数 ($d = d_2 + \text{random}() * (d_1 - d_2)$), 根据设置的投放量的要求将骨料粒径分级并存入到数组中.

投放空间划分为均匀的小格子, 调取随机粒径函数依次投放骨料, 将骨料按级配随机投放到划分的均匀网格中, 记录投放次数以及骨料的投放点的中心位置, 设置不同骨料间的净距条件, 若新投放的骨料与已投骨料之间无交点, 则记录投放的中心位置, 存入数组中; 若有交点, 则删除新投放骨料, 重新循环投放直到得到满足要求的骨料模型, 再通过面平移得到新旧砂浆的界面区. 最后运用 Abaqus 和 Python 之间的交互作用^[16], 在 Abaqus 中进行装配以及网格和荷载的布置等, 开始计算分析.

2.3 生成模型验证

将骨料粒径分为三级, 分别为 20~15 mm、15~10 mm、10~5 mm, 再生骨料最大粒径为 20 mm, 最小粒径 5 mm. 骨料投放的区域为边长为 100 mm 的立方体, 其中投放率设置在 45%~60% 之间, 图 3 为按投放率阶梯生成的三维细观模型.

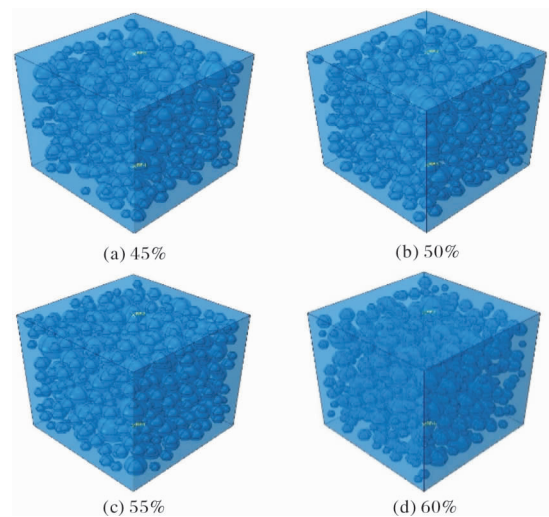


图 3 不同骨料含量模型

Fig. 3 Different recycled aggregate models

经与文献[3-4]对比分析, 本文方法建立的计算模型具有明显优势: 本文方法可快速生成不同骨料含量的计算模型, 建模效率高; 模型骨料符合级配要求, 与再生混凝土真实细观结构吻合较好; 不同大小的骨料随机排列, 分布均匀, 满足随机性要求; 骨料投放率可达 60%, 满足数值计算要求.

3 再生混凝土细观性能模拟计算

为了进一步验证再生混凝土三维细观模型有效性, 这里对骨料含量为 45% 的模型进行了单轴压缩和单轴拉伸模拟计算分析。

3.1 计算过程

选用 Abaqus 软件自带的损伤塑性本构模型 (简称 CDP 模型), 根据 CDP 模型要求和《混凝土

结构设计规范》中相关规定, 定义再生混凝土的偏心率 (0.1)、屈服面系数 (0.666 67)、粘性参数 (1×10^{-5}) 等相关塑性参数, 各参数值存储于 mat 数组中。根据相关试验资料^[14], 设置新砂浆、老砂浆、外界面、内界面、骨料的弹性模量 E 、抗压强度 f_c 、抗拉强度 f_t 、泊松比 γ 、密度 ρ 等参数。相关各相材料参数见表 1。

表 1 材料参数^[14]

Tab. 1 Material parameters

材料	弹性模量 E/GPa	抗压强度 f_c/MPa	抗拉强度 f_t/MPa	泊松比 γ	密度 $\rho/\text{T} \cdot \text{mm}^{-3}$
新砂浆基体	23.68	26.78	1.91	0.22	2.36×10^{-9}
老砂浆基体	19.27	18.17	1.66	0.22	2.38×10^{-9}
外界面	23.68	12.2	1.22	0.2	2.37×10^{-9}
内界面	19.27	10.2	1.02	0.2	2.36×10^{-9}
原生骨料	80	80	10	0.16	2.37×10^{-9}

模型装配完成并划分网格后, 进行创建分析步、修改输出、设置参考点、设置约束等步骤。本文采用刚性位移加载方式, 即在再生混凝土计算模型的上表面设置耦合约束, 在其顶部参考点分别施加 -0.5 mm 和 1 mm 的位移荷载 (图 4), 对三维再生混凝土模型开展了单轴压缩和单轴拉伸下的数值模拟计算分析。采用静力, 通用分析步, 总分析步时间为 1 s 。

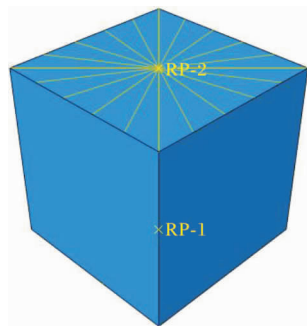


图 4 模型荷载施加

Fig. 4 Model load application

3.2 结果分析

3.2.1 抗压、抗拉强度和峰值应变

对试件施加位移荷载, 加载结束后, 为了减少误差, 本文分别提取三组随机模型的应力-应变值, 图 5 为计算分析得到的应力-应变曲线。

由图 5(a) 可知, 在单轴受压下, 模拟试件的抗压强度为 22.56 MPa , 对应的峰值应变为 0.0024 , 抗压强度介于新砂浆强度和老砂浆强度之间, 远低于原生骨料的抗压强度。由图 5(b) 可知, 模拟试件的抗拉强度为 2.18 MPa , 对应的峰值应变为 1.13E-5 , 抗拉强度约为抗压强度

(22.56 MPa) 的十分之一。

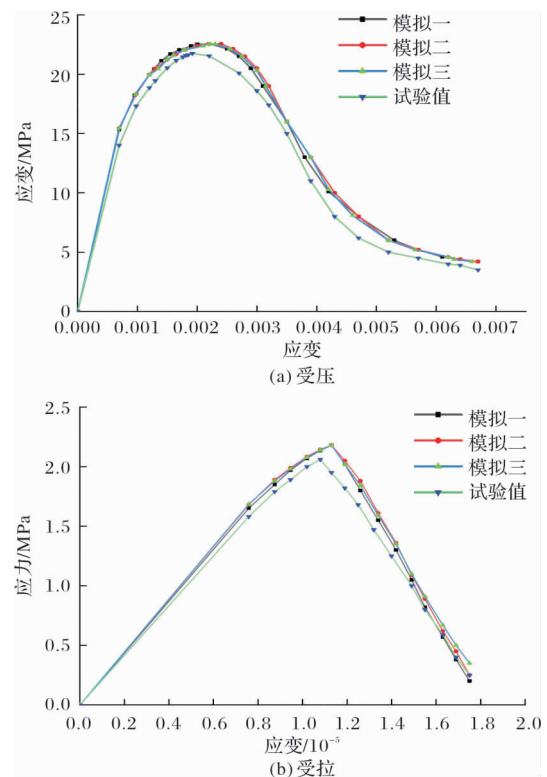


图 5 应力-应变曲线

Fig. 5 Stress-strain curves

经与文献^[14]的试验数据 (抗压强度为 21.79 MPa , 峰值应变为 0.00192 ; 抗拉强度为 2.06 MPa , 峰值应变为 1.08E-5) 对比, 计算得到的强度和峰值应变略高于试验值。分析其主要原因为: 由于初始真实再生混凝土浇筑完成后是有微裂缝的, 而本文的计算模型假设无初始裂缝。所以在力学性能的分析验证上, 其抗压、抗拉强度相对于试验均有所提高, 计算结果是合理的。

3.2.2 损伤破坏和应力分布

提取 x 向、 y 向、 z 向的应力,分析再生混凝土应力分布特征.图6、图7分别为单轴受压和单轴受拉时计算模型表面的 x 向水平、 y 向竖向、 z 向水平以及损伤云图(图中“+”为拉应力,“-”为压应力).

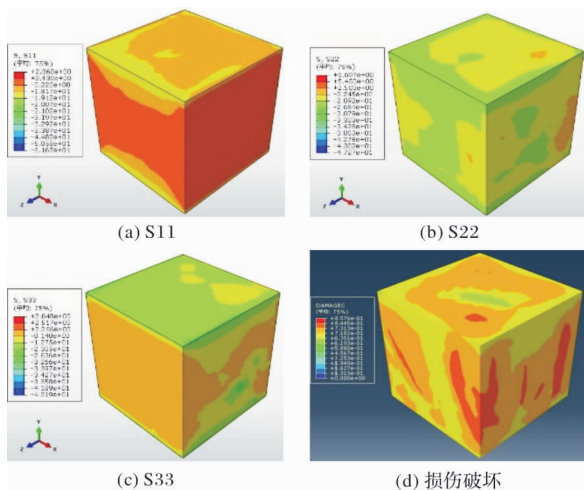


图6 单轴受压时应力和损伤状态

Fig. 6 Stress and damage state under uniaxial compression

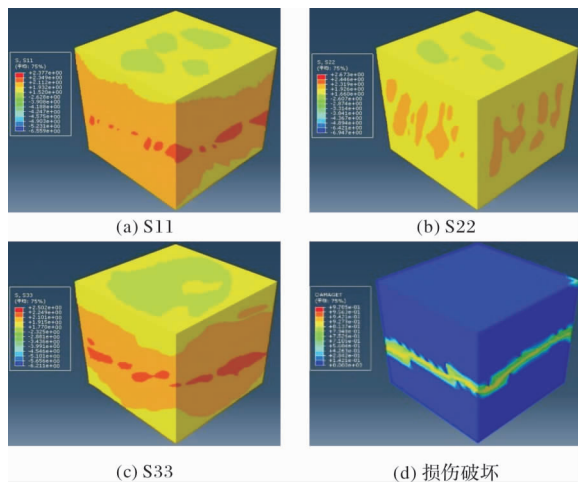


图7 单轴受拉时应力和损伤状态

Fig. 7 Stress and damage state during uniaxial tension

分析表明, x 向水平应力 S11(图6(a))的最大应力值出现在新硬化砂浆区和天然骨料区,其应力值为 $-0.22 \sim 2.43$ MPa; y 向竖向应力 S22(图6(b))的最大应力值出现在老硬化砂浆区以及内、外界面区域,其应力值为 $-0.245 \sim 2.503$ MPa; z 向水平应力 S33(图6(c))的最大应力值分布在内、外界面区中,其应力值在 $-0.14 \sim 2.266$ MPa. 由图7可知, S11 水平向最大应力值为 2.112 MPa; S22 竖向最大应力值为 22.319 MPa; S33Z 向应力为 2.101 MPa. 将以上结果与文献[14]中的试验数据(单轴压缩荷载作用下的强度为

2.44 MPa)对比,二者吻合较好,说明计算结果合理.加载结束后,试件的各个表面均出现了损伤破坏带(图6(d)和图7(d)),受压最大损伤值为 0.857 6,受拉最大损伤值为 0.942 1.

以上分析表明,通过 Python 操纵 Abaqus 软件内核,将再生混凝土看作由原生骨料、老砂浆基体、老界面区、新砂浆基体、新界面区组成的三维细观结构,实现了模型构建和数值分析合理整合.基于蒙特卡罗法生成三维再生混凝土随机骨料模型的算法较好地解决了构建再生混凝土三维随机骨料模型的关键技术难题,为再生混凝土基本理论研究提供了新方法.同时,该算法只需在脚本中修改相关参数就可进行相应计算,满足工程需要.

4 结论

运用 Python 语言编写基于蒙特卡罗法的三维再生混凝土骨料模型算法,解决了 Abaqus 软件在再生混凝土计算方面的技术难题,实现了模型构建和数值分析合理整合,通过模拟计算分析,验证了该算法的准确性.所得的主要结论如下:

(1)通过 Python 建立的三维再生混凝土随机骨料模型与再生混凝土真实细观结构相吻合,满足生成骨料的随机性要求,模型高效准确.

(2)通过 Python 语言直接操纵 Abaqus 内核进行二次开发,利用二者之间的交互作用可快速生成不同骨料含量的模型,建模效率高,骨料投放率可达 60%,满足数值计算要求.

(3)三维再生骨料模型的力学性能指标与试验结果吻合较好,表明该方法计算准确.计算所得强度和峰值应变略高于试验值,其主要原因是三维再生骨料模型均在细观结构上进行了简化,忽略了再生混凝土初始细微裂缝,以及浇筑成型后试块表面的微突起.

参考文献 References

- [1] 王长青,肖建庄,孙振平. 动态单调荷载下约束再生混凝土单轴受压应力-应变全曲线方程[J]. 土木工程学报, 2017, 50(8): 1-9.
WANG Changqing, XIAO Jianzhuang, SUN Zhenping. Dynamic complete stress-strain curve equations of recycled aggregate concrete under monotonic uniaxial loading[J]. China Civil Engineering Journal, 2017, 50(8): 1-9.
- [2] MA H F, SONG L Z, XU W X. A novel numerical scheme for random parameterized convex aggregate

- models with a high- volume fraction of aggregates in concrete-like granular materials [J]. Computers & Structures, 2018,209: 57-64.
- [3] 肖建庄,李文贵,刘琼. 模型再生混凝土单轴受压性能细观数值模拟[J]. 同济大学学报(自然科学版), 2011,39(6): 791-797.
XIAO Jianzhuang, LI Wengui, LIU Qiong. Meso-level numerical simulation on mechanical properties of modeled recycled concrete under uniaxial uompression [J]. Journal of Tongji University(Natural Science Edition), 2011,39(6): 91-97.
- [4] 党娜娜,彭一江,周化平,等. 基于随机骨料模型的再生混凝土材料细观损伤分析方法[J]. 固体力学学报, 2013,10(33): 58-62.
DANG Nana, PENG Yijiang, ZHOU Huaping, et al. A meso mechanical damage method based on random aggregate model for recycled aggregate concrete [J]. Chinese Journal of Solid Mechanics, 2013,10(33): 58-62.
- [5] 汪奔,王弘,张志强,等. 基于网格生成的随机凹凸型混凝土骨料细观建模方法[J]. 计算力学学报, 2017, 34(5): 591-596.
WANG Ben, WANG Hong, ZHANG Zhiqiang, et al. Mesoscopic modeling method of concrete aggregates with arbitrary shapesbased on mesh generation [J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2017,34(5): 591-596.
- [6] 李建波,林皋,陈健云. 随机凹凸型骨料在混凝土细观数值模型中配置算法研究[J]. 大连理工大学学报, 2008(6): 869-874.
LI Jianbo, LIN Hao, CHEN Jianyun. Numerical generation and efficient distribution for random shape aggregates in mesoscopic concrete model [J]. Journal of Dalian University of Technology, 2008(6): 869-874.
- [7] ZHANG Z H, SONG X G, LIU Y. Three-dimensional mesoscale modelling of concrete composites by using random walking algorithm [J]. Composites Science and Technology, 2017,149: 235-245.
- [8] 陈宗平,周春恒,徐定一,等. 骨料类型对再生混凝土力学特性的影响研究[J]. 应用力学学报, 2017, 34(1): 180-185, 205.
CHEN Zongping, ZHOU Chunheng, XU Dingyi, et al. Influence of aggregate type on mechanical behaviors of recycled aggregate concrete [J]. Chinese Journal of Applied Mechanics, 2017,34(1): 180-185,205.
- [9] PADMINI A K, RAMAMURYHY K, MATHEWS M S. Influence of parent concrete on the properties of recycled aggregate concrete [J]. Construction and Building Materials, 2009,23(2): 829-836.
- [10] EVANGELISTA L, BRITO D J. Durability performance of concrete made with fine recycled concrete aggregates [J]. Cement and Concrete Composites, 2009, 32(1): 9-14.
- [11] MIRIAN V L, ISABEL M L, MIGUEL A. Concrete with fine and coarse recycled aggregates: E-modulus evolution, compressive strength and non-destructive testing at early ages [J]. Construction and Building Materials, 2018,193: 323-331.
- [12] 白国良,张锋剑,安昱峰,等. 再生混凝土承重砌块试验研究[J]. 西安建筑科技大学学报(自然科学版), 2011,43(1): 7-12,17.
BAI Guoliang, ZHANG Jianfeng, AN Yuyi, et al. The research of recycled bearing concrete hollow blocks [J]. J. of Xi'an Univ. of Arch & Tech. (Natural Science Edition), 2011,43(1): 7-12,17.
- [13] 李运成,马怀发,陈厚群,等. 混凝土随机凸多面体骨料模型生成及细观有限元剖分[J]. 水利学报, 2006(5): 588-592.
LI Yuncheng, MA Huaifa, CHEN Huoqun, et al. Approach to generation of random convex polyhedral aggregate model and plotting for concrete meso-mechanics [J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2006,37(5): 588-592.
- [14] 刘琼. 再生混凝土破坏机理的试验研究和格构数值模拟[D]. 上海:同济大学, 2010.
LIU Qiong. The experiment study and lattice model simulation on the failure mechanism of recycled concrete [D]. Shanghai: Tongji University, 2010.
- [15] 周静海,王晓天,郭易奇,等. 再生混凝土抗压强度的影响因素的有限元分析[J]. 混凝土, 2017(6): 1-4.
ZHOU Jinghai, WANG Xiaotian, GUO Yiqi, et al. Finit element analysis on the compressive strength of recycled concrete [J]. Concrete, 2017(6): 1-4.
- [16] 曹金凤. Python语言在 Abaqus 中的应用[M]. 北京:机械工业出版社, 2011.
CAO Jinfeng. The application of Python language in Abaqus [M]. Beijing: Machinery Industry Press, 2011.

(编辑 桂智刚)