

基于相场法的砂浆裂纹相互作用失效分析

侯 越¹⁾ 葛 智²⁾ 周 健²⁾ 孙凤艳¹⁾ 孙文娟³⁾

1) 北京科技大学国家材料服役安全科学中心, 北京 100083 2) 山东大学土建与水利学院, 济南 250061

3) 弗吉尼亚理工大学工学院土木与环境工程系, 黑堡 24061, 美国

✉ 通信作者, E-mail: justdance@outlook.com

摘要 提出一种新的基于相场法的砂浆断裂力学分析方法, 对裂纹相互作用导致的砂浆试件失效行为进行模拟分析。采用非保守 Allen–Cahn 方程作为控制方程, 借助 COMSOL 有限元分析软件, 将线弹性力场和相场整合为统一的有限元模型, 对砂浆中裂纹发展和相互作用进行模拟分析。通过砂浆三点弯曲试验和直拉试验, 测试砂浆裂纹扩展过程。模拟结果与试验结果的对比分析表明, 砂浆试件裂纹相互作用临界荷载的模拟计算结果与试验结果非常吻合。研究结果表明, II 型试件断裂破坏会产生更长的裂缝路径。

关键词 砂浆; 断裂力学; 失效分析; 相场法

分类号 TU528; U414

Analysis on the fracture failure in crack interaction of mortar using the phase-field method

HOU Yue¹⁾, GE Zhi²⁾✉, ZHOU Jian²⁾, SUN Feng-yan¹⁾, SUN Wen-juan³⁾

1) National Center for Materials Service Safety, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

2) School of Civil and Environmental Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China

3) Department of Civil and Environmental Engineering, College of Engineering, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg 24061, USA

✉ Corresponding author, E-mail: justdance@outlook.com

ABSTRACT This article introduces a new mortar fracture analysis method based on the phase-field method, which is used to analyze the fracture failure in crack interaction of mortar. The non-conserved Allen–Cahn equation was adopted as the system governing equation to study the crack development and interaction in mortar. Both the linear elasticity and phase-field equations were solved in a unified finite element frame work, which was implemented in the commercial software COMSOL. Direct tension test and three-point bending test were performed for validation. It is discovered that the critical load of crack interaction by the phase-field method agrees very well with the experimental results. Research results show that Mode II specimen tends to have a longer crack path.

KEY WORDS mortar; fracture mechanics; failure analysis; phase-field method

砂浆是混凝土的重要组成成分, 砂浆断裂特性对混凝土的使用寿命有着非常重要的影响。研究者对砂浆断裂特性进行大量的试验研究, 如砂浆的断裂韧性^[1–2]、砂浆的裂纹延展^[3]、水泥砂浆的微裂纹产生及发展^[4]和裂纹偏转^[5]。在砂浆断裂机理研究方面, 研

究者通常基于非延展性统计模型^[6]、有限元模型^[7]、内聚力模型^[8]等方法开展理论研究。研究过程中存在两方面问题: 现在的研究主要着眼于单一断裂模式, 对于裂纹间相互作用的研究非常少, 事实上后者更加合理并具有实际意义; 现在的大多数砂浆断裂分析基

Griffith 的经典断裂力学^[9],但是这一理论存在研究多重断裂标准^[10]、复杂拓扑相变^[11]、和奇点^[12]等局限性,计算过程非常繁复。

近年来,一种基于能量的相场法被用于进行材料性能分析。该方法由 Cahn 和 Hilliard^[13]首先提出用于研究相场转换,目前已经被验证为可用于材料性能分析的一种高效数学工具,如 Al-Si 合金枝晶生长^[14]、晶体预熔及熔化^[15]和微观组织演化^[16]。相场法完全基于能量最小化原理研究材料性能,可以将裂纹发展转化为能量流的流动,因此将其应用于砂浆断裂力学分析,可以简化计算过程,从而有效克服经典断裂力学的局限性。

本文基于相场法,对裂纹相互作用导致的砂浆断裂失效进行模拟分析。数值模拟中以 Ginzburg-Landau 理论为基础^[17],采用非保守的 Allen-Cahn 方程作为相场控制式^[18]。通过给相场变量赋予不同数值,来表征砂浆结构中断裂相和完整相,并用储存在断裂相和完整相之间的表面自由能表征砂浆的抗裂性能。采用 COMSOL 有限元软件对相场式进行统一求解,从而获得砂浆裂纹延展过程。通过砂浆三点弯曲试验和直拉试验,测试砂浆裂纹扩展过程。将模拟结果与试验结果进行对比,发现相场法能够很好地模拟砂浆裂纹相互作用导致试件失效的整个过程。

1 理论模型

在相场模型中,需要对整个系统的总自由能 F 进行计算,因为它是衡量在一个特定的热力学过程中,系统可对外输出的有用能量。总自由能通常基于 Ginzburg-Landau 理论加以计算,表征为相场变量的函数。进行砂浆裂纹分析时,相场法使用一个统一的相场变量 ϕ 描述砂浆的微观结构。对于断裂相,设置为 $\phi = -1$;对于完整相,设置为 $\phi = 1$ 。整个系统的总自由能可由式(1)进行计算^[19]:

$$F = \int_{\Omega} (f_{gr} + f_{loc} + f_{el}) dV, \quad (1)$$

$$f_{gr} = \frac{1}{2} \lambda |\nabla \phi|^2, \quad (2)$$

$$f_{loc} = \frac{\lambda}{4\zeta^2} (1 - \phi)^2 (1 + \phi)^2, \quad (3)$$

$$\lambda = \frac{3\gamma\zeta}{\sqrt{8}}. \quad (4)$$

式中: f_{gr} 为梯度能量密度; f_{loc} 为局部自由能密度,局部自由能函数在两相 $\phi = -1$ 和 $\phi = 1$ 存在最小值; f_{el} 为由外部荷载产生的弹性能量密度; V 为积分体; λ 为混合能密度; ζ 为界面厚度^[17]; γ 为表面能,用于定量表征裂纹扩展过程中产生两个新的断裂面所需要的能量。

通过与相场变量耦合,可以获得如式(5)所示的弹性能量密度 f_{el} 。方程(5)采用爱因斯坦求和约定。

$$f_{el} = \frac{E(\phi)}{2(1+\nu)} \left[\frac{\nu}{1-2\nu} (\varepsilon_{ii})^2 + \varepsilon_{ik}\varepsilon_{ik} \right], \quad (5)$$

$$E(\phi) = E_0 + (E - E_0) h(\phi). \quad (6)$$

式中, E 和 E_0 分别为完整材料和裂纹部分的弹性模量; ν 为泊松比; $i, k = 1, 2, 3$ 。

式(7)是插值函数,满足

$$\begin{aligned} h(-1) &= 0, \\ h(1) &= 1, \\ h'(-1) &= h'(1) = 0, \\ h(\phi) &= -\frac{1}{4}\phi^3 + \frac{3}{4}\phi + \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (7)$$

考虑到裂纹相的弹性模量为零,为了避免在计算中产生数值错误,在整个计算域统一假定 $E_0 = 0.000001E$, $\nu = 0.22$ 。

通过式(8)计算应变 ε 为

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (\nabla u + (\nabla u)^T). \quad (8)$$

在拉格朗日系统里 u 表示位移场。

大量试验研究表明,砂浆在快速拉伸时表现出线弹性和各向同性。根据 Hooke 定律,采用式(9)计算弹性应力为

$$\sigma_{ik} = \frac{E(\phi)}{1+\nu} \left(\varepsilon_{ik} + \frac{1}{1-2\nu} \delta_{ik} \varepsilon_{ii} \right). \quad (9)$$

式中 $i, k = 1, 2$ 。对于 $i = k$, $\delta_{ik} = 1$;对于 $i \neq k$, $\delta_{ik} = 0$ 。通过式(10)所示的平衡条件计算应力

$$\nabla \cdot \sigma = 0 \quad (10)$$

采用式(11)所示的非保守 Allen-Cahn 方程模拟裂纹扩展。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M\psi, \quad (11)$$

$$\psi = \frac{\partial F}{\partial \phi} = -\nabla \cdot \lambda \nabla \phi + \frac{\lambda}{\varepsilon^2} (\phi^2 - 1) \phi + \frac{\partial f_{el}}{\partial \phi}. \quad (12)$$

式中 M 为砂浆裂纹扩展速率, ψ 为系统化学势。

采用有限元软件 COMSOL 对式(11)进行计算,需要获得该式的弱解形式,如下式:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} \tilde{\phi} d\Omega &= \\ - \int_{\Omega} \lambda \chi \left[\varepsilon^2 \nabla \phi \cdot \nabla \tilde{\phi} + (\phi^2 - 1) \phi \tilde{\phi} + \frac{\varepsilon^2}{\lambda} \frac{\partial f_{el}}{\partial \phi} \tilde{\phi} \right] d\Omega. \end{aligned} \quad (13)$$

式中 $\tilde{\phi}$ 是用于有限元计算的试函数。

2 断裂力学相场模拟

在相场模型中, J 积分用来表征弹性能释放的速率。通过计算裂纹相互作用过程中的 J 积分变化,对断裂过程中的能量释放及裂纹扩展方向进行研究。

2.1 J 积分

假定存在如图 1 所示的一个宏观裂纹 Γ_1 和一个任意的非常接近的裂纹 Γ_2 。根据 J 积分守恒定律, 可得到

$$-J(\Gamma_\infty) + J(HG) + J(\Gamma_1) + J(FE) + J(\Gamma_2) + J(DC) + J(BA) = 0. \quad (14)$$

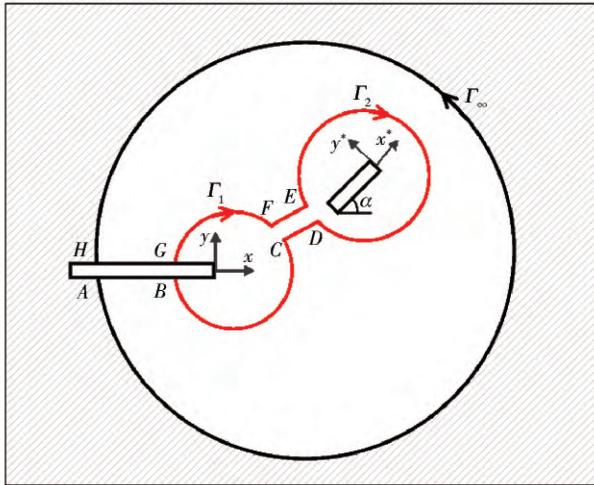


图 1 裂纹相互作用的积分路径图

Fig. 1 Integration contour in crack interaction

注意到积分路径 FE 和 DC 相互抵消, 考虑到断裂面表面牵引力为零, 可认为 $J(HG) = J(BA) = 0$, 基于式(14)可以进一步推导出式(15)为

$$J(\Gamma_\infty) = J(\Gamma_1) + J(\Gamma_2). \quad (15)$$

式中 $J(\Gamma_\infty)$ 是远端应力场的 J 积分, $J(\Gamma_1)$ 是宏观裂纹 Γ_1 尖端的 J 积分, $J(\Gamma_2)$ 是微观裂纹 Γ_2 尖端的 J 积分。对于局部坐标系 $x^* y^*$,

$$J(\Gamma_2) = J_1^* \cos \alpha - J_2^* \sin \alpha. \quad (16)$$

式中,

$$J_1^* = \oint_{\Gamma_2} (f_{el} dy^* - T_i^* u_{(i,1)}^* dx), \quad (17)$$

$$J_2^* = \oint_{\Gamma_2} (-f_{el} dy^* - T_i^* u_{(i,2)}^* dx), \quad (18)$$

T_i^* 是在局部坐标系 $x^* y^*$ 中的牵引力投影。

2.2 断裂力学二维模拟

对于三维脆性断裂模拟计算, 一般采用二维简化, 即仅考虑平面应力或者平面应变以提升计算效率。在 COMSOL 中建立如图 2 所示的二维有限元模型, 模拟砂浆在拉伸荷载作用下裂纹的相互作用。计算区域是一个边长 $L = 0.1$ m 的正方形, 界面厚度为 $\zeta = 0.0001$ m, 两个初始裂纹长度分别为 0.05 m 和 0.025 m, 初始裂纹宽度 $W = 0.005$ m, 网格尺寸设为 $\Delta x = \frac{1}{20}W$, 在初步网格划分中总共使用 31768 个三角形单元, 在上边界和下边界施加拉荷载 $\sigma(t) = kt$, 其中 $k = 2.5 \times 10^5$ N·m⁻²·s⁻¹。图 3 分别展示 0、0.08、0.55 和 0.60 s 时裂

缝扩展情况。其中表面能 $\gamma = 219$ J·m⁻², 弹性模量 $E = 26.4$ GPa。由图 3 所示, 裂缝传播和相互作用是沿着水平方向, 并且裂缝相和固体相之间存在有一个扩散界面。同时, 长裂缝扩展速率明显快于短裂缝, 这是由于长裂缝 J 积分能量释放速率较大。

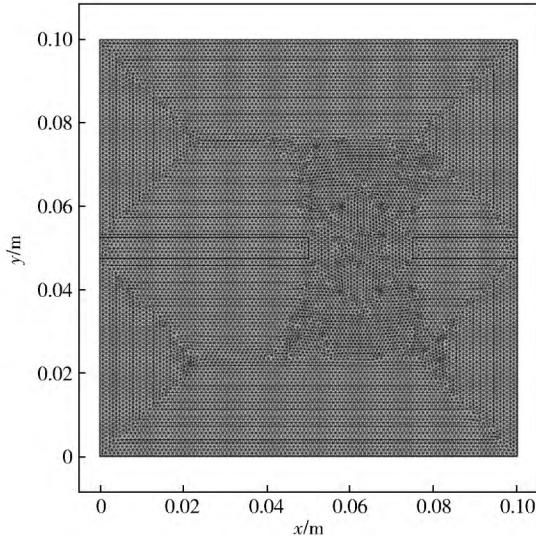


图 2 裂纹相互作用的有限元网格划分图

Fig. 2 Finite element mesh of the crack interaction model

3 试验结果及模拟结果对比分析

为了对相场法的模拟结果进行可靠性验证, 在山东大学压力实验室内进行了两种砂浆断裂试验, 包括三点弯曲试验和直接拉伸试验, 如图 4 所示。砂浆试件根据 ASTM C348 (ASTM, 2014) 的规定浇筑和养护。添加了巴斯夫(中国)生产的聚羧酸高效减水剂以提高砂浆工作性。所有砂浆试件的水泥/砂质量比统一采用 1:2, 水灰质量比选取 0.4。表 1 所示为制作砂浆所用波特兰水泥的性能。试验采用非常细的细砂作为骨料。图 5 给出细集料的级配曲线。因此可以假定制作的砂浆试件为各向同性的均质体。通过无缺口砂浆拉伸试验获得砂浆的弹性模量 $E = 26.4$ GPa 和抗拉强度 $\sigma_0 = 9.35$ MPa。如图 4(a) 所示, 在三点弯曲试验中, 砂浆试件采用的尺寸是 40 mm × 40 mm × 160 mm, 其中试验段长度为 130 mm。采用五种不同的初始裂缝长度, 分别为 10、12.5、15、17.5 和 20 mm。砂浆试件采用 20 mm 和 40 mm 两种不同厚度。对于每种尺寸的试件, 各做三组试验并取平均值以减少试验误差。在三点弯曲试验中, 试验力 F 逐渐增加, 最大值记为 P 。根据标准断裂试验规范 ASTM E399-12^[20], 可通过式(19)计算断裂韧度 K_c 为

$$K_c = f\left(\frac{a}{W}\right) \frac{PS}{BW^{3/2}}. \quad (19)$$

其中几何系数 $f\left(\frac{a}{W}\right)$ 用下式计算:

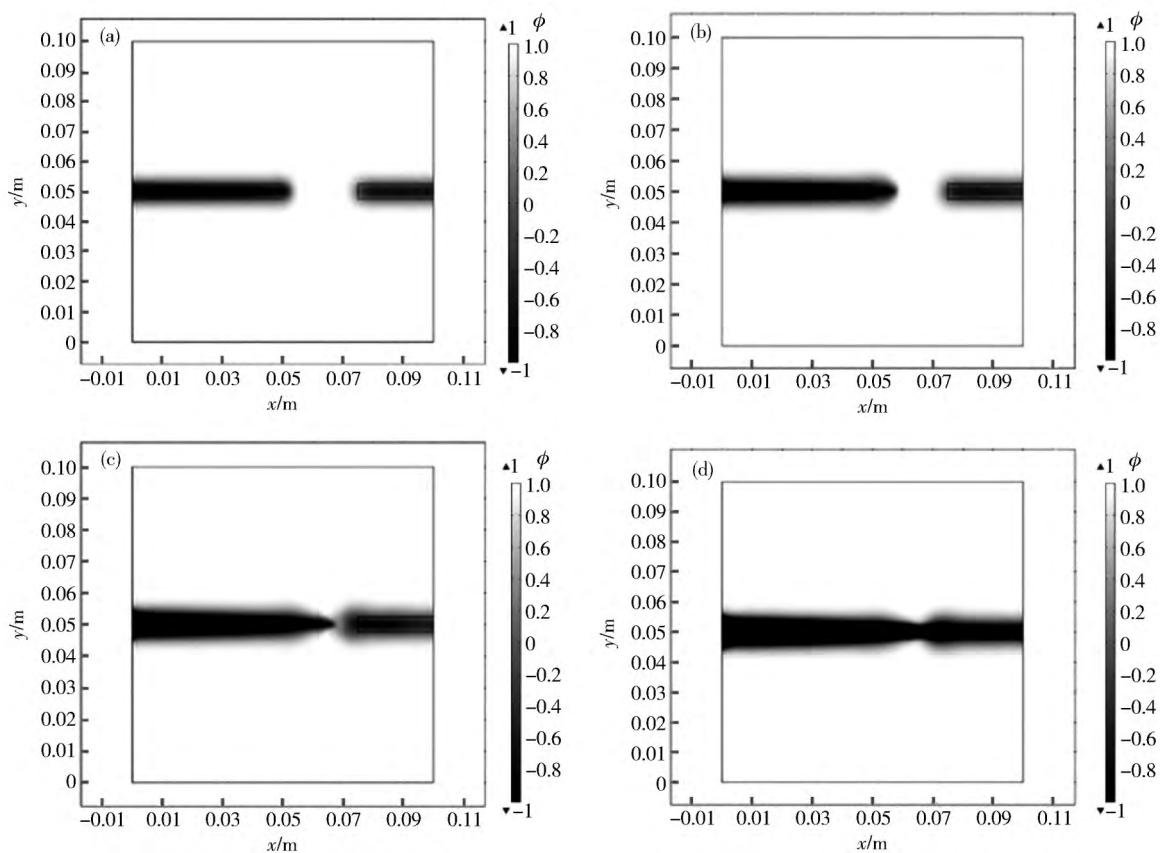


图3 裂纹相互作用过程. (a) 0 s; (b) 0.08 s; (c) 0.55 s; (d) 0.60 s

Fig. 3 Crack interaction process at different time instants: (a) 0 s; (b) 0.08 s; (c) 0.55 s; (d) 0.60 s



图4 砂浆断裂试验. (a) 三点弯曲试验; (b) 直接拉伸试验

Fig. 4 Mortar cracking tests: (a) three-point bending test; (b) direct tension test

$$f\left(\frac{a}{W}\right) = \frac{3(a/W)^{1/2} \left[1.99 - (a/W)(1-a/W) \left(2.15 - \frac{3.93a}{W} + 2.7a^2/W^2 \right) \right]}{2(1+2a/W)(1-a/W)^{3/2}} \quad (20)$$

在相场里, 表面能 γ 由下式计算:

$$\gamma = \frac{K_c^2(1-\nu^2)}{2E} \quad (21)$$

采用相场法对三点弯曲试验中砂浆试件临界破坏荷载进行模拟并与记录的临界破坏力 P 进行对比。在模拟中, 考虑临界荷载为瞬时, 即裂纹尖端的 ϕ 达到 -1 时试件发生破坏。对比结果如表 2 所示。对比模拟和试验数据可以看到相场法在砂浆三点弯曲断裂试验中的模拟具有很高的精度。

在直接拉伸试验中, 设计两种不同裂纹形态的砂浆试件: I 型试件, 在中间横截面上开两条在同一直线

表1 制作砂浆所用波特兰水泥的性能

密度 / (g·cm ⁻³)	比表面积 / (m ² ·kg ⁻¹)	标准稠 度 /%	安定 性/mm	凝结时间 /min
3.14	350	25.0	0.5	初凝 172 终凝 222

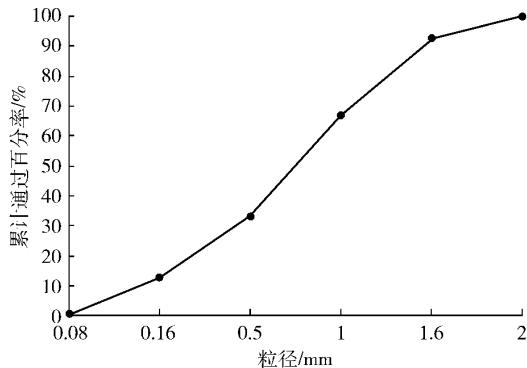


图5 集料级配曲线

Fig. 5 Grain size distribution

上的初始裂纹 其长度均为 5 mm, 如图 6 所示; II 型试件, 开两条不在同一直线上的初始裂纹, 其错开水平距



图6 I型试件: (a) 断裂前; (b) 断裂后
Fig. 6 Mode I specimen: (a) before failure; (b) after failure



图7 II型试件: (a) 断裂前; (b) 断裂后
Fig. 7 Mode II specimen: (a) before failure; (b) after failure

图8展示了直接拉伸试验中 I型和 II型砂浆试件荷载-位移关系的试验曲线和相场法模拟结果。可以看到,无论是 I型还是 II型试验,试验结果和相场法模拟结果都具有高度一致性,说明用相场模型描述砂浆试件在纯拉伸作用下裂纹相互作用行为具有很高的精度。

进一步观察到 I型试件和 II型试件的荷载-位移曲线均几乎为线性。这是由于在试验温度(室温)下,砂浆试件表现为线弹性,试件在外部荷载下发生线弹性脆性断裂破坏。比较图8中 I型和 II型试件的荷载-位移关系,可以看到对于相同的荷载,II型试件比 I型试件有着更大的位移。这是由于 I型试件中两初

表2 三点弯曲试验和相场法模拟结果的对比

Table 2 Comparison between three-point bending test and PFM simulation of mortar specimens

试样厚度 / mm	初始裂纹 长度/mm	破坏荷载, P/N	
		试验	相场法模拟
40	10.0	1373.8	1398.0
40	12.5	1127.2	1156.2
40	15.0	996.8	1002.3
40	17.5	766.0	785.1
40	20.0	628.5	654.7
20	10.0	632.8	636.9
20	12.5	530.5	541.3
20	15.0	463.5	471.7
20	17.5	386.1	366.4
20	20.0	298.5	287.3

离为 10 mm, 初始裂纹长度均为 10 mm, 如图 7 所示。试件厚度均为 40 mm。对于两种不同类型的砂浆试件, 各做五组试验取平均值以减少试验误差。



始裂缝笔直相对, II型试件中两初始裂缝存在初始角度, II型试件断裂破坏会产生更长的裂缝路径。

砂浆试件荷载和位移之间几乎呈线性关系, 这意味着砂浆断裂行为满足式(9)所需的脆性假设。荷载达到峰值以后, 下降得很快, 这就符合相场模拟的临界荷载是瞬时的这一假定。基于下式, 进一步计算开裂过程区尺寸 r_p :

$$r_p = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{K_c}{\sigma_0} \right)^2. \quad (22)$$

计算得 $r_p = 0.000689$ m。相比于砂浆试件尺寸, 开裂过程区非常小。这说明计算得到的开裂过程区尺寸 r_p 不会影响砂浆在直拉试验中的线弹性性能。

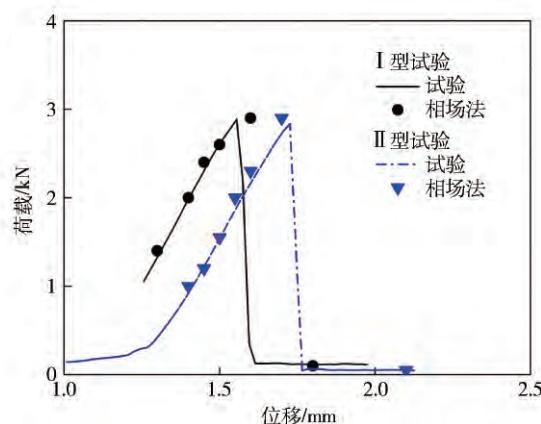


图8 直接拉伸试验中I型和II型试验中荷载-位移关系的PFM相场法模拟和试验对比

Fig. 8 Comparison between PFM simulation and test results of Mode I and Mode II specimens in direct tension test

4 结论

(1) 采用非保守相场模型,对砂浆裂缝相互作用导致的断裂失效进行模拟分析,并进行砂浆三点弯曲试验和直接拉伸试验以验证模拟可靠性。经过模拟及试验结果对比分析,发现相场法在砂浆断裂分析中计算结果精度较高,可用来模拟裂缝相互作用导致的砂浆试件断裂失效。

(2) 与经典断裂力学相比,相场法将裂缝扩展转化为能量流的流动,因而不需要详细地描述断裂面,可以方便地处理裂缝扩展中的拓扑变换,克服经典断裂力学计算过程繁复的缺陷,从而为砂浆断裂力学计算提供新途径。

(3) 通过数值模拟,验证了在两种不同的初始裂缝相互作用过程中,具有较大 J 积分的裂缝会有较快的裂缝扩展速率。通过对开裂过程区尺寸的严格计算,证明砂浆断裂行为呈线弹性。

参 考 文 献

- [1] Liu G T, Xue H, Chen F Q, et al. Experimental studies on the thermal fracture toughness of concrete and mortar in early ages. *J Tsinghua Univ Sci Technol*, 1996, 36(1): 95
(刘光廷 薛慧 陈凤岐, 等. 混凝土、砂浆早期温度断裂韧性实验研究. 清华大学学报(自然科学版), 1996, 36(1): 95)
- [2] Xie Y J, Zheng X G, Li S M, et al. Influence of temperature on toughness of emulsified asphalt cement mortar. *J Build Mater*, 2013, 16(6): 962
(谢永江 郑新国 李书明. 温度对水泥乳化沥青砂浆韧性的影响. 建筑材料学报 2013, 16(6): 962)
- [3] Das S, Kizilkiranat A, Neithalath N. Crack propagation and strain localization in metallic particulate-reinforced cementitious mortars. *Mater Des*, 2015, 79: 15
- [4] Sagar R, Prasad R, Prasad B, et al. Microcracking and fracture process in cement mortar and concrete: a comparative study using acoustic emission technique. *Exp Mech*, 2013, 53: 1161
- [5] Xie Z, Yao H. Crack deflection and flaw tolerance in brick and mortar structured composites. *Int J Appl Mech*, 2014, 6(2): 1450017
- [6] Stergiopoulos C, Stavrakas I, Triantis D, et al. Predicting fracture of mortar beams under three-point bending using non-extensive statistical modeling of electric emissions. *Phys A*, 2015, 419: 603
- [7] Larrinaga P, Chastre C, Biscaia H, et al. Experimental and numerical modeling of basalt textile reinforced mortar behavior under uniaxial tensile stress. *Mater Des*, 2014, 55: 66
- [8] Yang S, Hu X, Leng K, et al. Correlation between cohesive crack-tip local fracture energy and peak load in mortar beams. *J Mater Civ Eng*, 2014, 26: 04014069
- [9] Griffith A A. The phenomena of rupture and flow in solids. *Philos Trans R Soc London Ser A*, 1921, 221: 163
- [10] Kuhn C, Muller R. A continuum phase field model for fracture. *Eng Fract Mech*, 2010, 77: 3625
- [11] Cirak F, Ortiz M, Pandolfi A. A cohesive approach to thin-shell fracture and fragmentation. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 2005, 194(21): 2604
- [12] Chan Y, Paulino G, Feng B, et al. Dependence of crack tip singularity on loading functions. *Mech Res Commun*, 2010, 37(2): 191
- [13] Cahn J W, Hilliard J E. Free energy of a nonuniform system. I. interfacial free energy. *J Chem Phys*, 1958, 28: 258
- [14] Xu H, Li J S, Fu J X, et al. Influencing factors of Al-Si alloy dendritic growth simulation by phase-field method. *J Univ Sci Technol Beijing*, 2009, 31(3): 352
(徐宏 李京社 付建勋, 等. Al-Si 合金枝晶生长相场法模拟影响因素. 北京科技大学学报, 2009, 31(3): 352)
- [15] Lu Y L, Mu H, Hou H X, et al. Phase field crystal simulation for the premelting and melting of grain boundary. *Acta Metall Sin*, 2013, 49(3): 358
(卢艳丽 牧虹 侯华欣. 晶体相场模拟晶界预熔及熔化. 金属学报, 2013, 49(3): 358)
- [16] Du L F, Zhang R, Xing H, et al. Phase-field simulation of solidified microstructure evolution in the presence of lateral constraint. *Acta Phys Sin*, 2013, 62(10): 106401
(杜立飞 张蓉 刑辉, 等. 横向限制下凝固微观组织演化的相场法模拟. 物理学报, 2013, 62(10): 106401)
- [17] Yue P, Feng J, Liu C, et al. A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids. *J Fluid Mech*, 2004, 515: 293
- [18] Allen M, Cahn J. Ground state structures in ordered binary alloys with second neighbor interactions. *Acta Mater*, 1972, 20: 423
- [19] Hou Y, Wang L, Yue P, et al. Modeling mode I cracking failure in asphalt binder by using nonconserved phase-field model. *J Mater Civ Eng*, 2014, 26(4): 684
- [20] American Society for Testing and Materials. *ASTM E399 Standard Test Method for Linear-elastic Plane-strain Fracture Toughness K_{Ic} of Metallic Materials*. PA: ASTM International, 2012