

DOI:10.3876/j.issn.1000-1980.2014.04.007

基于三维微-细观尺度模型的混凝土力学性能研究

胡江¹, 苏怀智², 马福恒¹, 李子阳¹

(1. 南京水利科学研究院水文水资源与水利工程科学国家重点实验室, 江苏 南京 210029;
2. 河海大学水利水电学院, 江苏 南京 210098)

摘要: 依据水泥种类、水灰比、配合比和骨料级配等信息,在微观尺度上引入 CEMHYD3D 水化模型重构了水泥浆模型、在细观尺度上发展硬核/软壳模型构建了混凝土模型;研究基于 Rankine 准则和损伤模型的适用于混凝土微-细观模型的数值均匀化方法,从而提出混凝土力学性能递进分析和预测方法。算例分析表明,提出的方法能够较好地分析和预测混凝土的宏观力学性能;通过老化病害过程微观尺度的模拟,可实现混凝土老化病害机理分析。

关键词: 混凝土力学性能;微观尺度;细观尺度;硬核/软壳模型;数值均匀化方法
中图分类号: TU528.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-1980(2014)04-0321-06

Mechanical properties of concrete based on 3D micro-meso scale numerical models

HU Jiang¹, SU Huaizhi², MA Fuheng¹, LI Ziyang¹

(1. State Key Laboratory of Hydrology-Water Resources and Hydraulic Engineering, Nanjing Hydraulic Research Institute, Nanjing 210029, China;
2. College of Water Conservancy and Hydropower Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract: According to the special cement type, water-to-cement ratio, mix proportion, and particle size distribution of aggregates, the CEMHYD3D hydration model was used to rebuild the representative volume element (RVE) model of a microstructure (cement) based on the micro scale, and the hard core/soft shell model was developed to build the RVE model of the mesostructure based on the meso scale. Then, numerical homogenization methods based on the Rankine criterion and the damage model, which are respectively suitable for micro and meso scales, were studied. Hierarchical analysis and prediction methods for concrete mechanical properties are proposed. The results of an example show that the proposed method can satisfactorily analyze and predict the macro mechanical properties of concrete. The developed reconstruction microstructure method can also be used to explore the aging and degradation mechanisms for concrete with simulations of physical and chemical processes at a micro scale.

Key words: concrete mechanical properties; micro scale; meso scale; hard core/soft shell model; numerical homogenization method

基于各尺度信息数字成像的多尺度数值仿真分析是研究混凝土宏观力学性质的重要途径^[1-2]。各尺度多物相的拓扑构型与水泥种类、水灰比(w/c)、配合比和骨料级配(PSD)等因素密切相关^[3,4]。因此,各尺度复合材料系统的表征重构和等效力学性能参数获取(即均匀化)是借助多尺度递进分析方法实现混凝土力学性能需要解决的2个核心技术问题^[5,6]。

显式重构的现实结构,可用于变形机理和有效力学性能分析、老化机理探索等多个方面^[7]。孙立国

等^[8]采用随机延凸方法改进三角形基骨料模型,建立了混凝土细观数值模型。马怀发等^[9-10]通过数值分析证明圆形和多边形2种骨料模型的湿筛混凝土力学性能基本相同。李友云等^[11]综合运用随机模拟和有限元方法实现了混凝土力学参数的多尺度分析和预测。杜修力等^[12]借助随机骨料模型,采用等效化方法分析了单轴拉伸情况下的变形及宏观应力-应变关系。依据典型老化病害特性分析,国外学者认为混凝土宏观性质的改变取决于微观尺度结构的物理和化学破坏,多尺度表征元模型重构是深入了解混凝土本构关系的基础^[2, 13-14]。国内研究仍停留在不考虑边界过渡区(interfacial transition zone, ITZ)的细观尺度模型,未能更好地刻画混凝土结构最易发生损伤区域(ITZ)和最易引起老化的微观尺度(水泥浆体),亟待提出更精细的混凝土微观和细观尺度模型重构方法。

传统的力学性能等效均匀化方法有 Mori-Tanaka 方法和自洽方法^[4]。近年来提出的数值均匀化方法弥补了传统解析方法无法预测具有复杂拓扑结构材料行为的不足^[5-7, 15]。通过数值方法求解均匀边界条件下(边界问题)表征元模型的静力平衡,获取其各向同性响应,可获得更接近实际的材料力学性能^[15]。然而,混凝土微观、细观尺度中各相性质差异较大,欲更准确地分析混凝土的力学性能,需要寻找更加合理的非线性数值方法。

为此,笔者从微观尺度出发,通过微观、细观2个尺度模型的现实重构,借助非线性数值分析方法研究混凝土的力学性能。依据实际水泥信息、水灰比和养护条件等信息,通过引入水化模型 CEMHYD3D(three-dimensional cement hydration and microstructure development model)重构混凝土微观尺度(水泥浆)模型,考虑骨料和水泥浆间的 ITZ 和骨料级配,发展硬核/软壳模型(hard core/soft shell model, HCSS)重构混凝土细观尺度模型;提出基于 Rankine 准则和损伤模型的微-细观混凝土数值均匀化方法;实现基于三维微-细观尺度模型的混凝土力学性能分析和预测。

1 混凝土微观和细观尺度模型构建

1.1 混凝土的尺度分离

采用单一尺度模型很难同时表征所有的物相演变和物相拓扑结构特征,尺度分离条件是多尺度递进建立模型的依据,尺度分离应满足:

$$d_0 \ll d_1 \ll l \ll L \qquad l \ll \lambda \tag{1}$$

式中: d_0 ——连续介质力学方法适用的最小尺寸; d_1 ——非均质特征长度; l ——表征元尺寸; L ——材料整体尺寸; λ ——波动长度。

认为每一尺度是由 n 种均质物相组成,且第 r 相的体积分数为

$$f_r = \frac{V_r}{V} \qquad \sum_{r=1}^n f_r = 1 \tag{2}$$

式中: V_r ——第 r 相的体积; V ——该尺度表征元总体积。

混凝土尺度分离条件:微观尺度为 $10^{-6} \sim 10^{-4}$ m,细观尺度为 $10^{-3} \sim 10^{-1}$ m。微观尺度主要由 C-S-H(水化硅酸钙)基体、未水化的水泥熟料、CH(氢氧化钙)晶体和铝酸盐组成,其中 C-S-H 又可分高密(HD-C-S-H)和的低密(LD-C-S-H)两类。水灰比较大时($w/c>0.4$)还可能包含宏观孔。影响硬化水泥浆性能的主要因素有 w/c 、水泥各相成分、水泥颗粒级配和养护条件等。体元大小决定了模型的分辨率,1 $\mu\text{m} \times 1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$ 是水泥浆表征元的合理体元尺寸^[16],一般水灰比下合理微观尺度表征元的大小为 20 ~ 50 μm 。

细观尺度由水泥浆体、骨料(分为粒径 $D>5 \text{ mm}$ 的粗骨料(石块)和 $D<5 \text{ mm}$ 的细骨料(砂粒))和 ITZ 三种物相组成,即视为包含骨料颗粒的连续介质。其中,ITZ 强度较低,是混凝土内部的薄弱环节,受载时 ITZ 出现损伤并进一步发展,致使宏观应力-应变关系呈非线性。骨料的空间形态和骨料含量的客观模拟极为重要,基于配合比、PSD 和养护条件等,采用随机骨料模型构建细观尺度模型。

1.2 微观尺度模型构建

采用 CEMHYD3D 模型重构微观尺度表征元,模型包含初始微结构 3D 重建、分相和水化等主要模块。根据水泥信息(水泥颗粒级配和各相的表面积、体积分数)、 w/c 、养护条件,重构初始 3D 微观结构,并借助结合随机理论的元胞自动机规则实现水泥颗粒的溶解、扩散和反应等。控制水化循环可获取一定水化度下的水泥浆微观结构、各相的体积分数和毛细孔孔隙度,可用于定量分析预测水泥基材料物理力学特性^[7]。

1.3 细观尺度模型构建

假定粗骨料、细骨料都为球形,采用 C 语言程序改进 HCSS 模型得到考虑 ITZ 的混凝土细观 3D 表征元重构程序。根据实际级配,按半径 r_i 大小将骨料(质心为 (x_i, y_i, z_i))从大到小依次随机放置在水泥浆体中,任一骨料被同心软壳(即 ITZ,厚度为 d_i)包围。硬核(骨料)间不允许重叠,而软壳间允许部分或完全重叠;为减少边界效应,采用周期性边界条件。根据实际的级配选择表征元的实际尺寸大小。

为提高模型生成效率,将表征元划分为多个小仓,使用链表结构获取每个仓库颗粒列表及每个颗粒所涉及的仓库列表。重构程序包括颗粒放置和系统点抽样 2 个子程序,前者实现颗粒投放,后者评价不同物相的逾渗(连通性)并通过嵌套循环输出表征元体元的像素。颗粒半径等于实际骨料级配中半径加上设置的 ITZ 厚度,颗粒投放程序的主要特点和步骤:(a)采用随机半径生成程序设置欲放置的颗粒半径;(b)生成欲放置颗粒球心随机坐标;(c)识别与颗粒交叉的小仓库已放置的颗粒;(d)检查放置颗粒后各仓库已放置颗粒是否与其重叠;(e)若未重叠,考虑周期性边界条件放置颗粒;(f)识别与新放置颗粒交叉的所有小仓库;(g)更新小仓库颗粒列表和颗粒小仓库列表的链表;(h)重复上述步骤放置新颗粒直至结束。

通过定义实际尺寸大小、仓库数及仓库中每一方向的抽样点数确定细观模型分辨率。例如,模拟的真实尺寸为 30.0 mm,每一方向上的仓库数为 30,每一仓库每一方向上抽样点数为 3,则输出体元像素的物相分辨率为 $30/(30 \times 3) = 1/3 \text{ mm}$ 。

1.4 各尺度物相力学性质

除需要重构的各尺度表征元外,欲确定宏观物理力学性质还需各尺度各相物质的材料性质。混凝土宏观力学性质的分析取决于微观结构各物质的材料性质。纳米压痕技术可在 300 ~ 500 nm 范围测量材料的各种力学性质,如荷载-位移曲线、弹性模量和断裂韧性等。C-S-H 的特征长度尺寸为 $10^{-8} \sim 10^{-6} \text{ m}$,与纳米压痕试验的尺度处于相同的水平上。通过纳米压痕试验测得微观尺度物相的固有弹性性质见文献[4]。

2 基于损伤模型的边界问题数值均匀化方法

若表征元模型尺寸合理,则不同周期性边界条件下得到的材料有效性质相差不大。假定动力均匀边界(预定边界位移)条件,求解得到应力-应变关系曲线,同时由受载垂直向的位移得到泊松比。

微观尺度的数值均匀化采用文献[4]中的弹性参数,并假定各固体物相抗拉强度 σ_t 与弹性模量 E 关系为

$$\sigma_t = \frac{E}{10^4} \tag{3}$$

采用 Rankine 准则判断体元是否失效,当最大主应力超过 σ_t 时,体元失效。通过应力、应变平均,得到应力-应变关系曲线(本构模型)及力学参数。考虑到骨料是弹性的,细观尺度的破坏失效由微观尺度的水泥浆体变形受限导致局部拉裂引起的。细观尺度的数值均匀化以微观尺度数值均匀化得到的弹性力学参数、本构模型(峰后应力-应变关系)为基本信息,采用各向同性损伤模型模拟微观尺度的受力演变过程。

各向同性损伤本构关系为

$$\sigma = (1 - d) \mathbf{K} \epsilon \tag{4}$$

其中
$$d = g(\bar{\epsilon}) \quad \bar{\epsilon} = \frac{\sqrt{\max(\sigma_1) \max(\sigma_1)}}{E}$$

式中: σ ——应力; ϵ ——应变; d ——损伤参数; $\mathbf{K}$ ——无损伤时的刚度矩阵; $\bar{\epsilon}$ ——等效应变,有多种定义形式,本文采用 Rankine 范数形式; $\max(\sigma_1)$ ——主应力的最大正值。

数值算法(N 为迭代步):计算应变和等效应变 $\epsilon_{N+1} = \epsilon_N + \Delta \epsilon_N$ 、 $\bar{\epsilon}_{N+1} = \bar{\epsilon}(\epsilon_{N+1})$;与附加参数 γ (极限应变)比较,若 $\bar{\epsilon}_{N+1} > \gamma_N$,则 $\gamma_{N+1} = \bar{\epsilon}_{N+1}$,否则 $\gamma_{N+1} = \gamma_N$;计算损伤参数和应力 $d_{N+1} = g(\gamma_{N+1})$ 、 $\sigma_{N+1} = (1 - d_{N+1}) \mathbf{K} \epsilon_{N+1}$ 。

标量各向同性损伤模型参数主要包括损伤参数初始值、抗拉强度 σ_t 和软化参数 u_f ,其中 u_f 为对应拉应力消失时的损伤参数,由微观尺度应力-应变关系曲线确定,损伤与应力之间的关系为

$$\sigma = f(u) = \sigma_t \exp\left(-\frac{d}{u_f}\right) \tag{5}$$

损伤本构具有网格尺寸敏感性,对损伤模型进行适当修改,使其满足附加条件:

$$\epsilon_e = \frac{\sigma_t}{E} < \frac{u_f}{h} \tag{6}$$

式中: ε_e ——弹性应变; h ——有限元网格的广义尺寸,一维、二维和三维的广义尺寸分别可以表示为 $h=l_1$ 、 $h=\sqrt{A}$ 和 $h=\sqrt[3]{V_1}$, l_1 、 A 和 V_1 分别为一维单元长度、二维单元面积和三维单元体积。

假定 $\bar{\varepsilon}-\varepsilon_e \approx u/h$, 由 $\varepsilon_e=\sigma/E$, 可以得到

$$(1-d)E\bar{\varepsilon}-f(hd\bar{\varepsilon})=0$$

(7)

采用 Newton 法求解非线性式(7)得到未知量 d 。获取混凝土应力-应变关系曲线的具体步骤为:(a)根据均匀化得到的微观尺度弹性力学参数和峰后应力-应变关系,确定水泥浆体的抗拉强度和软化参数,并施加动力均匀边界。(b)采用 Newton 法求解有限元。(c)“杀死”损伤超过软化参数的单元,即将相应单元应力设为 0。(d)选取典型计算步以积分点和单元为单位输出结果 $\langle \sigma(x):\varepsilon(x) \rangle = \Sigma:E$,其中 $\sigma(x)$ 和 Σ 分别为微观和宏观应力张量,符号“:”表示双点积;以此绘制应力-应变关系曲线。(e)施加正交方向上动力均匀边界,重复步骤(a)~(d),计算得到泊松比。

开源有限元程序 SIFEL(simple finite elements)中包含了多种本构模型、求解算法和单元类型,本文提出的数值均匀化方法在开源有限元程序 SIFEL 中改进实现。

3 基于微-细观表征元模型的混凝土宏观力学性能的递进分析方法

3.1 方法的基本框架

依据重构的微观和细观三维多尺度模型,采用第2节所述的数值均匀化方法,依据文献[4]中水化产物和未水化水泥熟料的性质通过数值均匀化方法获取水泥浆的等效力学性质;进而借助建立的细观尺度表征元模型,采用数值均匀化方法获取混凝土的宏观力学性能。

微观尺度上,基于水泥组分、 w/c 和养护条件,通过 CEMHYD3D 水化模型重构分辨率为 $1\text{ }\mu\text{m}\times1\text{ }\mu\text{m}\times1\text{ }\mu\text{m}$ 的立方体体元、边长为 50 体元的三维微观尺度表征元模型。细观尺度上,基于骨料 PSD 和质量控制信息,考虑硬件条件限制,采用 HCSS 模型重构得到分辨率为 $1/3\text{ mm}\times1/3\text{ mm}\times1/3\text{ mm}$ 的立方体体元、边长为 90 体元的三维细观结构表征元模型。之后,将微观和细观表征元模型映射得到相应的有限元网格,其中孔隙采用刚度较小的体元显式表示。

3.2 算例分析和验证

以文献[17-18]的试验信息为依据,采用本文方法递进分析相同条件下的混凝土宏观力学性能,以验证方法的有效性。算例在配置为内存 2G 和 Intel(R) Core(TM) 2CUP 主频 2.4GHz 的 PC 机上进行。

试验选用硅质骨料和波特兰水泥 CEM I 52.5;单位体积(1 m^3)混凝土中水、水泥、硅砂和硅质砾岩(4.00~12.50 mm)分别为 225 kg、375 kg、684 kg 和 1 050 kg,其中硅砂 S28(0.20~0.50 mm)、硅砂 S30(0.40~1.00 mm)和硅砂 S36(1.00~3.15 mm)分别为 281 kg、193 kg 和 210 kg;采用标准养护条件。

分别采用微观和细观尺度重构程序,建立相应表征元模型;对于细观尺度模型,根据实际骨料级配输入每一筛分的最大、最小直径及颗粒总数,假设 ITZ 厚度为 0.3 体元,重构得到的模型如图 1 所示。图中 ABSGYP、EMPTYP、FH₃、AFM、ETTR、C₃AH₆ 分别表示石膏、空孔隙、氢氧化铁、单硫型水化硫酸钙、钙矾石、水石榴石。

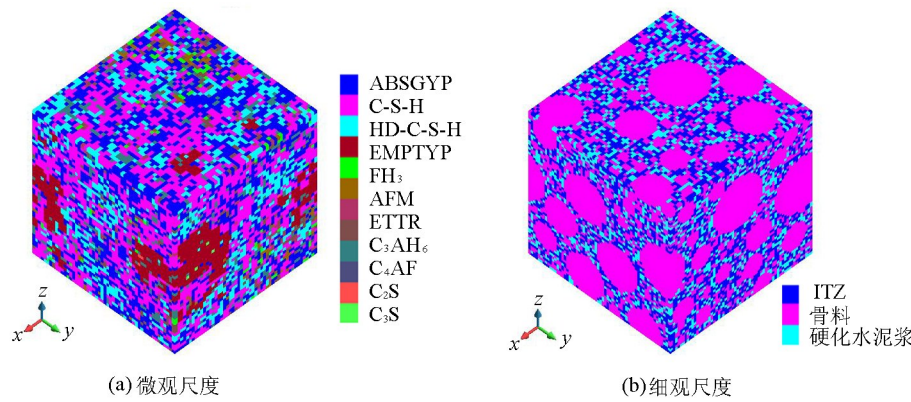


图 1 重构的混凝土微观、细观 3D 表征元模型

Fig. 1 3D RVE models of concrete at micro and meso scales

对于微观尺度,由于 w/c 较高,微观尺度孔隙率达到 29.54%。采用第 2 节方法,施加动力均匀边界条件,计算过程中微观尺度表征元应变分布如图 2(a)。试算弹性模量与所施加的边界条件无关,表明模型尺寸合理,对表征元的应力、应变取体积平均,得到受拉时的应力-应变关系如图 3,弹性模量为 14.32 GPa,泊松比为 0.273。

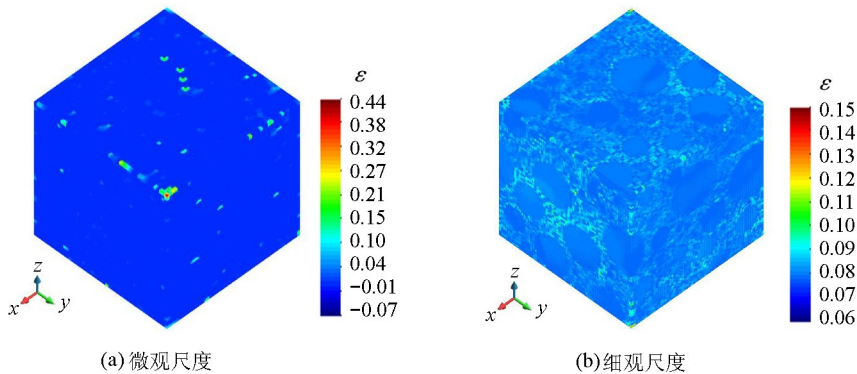


图 2 微-细观尺度表征元的应变分布

Fig. 2 Strain distributions of RVE models at micro and meso scales

对于细观尺度模型,砂和石块呈弹性,且弹性模量和泊松比均取为 80 GPa 和 0.167。如第 2 节所述,细观尺度因微观尺度的水泥浆体变形受限引起的局部拉应力导致失效,为此将微观尺度计算得到力学参数和图 3 所表示的应力-应变关系作为其输入信息;参考文献[19],ITZ 弹性模量取微观尺度的 1/2,泊松比取 0.3。对表征元的材料域施加动力均匀边界条件,采用第 2 节的损伤模型模拟受载演变过程,计算过程中的应变分布如图 2(b),对表征元的应力、应变取体积平均,得到的应力-应变关系如图 4 中的骨料级配 B 曲线,计算得到弹性模量为 35.39 GPa,泊松比为 0.212。文献中计算得到的混凝土宏观有效性质为弹性模量为 38.4 GPa,泊松比为 0.2^[18],可见,采用基于微-细观表征元模型的混凝土宏观力学性能的递进分析方法计算得到的值与试验结果吻合较好。

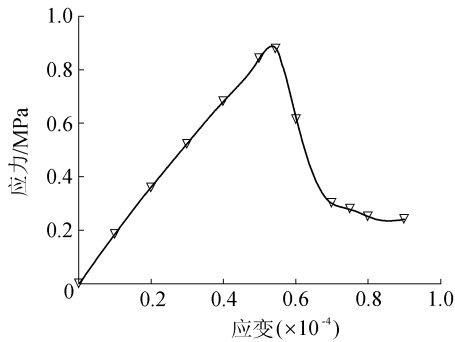


图 3 微观尺度表征元受拉时的平均应力-应变关系

Fig. 3 Mean tensile stress vs. strain curves of micro-scale RVE

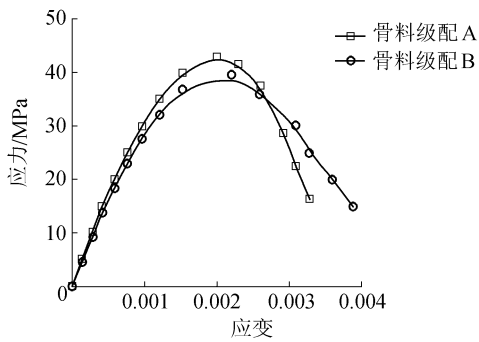


图 4 细观尺度表征元受压时的平均应力-应变关系

Fig. 4 Mean compression stress vs. strain curves of meso-scale RVE

依据水泥种类、 w/c 、配合比和 PSD 等信息,采用上述步骤和方法可实现各种配合比下混凝土的力学性能分析。举例说明,假定其他条件不变,仅改变骨料的级配,单位体积(m^3)硅砂和硅质砾岩分别为 550 kg 和 1 200 kg,其中硅砂 S28、S30 和 S36 分别为 150 kg、200 kg 和 200 kg。计算得到的细观尺度表征元的平均应力-应变关系如图 4 中的骨料级配 A 曲线。

4 结 论

- a. CEMHYD3D 水化模型可实现重构微观尺度模型;通过级配换算,发展的 HCSS 模型可较真实地构建各种配合比下的细观模型。因此,依据水泥信息、配合比、PSD 及养护条件等重构的混凝土微观和细观模型,从而能较客观地刻画混凝土的多尺度特征、较真实地描述混凝土微观和细观尺度的真实拓扑构造。
- b. 基于 Rankine 准则和损伤模型的混凝土微-细观数值均匀化方法,能模拟混凝土结构微观、细观尺度

上各物相的力学特性,可更准确地分析混凝土的宏观力学性能。

c. 在本文的基础上,通过控制微观尺度物相物理和化学变化过程,有望实现微观尺度上老化病害物理破坏或化学损伤的模拟,以及老化病害混凝土表征元模型重构,从而为深层次探索各种病害机理的形成和演化规律研究提供了可能。

致谢:感谢 NIST 的 BENTZ D P 和 CVUT 的 KRUIS J 在微观、细观尺度模型构建和有限元程序实现上提供的帮助。

参考文献:

- [1] BERNARD F, KAMALI-BERNARD S, PRINCE W. 3D multi-scale modeling of mechanical behavior of sound and leached mortar [J]. *Cement and Concrete Research*, 2008, 38(4): 449-458.
- [2] BERNARD O, ULM F J, LEMARCHAND E. A multiscale micromechanics-hydration model for the early-age elastic properties of cement-based materials [J]. *Cement and Concrete Research*, 2003, 33(9): 1293-1309.
- [3] SU Huaizhi, HU Jiang, TONG Jianjie, et al. Rate effect on mechanical properties of hydraulic concrete flexural-tensile specimens under low loading rates using acoustic emission technique [J]. *Ultrasonics*, 2012, 52: 890-904.
- [4] BENTZ D P, GARBOCZI E J, HAECKER C J, et al. Effects of cement particle size distribution on performance properties of portland cement-based materials [J]. *Cement and Concrete Research*, 1999, 29(10): 1663-1671.
- [5] COENEN E W C, KOUZNETSOVA V, BOSCO E, et al. A multi-scale approach to bridge microscale damage and macroscale failure: a nested computational homogenization-localization framework [J]. *International Journal of Fracture*, 2012, 178(1/2): 157-178.
- [6] WU T, TEMIZER I, WRIGGERS P. Computational thermal homogenization of concrete [J]. *Cement & Concrete Composites*, 2013, 35(1): 59-70.
- [7] 胡江. 混凝土坝老化病害及其影响的递进分析方法[D]. 南京: 河海大学, 2013.
- [8] 孙立国, 杜成斌, 戴春霞. 大体积混凝土随机骨料数值模拟[J]. *河海大学学报: 自然科学版*, 2005, 33(3): 291-295. (SUN Ligu, DU Chengbin, DAI Chunxia. Numerical simulation of random aggregate model for mass concrete[J]. *Journal of Hohai University: Natural Sciences*, 2005, 33(3): 291-295. (in Chinese))
- [9] 马怀发, 陈厚群, 吴建平, 等. 大坝混凝土三维细观力学数值模型研究[J]. *计算力学学报*, 2008, 25(2): 241-247. (MA Huaifa, CHEN Houqun, WU Jianping, et al. Study on numerical algorithm of 3D meso-mechanics model of dam concrete [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2008, 25(2): 241-247. (in Chinese))
- [10] 陈厚群, 马怀发, 李运成. 随机骨料模型形态对大坝混凝土弯拉强度的影响[J]. *中国水利水电科学研究院学报*, 2007, 5(4): 241-246. (CHEN Houqun, MA Huaifa, LI Yuncheng. Influence of random aggregate shapes on flexural strength of dam concrete [J]. *Journal of China Institute of Water Resources and Hydropower Research*, 2007, 5(4): 241-246. (in Chinese))
- [11] 李友云, 郑健龙, 崔俊芝, 等. 一类混凝土力学参数的迭代多尺度有限元预测方法[J]. *计算力学学报*, 2010, 27(1): 115-119. (LI Youyun, ZHENG Jianlong, CUI Junzhi, et al. Iterative multi-scale finite element predicting method for the elasticity mechanics parameters of the concrete with multi-graded rocks [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2010, 27(1): 115-119. (in Chinese))
- [12] 杜修力, 金浏. 基于随机多尺度力学模型的混凝土力学特性研究[J]. *工程力学*, 2011, 28(增刊1): 151-155. (DU Xiuli, JIN Liu. Mechanical property research on concrete based on random multi-scale mechanical model [J]. *Engineering Mechanics*, 2011, 28(Sup1): 151-155. (in Chinese))
- [13] NGUYEN V P, LAMBERTUS M S, SLUYS L J. Multiscale failure modeling of concrete: micromechanical modeling, discontinuous homogenization and parallel computations [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2012, 201-204: 139-156.
- [14] VOREL J, ŠMILAUER V, BITTNER Z. Multiscale simulations of concrete mechanical tests [J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2012, 236(18): 4882-4892.
- [15] SMILAUER V, BITTNER Z. Microstructure-based micromechanical prediction of elastic properties in hydrating cement paste [J]. *Cement and Concrete Research*, 2006, 36(9): 1708-1718.
- [16] BENTZ D P. Quantitative comparison of real and CEMHYD3D model microstructures using correlation functions [J]. *Cement and Concrete Research*, 2006, 36(2): 259-263.
- [17] NGUYEN V H, COLINA H, TORRENTI J M, et al. Chemo-mechanical coupling behaviour of leached concrete Part I: experimental results [J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2007, 237(20/21): 2083-2089.
- [18] NGUYEN V H, NEDJAR B, TORRENTI J M. Chemo-mechanical coupling behaviour of leached concrete Part II: Modelling [J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2007, 237(20/21): 2090-2097.
- [19] YANG C C. Effect of the transition zone on the elastic moduli of mortar [J]. *Cement and Concrete Research*, 1998, 28(5): 727-736.