

文章编号:1007-9629(2025)04-0315-08

温度影响下混凝土硫酸盐侵蚀行为数值模拟

李兆光^{1,2}, 王 艳^{2,3}, 郭冰冰^{1,3}, 洪梦姝^{1,4}, 牛荻涛^{1,3,*}

(1. 西安建筑科技大学 土木工程学院, 陕西 西安 710055; 2. 西安建筑科技大学 材料科学与工程学院, 陕西 西安 710055; 3. 西安建筑科技大学 绿色建筑全国重点实验室, 陕西 西安 710055; 4. 同济大学 土木工程学院, 上海 200092)

摘要: 基于 Fick 扩散定律和系统吉布斯自由能最小化原理, 构建了硫酸盐侵蚀混凝土反应-传输模型. 通过 Matlab 接口程序耦合 COMSOL 和 GEMS 软件, 实现了该模型的顺序非迭代法数值求解. 研究了温度影响下, 考虑钙溶蚀行为的硫酸盐侵蚀混凝土的物相组成、孔隙率、全元素和多离子时空分布规律. 结果表明: 混凝土膨胀开裂引起的含 S 固相损失是导致 S 元素分布存在峰值的原因; 由于膨胀性腐蚀产物的高温稳定性差, 靠近混凝土侵蚀表面的孔隙率随着温度的升高而降低; 相较于在 23 °C 条件下由膨胀开裂所造成的质量损失, 混凝土在高温条件下的质量损失主要由孔溶液中初始 pH 值的降低引起, 这一变化导致水化产物发生分解.

关键词: 硫酸盐侵蚀; 反应-传输模型; 温度影响; 数值模拟

中图分类号: TU528.1

文献标志码: A

doi: 10.3969/j.issn.1007-9629.2025.04.004

Numerical Simulation of Concrete Sulfate Attack Behavior under Temperature Influence

LI Zhaoguang^{1,2}, WANG Yan^{2,3}, GUO Bingbing^{1,3}, HONG Mengshu^{1,4}, NIU Ditao^{1,3,*}

(1. School of Civil Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China; 2. College of Materials Science and Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China; 3. State Key Laboratory of Green Building, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China; 4. College of Civil Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China)

Abstract: A reactive-transport model of concrete under sulfate attack was constructed on the basis of Fick's diffusion law and the principle of minimum of Gibbs free energy of the system. The numerical solution of the model was achieved using a sequential non-iterative method by coupling COMSOL and GEMS software through Matlab interface program. The space-time distribution patterns of phase composition, porosity, and all elements and multi ion in sulfate-erosion concrete, considering calcium dissolution under the influence of temperature, were investigated. The results show that the loss of S-containing solid phases caused by concrete expansion and cracking is responsible for the existence of peaks in the S element distribution; due to the poor high-temperature stability of expansive corrosion products, the porosity near the concrete erosion surface decreases with increasing temperature; compared to the mass loss caused by expansion and cracking at 23 °C, the mass loss of concrete under high-temperature conditions is mainly attributed to the decrease in the initial pH of the pore solution, resulting in the decomposition of hydration products.

Key words: sulfate attack; reactive-transport model; temperature influence; numerical simulation

收稿日期: 2024-05-10; 修订日期: 2024-07-23

基金项目: 国家优秀青年科学基金资助项目(52222806); 陕西省杰出青年科学基金资助项目(2022JC-20); 陕西省“高层次人才特殊支持计划”青年拔尖人才项目

第一作者: 李兆光(1990—), 男, 陕西西安人, 西安建筑科技大学博士生. E-mail: lizhaoguang@xauat.edu.cn

通讯作者: 牛荻涛(1963—), 男, 陕西渭南人, 西安建筑科技大学教授, 博士生导师, 博士. E-mail: niuditao@163.com

西北地区广泛分布着大面积盐渍土地层,其中所含的硫酸盐对水泥基材料构成了显著破坏作用^[1-6].随着当前隧道工程日益向长大深埋方向发展,诸如高地应力和高地热等特殊地质条件愈发频繁出现^[7].尤其值得注意的是,高地热环境会进一步加剧硫酸盐对混凝土的侵蚀程度^[8].温度升高不仅导致混凝土膨胀率上升^[9]、质量损失加剧^[10]、强度抗蚀系数降低^[11],还会加快离子扩散速率,促使钙矾石(Aft)向单硫型水化硫铝酸钙(AFm)转化^[12].此外,温度升高对混凝土的离子结合能力^[13]和孔隙结构特性^[8]也会产生不利影响.当前,数值模拟技术在探究多因素作用下的混凝土耐久性问题上取得了显著成效.一些模型已被广泛应用于硫酸盐侵蚀混凝土损伤全过程分析中^[14-16],并实现了对膨胀率^[17]、离子分布^[18]及水化产物分布等^[19-20]方面的科学预测.综上所述,现有研究主要聚焦于温度对硫酸盐侵蚀混凝土宏观力学性能、离子分布等方面的试验和模拟分析.关于温度影响下硫酸盐侵蚀混凝土物相组成变化的数值分析研究尚不够系统全面.

本文开展考虑温度作用的硫酸盐侵蚀混凝土反应-传输行为数值模拟研究,并基于多物理场仿真软件 COMSOL 和地球化学求解代码 GEMS (Gibbs energy minimization selektor) 分别对传输项和反应项进行计算;再通过编写 Matlab 接口程序实现数据传递和节点更新,研究不同温度(23、40、60、80 °C)下,考虑钙溶蚀行为的硫酸盐侵蚀混凝土物相组成、孔隙率、全元素和多离子时空分布规律,以期对硫酸盐侵蚀混凝土精细化寿命预测提供理论支撑.

1 硫酸盐侵蚀混凝土反应-传输理论方程

1.1 基于热力学的硫酸盐与水化产物反应理论

硫酸盐易与钙含量高的水泥水化产物(氢氧化钙(CH)及水化硅酸钙(C-S-H))发生反应生成石膏,石膏又进一步与含铝产物(水化铝酸四钙(C₄AH₁₃)、AFm 和水石榴石(C₃AH₆)等)反应生成膨胀性产物 Aft^[21].在系统中任意反应的标准吉布斯自由能变化值(ΔG°)可表示为:

$$\Delta G^\circ = \sum \Delta G_{f,p}^\circ - \sum \Delta G_{f,r}^\circ \quad (1)$$

式中: $\Delta G_{f,p}^\circ$ 和 $\Delta G_{f,r}^\circ$ 分别为生成物和反应物的标准吉布斯自由能,kJ/mol,具体取值见文献[1].

在包含多个相互关联反应的系统中,每个单独反应的吉布斯自由能均会影响整个系统的总吉布斯自由能.实际上,系统的总吉布斯自由能是由各相中所有组分的物质的量与其非理想化学势的乘积之和

构成的.为了确定各组分最优的物质的量,采用最小化总吉布斯自由能函数($G(x)$)来实现^[22],其计算式为:

$$\min G(x) = \sum_{j=1}^P \sum_{k=1}^m x_{jk} (\mu_{jk}^0 + RT \ln a_{jk}) \quad (2)$$

式中: P 为相数; m 为独立组分数; x_{jk} 为 k 相中 j 组分的物质的量,mol; μ_{jk}^0 为标准状态下 k 相中 j 组分的化学势,J/mol; R 为理想气体常数, $R=8.3145 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$; T 为绝对温度,K; a_{jk} 为 k 相中 j 组分的活度.

式(2)在满足质量守恒、元素守恒和物质的量非负性的约束条件下构成非线性最优化问题.

1.2 考虑温度和孔隙变化的反应-传输方程

硫酸盐的侵入和孔溶液中离子的溶出行为,可用扩展的Fick第二定律描述,其计算式为:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) + c_{i,R} \quad (3)$$

式中: c_i 为离子 i 的浓度,mol/m³; t 为扩散时间,s; x 为距离侵蚀面的深度,m; D_i 为离子 i 的扩散系数,m²/s; $c_{i,R}$ 为离子 i 发生反应时所消耗的浓度,mol/m³.

D_i^0 (m²/s)为离子 i 在水中的扩散系数,其计算式为:

$$D_i^0 = \frac{RT\lambda_i}{z_i F^2} \quad (4)$$

式中: λ_i 为离子 i 在水中的摩尔电导率,S·m²/mol,本研究中各离子在标准状态下(298.15 K)的摩尔电导率见表1; z_i 为电荷数; F 为法拉第常数, $F=96485.33 \text{ C/mol}$.

表1 各离子的摩尔电导率
Table 1 Molar conductivity of ions^[23]

Unit: 10 ⁻⁴ S·m ² /mol				
Na ⁺	K ⁺	OH ⁻	0.5SO ₄ ²⁻	0.5Ca ²⁺
50.08	73.48	198.00	80.00	59.47

基于 Archie 定律的有效扩散系数 $D_{i,e}$ 可表示为:

$$D_{i,e} = D_i^0 \frac{\epsilon}{\tau} \quad (5)$$

式中: ϵ 为多孔介质的孔隙率,%; τ 为孔隙迂曲度.两者间的经验关系为 $\tau = \epsilon^{1-m}$ (m 为构造因子,参考岩土类材料取值范围^[24-25]并综合考虑混凝土特性,本研究将其取为2.5).

在膨胀产物对孔隙进行填充阶段, ϵ 可根据因膨胀和溶蚀所引起的体积变化进行计算,其计算式为:

$$\epsilon = \epsilon_0 - \frac{\Delta V_{\text{exp}} - \Delta V_{\text{lea}}}{V} \quad (6)$$

式中: ε_0 为混凝土的初始孔隙率; V 为混凝土的总体积, m^3 ; ΔV_{exp} 和 ΔV_{lea} 分别为由膨胀产物填充和钙溶蚀侵蚀引起的混凝土体积变化, m^3 。

在硫酸盐侵蚀后期,基体会发生无胶凝性产物剥落现象,进而引发质量损失和孔隙率增大。混凝土的质量损失率受侵蚀时间、溶液浓度及水泥种类的影响而有所差异,但一般不超过1%^[2]。研究表明^[26],当AFt含量为45~66 kg/ m^3 时,混凝土的力学性能显著下降。基于本研究的模拟时长,设定混凝土的质量损失率为0.5%,该条件下AFt生成量达到50 kg/ m^3 。

2 反应-传输方程数值求解

2.1 反应方程数值求解

鉴于水泥化学反应体系的复杂性,本研究采用GEMS精确求解每个节点的热力学平衡方程。为了全面解析不同温度和压力条件下混凝土水化产物和侵蚀物质之间的相互作用,采用PSI-Nagra 12/07热力学数据库中的常用矿物溶解度和电解质溶液性质数据^[27],并辅以Cemdata 18.1热力学数据库^[28]的信息,来确保分析的准确性和完整性。

采用内点法(IPM)迭代求解式(2)的最优解。具体过程为:首先,通过解决一系列非线性最小化子问题来确定下降方向的向量 Δr ;随后,基于该下降方向,计算出第 r 次迭代的优化步长(λ_r);最后,通过 λ_r 更新原始解的数值,并重复此过程,直至满足预设的收敛条件。

2.2 传输方程数值求解

式(3)属于扩展的一维非稳态传输方程。为了进行数值计算,需要给出方程的离散格式。将空间域 Ω 分为 N 个单元,方程空间项的弱形式 W 为:

$$W = \int_{\Omega} -\nabla v \cdot (D_i \nabla \tilde{c}_i) d\Omega + \int_{\partial\Omega} v (D_i \nabla \tilde{c}_i \cdot \mathbf{n}) dS \quad (7)$$

式中: v 为试函数; $\tilde{c}_i$ 为离子 i 的浓度近似解, mol/m^3 ; $\mathbf{n}$ 为边界的法向量; dS 为边界上的微元。

时间 t 采用向后Euler法进行离散处理,计算式为:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} \approx \frac{c_i^t - c_i^{t-1}}{\Delta t} \quad (8)$$

式中: c_i^t 和 c_i^{t-1} 分别为离子 i 在 t 和 $t-1$ 时刻的浓度, mol/m^3 。

2.3 COMSOL-GEMS联合求解反应-传输方程

由于离子在传输和反应过程中所消耗的时间尺度存在显著差异,必须同时对传输解进行热力学平衡修正。因此,选择顺序非迭代法(SNIA)来分别求解传输和反应方程。Nardi等^[29]开发了COMSOL-

PHREEQC接口程序,该程序专门用于地球化学方面的反应-传输计算。Guo等^[30]将该接口程序应用于水泥基材料的研究中。本研究采用水泥化学领域常用的热力学平衡软件GEMS与多物理场仿真软件COMSOL的联合方案来处理反应-传输方程。

具体而言,在 t 时刻,先利用COMSOL计算出传输解 c_i^t ,将其作为输入参数传递给GEMS;再基于GEMS得到的热力学解 $c_{i,r}^t$,获得经热力学修正且用于 $t+1$ 时刻传输问题的初值 c_i^{t+1} 。此过程在所有时间和空间节点上重复执行,直至达到预设的总时间。具体计算流程如图1所示。

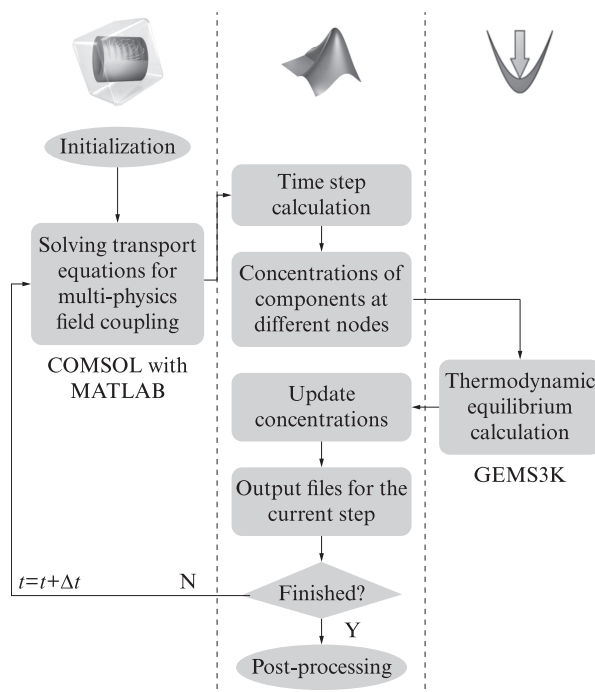


图1 COMSOL-GEMS计算流程

Fig. 1 COMSOL-GEMS calculation workflow

3 结果与讨论

3.1 模型验证

所有模拟均采用一维模型,混凝土区域均布30个节点,时间步长为1 h。模型几何及边界条件如图2所示。GEMS软件中输入的水泥氧化物组成见表2。混凝土的孔隙率根据式(6)进行实时计算,其水胶比及扩散系数等相关计算参数见表3。

3.1.1 钙溶蚀

Maltais等^[31]将水泥净浆试块单面暴露并在去离子水中浸泡90 d,来开展钙溶蚀试验,同时采用电子微探针技术测量了试块沿侵蚀深度方向上的元素含量分布情况。Ca元素含量分布试验结果与本研究数值模拟结果对比如图3所示。由图3可见:文献[31]

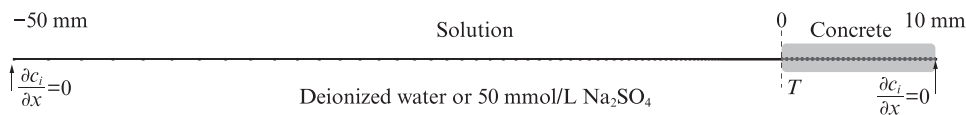


图2 模型几何及边界条件

Fig. 2 Model geometry and boundary condition

表2 水泥的氧化物组成

Table 2 Oxide composition (by mass) of cement^[31]

Unit: %

SiO ₂	Al ₂ O ₃	TiO ₂	Fe ₂ O ₃	CaO	SrO	MgO	Mn ₂ O ₃	Na ₂ O	K ₂ O	SO ₃	IL
19.78	4.39	0.22	3.00	62.04	0.26	2.84	0.04	0.32	0.91	3.20	2.41

表3 模型的计算参数

Table 3 Calculation parameters of model

Parameter	Value	Parameter	Value
Cement content / (kg·m ⁻³)	1 090	$D_{\text{SO}_4^{2-}}^0$ / (m ² ·s ⁻¹)	1.065×10^{-9}
Water content / (kg·m ⁻³)	655	$D_{\text{OH}^-}^0$ / (m ² ·s ⁻¹)	5.273×10^{-9}
Water-binder ratio (by mass)	0.6	$D_{\text{Na}^+}^0$ / (m ² ·s ⁻¹)	1.334×10^{-9}
Temperature / °C	23	$D_{\text{Ca}^{2+}}^0$ / (m ² ·s ⁻¹)	0.792×10^{-9}
$c_{\text{Na}_2\text{SO}_4}^0$ / (mmol·L ⁻¹)	50	m	2.5

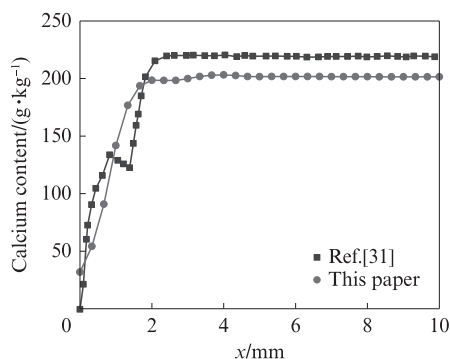


图3 Ca元素含量分布试验结果与数值模拟结果对比

Fig. 3 Comparison of experimental and simulated results for Ca element distribution

试验结果显示,靠近侵蚀表面处Ca元素含量迅速下降,这是由于去离子水对混凝土产生了钙溶蚀作用;本研究的模拟结果与这一现象呈较好的一致性。

3.1.2 硫酸盐侵蚀

Maltais等^[31]将水泥净浆试块置于50 mmol/L的Na₂SO₄溶液中浸泡90 d,来进行硫酸盐侵蚀试验。S元素含量分布试验结果与本研究数值模拟结果对比如图4所示。由图4可见:(1)文献[31]试验结果显示,S元素在硫酸盐侵蚀下并非按扩散定律分布,S元素含量在试块侵蚀表面接近0,并且在距表面1~2 mm处出现峰值,随后迅速降低;本研究的数值模拟结果与这一现象呈较好的一致性。

值得一提的是,本研究数值模拟时发现,相比未考虑质量损失,考虑因开裂所引起质量损失可以

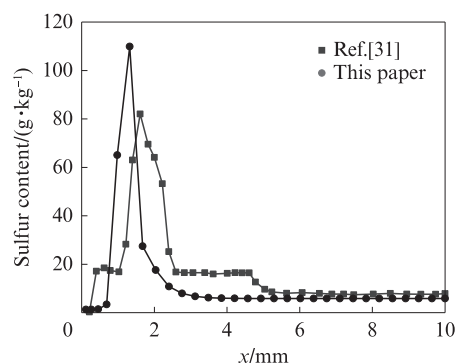


图4 S元素含量分布试验结果与数值模拟结果对比

Fig. 4 Comparison of experimental and simulated results for S element distribution

较好地捕捉到该峰值。

为了进一步分析S元素峰值形成的机理,分别提取了有无考虑质量损失条件下混凝土的物相分布,结果如图5所示。由图5可见:未考虑质量损失时,侵蚀90 d后每100 g混凝土内石膏体积峰值始终保持在表面位置;考虑质量损失时,侵蚀90 d后每100 g混凝土内石膏体积峰值向内移动。这表明石膏体积峰值向混凝土内部迁移的关键影响因素是混凝土的质量损失。

3.2 温度对硫酸盐侵蚀混凝土物相分布的影响

在3.1.2验证试验(温度为23 °C)的基础上,对不同温度下(40、60、80 °C)混凝土的硫酸盐侵蚀行为进行模拟。不同温度下硫酸盐侵蚀90 d后混凝土的物相分布如图6所示。由图6可见:(1)相比23 °C(图5(b)),60、80 °C下混凝土中主要水化产物的质量损失更大。(2)不同温度下生成的固相种类和体积有所不同。40 °C下,小于5.00 mm范围内所生成的AFt体积峰值略高于23 °C,然而距混凝土表面大于5.00 mm的内部区域并无AFt生成;60 °C下,石膏完全消失,距混凝土表面大于3.00 mm的内部区域中AFt的生成量大于23 °C时,且AFm含量有所减少;80 °C下,石膏和AFt均不再生成或分解为AFm,但在混凝土质量损失区和内部区域(侵蚀深度为2.76~4.57 mm)生成了无水芒硝。

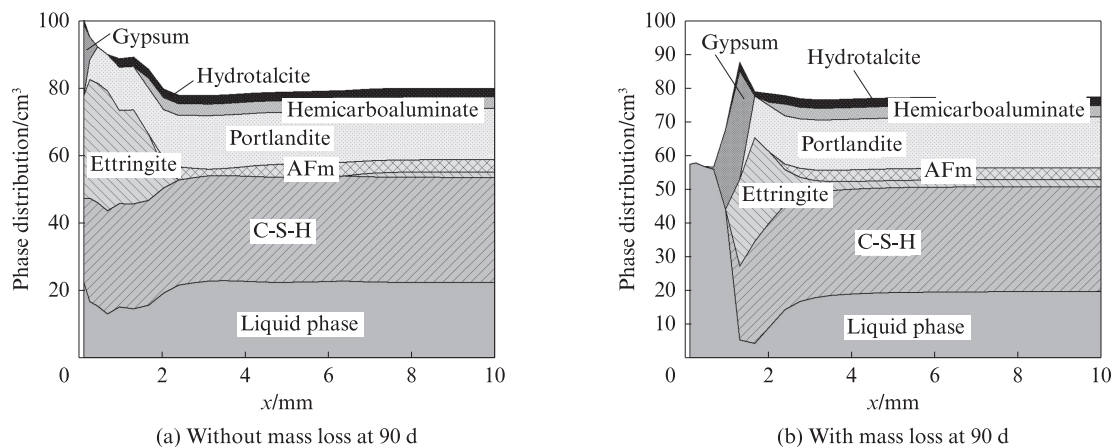


图5 质量损失对混凝土物相分布的影响
Fig. 5 Influence of mass loss on phase distributions of concrete

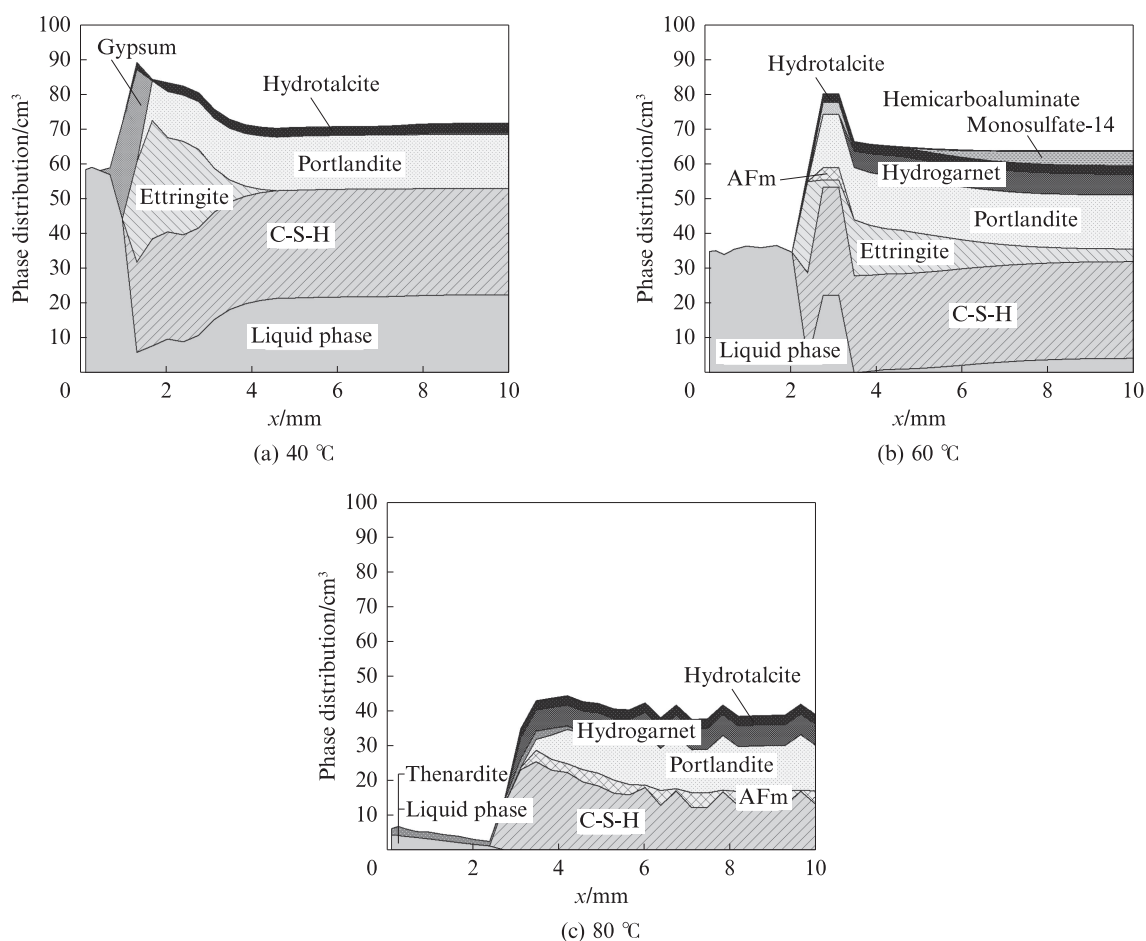


图6 不同温度下硫酸盐侵蚀90 d后混凝土的物相分布
Fig. 6 Phase distribution of concrete after sulfate attack for 90 d at different temperatures

3.3 温度对硫酸盐侵蚀混凝土孔溶液pH值的影响

不同温度下硫酸盐侵蚀90 d时混凝土孔溶液的pH值如图7所示. 由图7可见:不同温度下混凝土孔溶液pH值分布规律较为一致;随着温度的升高,混凝土孔溶液的pH值逐渐下降且最大降幅呈递减趋势. 需要说明的是,在23 °C时,混凝土孔溶液pH值在开始下降前略微升高(见图7星标处),这是由于混

土在侵蚀前沿处的CH被分解, OH^- 含量增加所致. 然而,随着温度的升高,混凝土中离子扩散速率加快,该现象被减弱.

3.4 温度对硫酸盐侵蚀混凝土孔隙率的影响

不同温度下硫酸盐侵蚀90 d后混凝土的孔隙率如图8所示. 由图8可见:(1)靠近混凝土侵蚀表面的孔隙率随着温度的升高而降低,而混凝土内部的孔隙

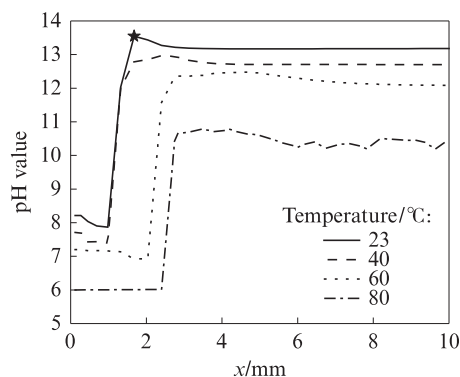


图7 不同温度下硫酸盐侵蚀90 d后混凝土孔溶液的pH值

Fig. 7 pH value of pore solution in concrete after sulfate attack for 90 d at different temperatures

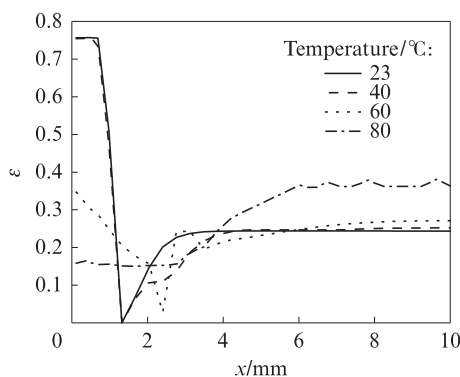


图8 不同温度下硫酸盐侵蚀90 d后混凝土的孔隙率

Fig. 8 Porosity of concrete after 90 d of sulfate attack at different temperatures

率随着温度的升高而有所增加。(2)当温度超过40 °C后,混凝土孔隙率分布规律发生显著转变,混凝土内部孔隙率逐渐超过侵蚀表面孔隙率,表明硫酸盐侵蚀机制可能随温度升高发生改变。

3.5 温度对硫酸盐侵蚀混凝土孔溶液中离子浓度的影响

不同温度下硫酸盐侵蚀90 d后混凝土孔溶液中 SO_4^{2-} 和 Ca^{2+} 的浓度如图9所示。由图9可见:(1)当侵蚀深度小于2.4 mm时,从外界扩散进入混凝土的 SO_4^{2-} 浓度随着温度的升高而增大;当侵蚀深度大于2.4 mm时,80 °C下混凝土孔溶液中 SO_4^{2-} 浓度迅速降至 $1.9 \times 10^{-7} \text{ mol/m}^3$ 左右,该位置为固相质量损失的临界点(图6(c))。(2)除了80 °C外,不同温度下混凝土孔溶液中的 Ca^{2+} 均在侵蚀深度1 mm附近出现浓度峰值,这是由于靠近侵蚀表面的CH溶解造成的。

3.6 讨论

温度升高加速离子扩散,促使硫酸盐更快进入混凝土并增加孔溶液中的离子溶出,导致混凝土物相损失区扩大。然而,不同温度下物相损失机理各异。AFt是引起硫酸盐侵蚀,导致混凝土开裂的主要原因

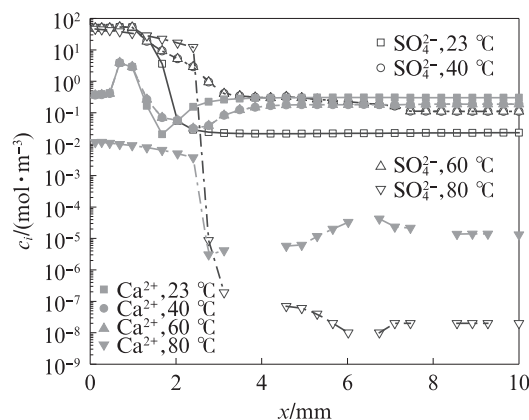
图9 不同温度下硫酸盐侵蚀90 d后混凝土孔溶液中 SO_4^{2-} 和 Ca^{2+} 的浓度

Fig. 9 Concentration of SO_4^{2-} and Ca^{2+} in concrete pore solution after 90 d of sulfate attack at different temperatures

之一。虽然适当提高温度会加快AFt的形成^[32-33],但其热稳定性较差,这一特性实际上有助于减轻混凝土的膨胀开裂现象。值得一提的是,本研究发现60 °C时AFt生成量已经减少,而该温度低于实验室合成AFt的热分解温度(70~93 °C)^[34-35]。这表明AFt的热稳定性可能与其存在环境条件密切相关。

在靠近侵蚀面区域,高温条件下混凝土的孔隙率较低温时有所降低。这是因为AFt在高温下逐渐分解,无法累积到足以引起质量损失和开裂的临界量。同时,无水芒硝的生成填充了部分孔隙,导致靠近混凝土表面的孔隙率随温度升高而降低。而对于内部未受侵蚀的混凝土部分,高温则会导致孔隙率增大,这主要是由于快速水化作用在未水化水泥颗粒外部形成了阻碍进一步反应的球壳^[36]。

此外,温度还通过影响pH值来进一步影响水化产物的稳定性。一方面,靠近混凝土侵蚀面孔溶液的pH值因温度升高而加速了 OH^- 的溶出速率,在相同侵蚀时间内,导致质量损失区范围较大;另一方面,孔溶液中的初始pH值由于CH溶解度与温度呈负相关而降低,这也解释了即便没有膨胀产物的出现,随着温度的升高,混凝土中的物相损失区域范围仍会扩大。

4 结论

(1)建立了基于热力学平衡的混凝土硫酸盐侵蚀反应-传输数值模型,实现了COMSOL-GEMS联合求解,并通过试验验证了该模型的有效性。进一步分析发现,混凝土中含S固相的膨胀开裂是导致S元素分布出现峰值的原因。

(2)随温度升高,硫酸盐侵蚀混凝土的质量损失

区范围逐渐扩大,但与膨胀开裂导致的损失不同.60℃以上主要是由于混凝土孔溶液中更低的初始pH值导致水化产物不稳定造成的;80℃时,水化产物石膏和钙矾石(Aft)完全分解,在混凝土质量损失区和内部(侵蚀深度为2.76~4.57 mm)生成了无水芒硝.

(3)硫酸盐腐蚀90 d后,混凝土中膨胀性腐蚀产物在高温时难以稳定存在.随着温度的升高,混凝土侵蚀面的孔隙率降低而内部孔隙率升高.相较于低温条件,在较高温度环境下,混凝土内部相同位置的孔溶液pH值偏低.

参考文献:

- [1] LOTHENBACH B, BARY B, LE BESCOP P, et al. Sulfate ingress in Portland cement [J]. Cement and Concrete Research, 2010, 40(8):1211-1225.
- [2] 姜磊. 硫酸盐侵蚀环境下混凝土劣化规律研究[D]. 西安:西安建筑科技大学, 2014.
- JIANG Lei. Study on deterioration of concrete under sulfate attack [D]. Xi'an:Xi'an University of Architecture and Technology, 2014. (in Chinese)
- [3] 王家滨, 张凯峰, 侯泽宇, 等. 西北复合盐侵蚀环境衬砌喷射混凝土离子扩散研究[J]. 土木工程学报, 2020, 53(11):21-35.
- WANG Jiabin, ZHANG Kaifeng, HOU Zeyu, et al. Ion diffusion in shotcrete lining under compound salt corrosion environment saline soil in Northwest China [J]. China Civil Engineering Journal, 2020, 53(11):21-35. (in Chinese)
- [4] 杨永敢, 康子豪, 詹炳根, 等. 初始损伤混凝土的抗硫酸盐侵蚀性能[J]. 建筑材料学报, 2022, 25(12):1255-1261.
- YANG Yonggan, KANG Zihao, ZHAN Binggen, et al. Sulfate resistance of concrete with initial damage[J]. Journal of Building Materials, 2022, 25(12):1255-1261. (in Chinese)
- [5] 刘超, 姚羿舟, 刘化威, 等. 硫酸盐干湿循环下再生复合微粉混凝土的劣化机理[J]. 建筑材料学报, 2022, 25(11):1128-1135.
- LIU Chao, YAO Yizhou, LIU Huawei, et al. Deterioration mechanism of recycled composite powder concrete under dry-wet cycles of sulfate[J]. Journal of Building Materials, 2022, 25(11):1128-1135. (in Chinese)
- [6] 尚明刚, 张云升, 何忠茂, 等. 盐渍土环境下钢筋混凝土恒电流加速锈蚀试验及可靠性分析[J]. 建筑材料学报, 2022, 25(7):751-759.
- SHANG Minggang, ZHANG Yunsheng, HE Zhongmao, et al. Constant current accelerated corrosion test and reliability analysis of reinforced concrete in saline soil environment[J]. Journal of Building Materials, 2022, 25(7):751-759. (in Chinese)
- [7] ZHU H H, YAN J X, LIANG W H. Challenges and development prospects of ultra-long and ultra-deep mountain tunnels [J]. Engineering, 2019, 5(3):384-392.
- [8] 张少辉, 王艳, 郭冰冰, 等. 温度场与硫酸盐侵蚀耦合作用混凝土孔结构分形特征演化规律[J]. 硅酸盐学报, 2024, 52(2):474-484.
- ZHANG Shaohui, WANG Yan, GUO Bingbing, et al. Evolution of fractal characteristics of concrete pore structure under coupling effect of temperature field and sulphate attack [J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2024, 52(2):474-484. (in Chinese)
- [9] SANTHANAM M, COHEN M D, OLEK J. Modeling the effects of solution temperature and concentration during sulfate attack on cement mortars [J]. Cement and Concrete Research, 2002, 32(4):585-592.
- [10] MAHMOODIAN M, ALANI A M. Effect of temperature and acidity of sulfuric acid on concrete properties [J]. Journal of Materials in Civil Engineering, 2017, 29(10):04017154.
- [11] 方祥位, 申春妮, 杨德斌, 等. 混凝土硫酸盐侵蚀速度影响因素研究[J]. 建筑材料学报, 2007, 10(1):89-96.
- FANG Xiangwei, SHEN Chunni, YANG Debin, et al. Investigations of influence factor on the rate of concrete sulfate attack[J]. Journal of Building Materials, 2007, 10(1):89-96. (in Chinese)
- [12] 胡晨光, 丁庆军, 胡曙光, 等. 变温下 SO_4^{2-} 对水泥硬化浆体中 Al^{3+} 配位分布的影响[J]. 功能材料, 2014, 45(2):2142-2146.
- HU Chenguang, DING Qingjun, HU Shuguang, et al. Effect of sulfate ions on distribution of Al^{3+} coordination in hardened cementpastes at variable temperature[J]. Journal of Functional Materials, 2014, 45(2):2142-2146. (in Chinese)
- [13] WANG P G, MO R, LI S, et al. A chemo-damage-transport model for chloride ions diffusion in cement-based materials: Combined effects of sulfate attack and temperature [J]. Construction and Building Materials, 2021, 288:123121.
- [14] 左晓宝, 孙伟. 硫酸盐侵蚀下的混凝土损伤破坏全过程[J]. 硅酸盐学报, 2009, 37(7):1063-1067.
- ZUO Xiaobao, SUN Wei. Full process analysis of damage and failure of concrete subjected to external sulfate attack[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2009, 37(7):1063-1067. (in Chinese)
- [15] 刘云强, 左晓宝, 黎亮, 等. 硫酸盐侵蚀下硬化水泥浆体微结构演变及膨胀过程的数值模拟[J]. 硅酸盐通报, 2022, 41(12):4128-4138.
- LIU Yunqiang, ZUO Xiaobao, LI Liang, et al. Numerical simulation on microstructure evolution and expansionprocess of hardened cement paste under sulfate attack[J]. Bulletin of the Chinese Ceramic Society, 2022, 41(12):4128-4138. (in Chinese)
- [16] 蒋金洋, 郑皓睿, 孙国文, 等. 硫酸盐侵蚀混凝土的数值模拟[J]. 建筑材料学报, 2023, 26(10):1047-1053.
- JIANG Jinyang, ZHENG Haorui, SUN Guowen, et al. Numerica simulation of sulfate attack in concrete[J]. Journal of Building Materials, 2023, 26(10):1047-1053. (in Chinese)
- [17] QIN S S, ZOU D J, LIU T J, et al. A chemo-transport-damage model for concrete under external sulfate attack [J]. Cement and Concrete Research, 2020, 132:106048.
- [18] ZOU D J, QIN S S, LIU T J, et al. Experimental and numerical study of the effects of solution concentration and temperature on concrete under external sulfate attack [J]. Cement and Concrete Research, 2021, 139:106284.

- [19] 计浏, 刘清风. 硫-氯耦合侵蚀和钙溶蚀作用下混凝土中物质传输与反应机理的数值研究[J]. 硅酸盐学报, 2024, 52(5):1486-1498. JI Lie, LIU Qingfeng. Mass transfer and chemical reaction in concrete subjected to chloride-sulfate attack and calcium leaching: A numerical study[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2024, 52(5):1486-1498. (in Chinese)
- [20] MENG Z Z, LIU Q F, UKRAINCZYK N, et al. Numerical study on the chemical and electrochemical coupling mechanisms for concrete under combined chloride-sulfate attack [J]. Cement and Concrete Research, 2024, 175:107368.
- [21] IKUMI T, SEGURA I. Numerical assessment of external sulfate attack in concrete structures: A review [J]. Cement and Concrete Research, 2019, 121:91-105.
- [22] KULIK D A, WAGNER T, DMYTRIEVA S V, et al. GEM-selektor geochemical modeling package: Revised algorithm and GEMS3K numerical kernel for coupled simulation codes [J]. Computational Geosciences, 2013, 17:1-24.
- [23] HAYNES W M. CRC handbook of chemistry and physics[M]. Boca Raton: CRC press, 2016.
- [24] BOVING T B, GRATHWOHL P. Tracer diffusion coefficients in sedimentary rocks: Correlation to porosity and hydraulic conductivity [J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2001, 53(1/2):85-100.
- [25] ADLER P M, JACQUIN C G, THOVERT J F. The formation factor of reconstructed porous media [J]. Water Resources Research, 1992, 28(6):1571-1576.
- [26] DIAB A M, ELYAMANY H E, ABD ELMOATY M, et al. Estimation of critical ettringite content due to sulfate attack [J]. ACI Materials Journal, 2019, 116(6):55-64.
- [27] THOENEN T, HUMMEL W, BERNER U, et al. The PSI/ Nagra chemical thermodynamic database 12/07 [R]. Villigen: Paul Scherrer Institute, 2014.
- [28] LOTHENBACH B, KULIK D A, MATSCHEI T, et al. Cemdata18: A chemical thermodynamic database for hydrated Portland cements and alkali-activated materials [J]. Cement and Concrete Research, 2019, 115:472-506.
- [29] NARDI A, IDIART A, TRINCHERO P, et al. Interface COMSOL-PHREEQC (iCP), an efficient numerical framework for the solution of coupled multiphysics and geochemistry [J]. Computers and Geosciences, 2014, 69:10-21.
- [30] GUO B B, HONG Y, QIAO G F, et al. A COMSOL-PHREEQC interface for modeling the multi-species transport of saturated cement-based materials [J]. Construction and Building Materials, 2018, 187:839-853.
- [31] MALTAIS Y, SAMSON E, MARCHAND J. Predicting the durability of Portland cement systems in aggressive environments —Laboratory validation [J]. Cement and Concrete Research, 2004, 34(9):1579-1589.
- [32] 张文生, 张金山, 叶家元, 等. 合成条件对钙矾石形貌的影响 [J]. 硅酸盐学报, 2017, 45(5):631-638. ZHANG Wensheng, ZHANG Jinshan, YE Jiayuan, et al. Influence of synthesis conditions on morphology of ettringite [J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2017, 45(5):631-638. (in Chinese)
- [33] LI Z G, WANG Y, TONG Y P, et al. Compressive and hydration behavior of steel fiber-reinforced concrete under high geothermal environment [J]. Construction and Building Materials, 2023, 406:133378.
- [34] ZHOU Q, GLASSER F P. Thermal stability and decomposition mechanisms of ettringite at $<120\text{ }^{\circ}\text{C}$ [J]. Cement and Concrete Research, 2001, 31(9):1333-1339.
- [35] 钱觉时, 余金城, 孙化强, 等. 钙矾石的形成与作用 [J]. 硅酸盐学报, 2017, 45(11):1569-1581. QIAN Jueshi, YU Jincheng, SUN Huaqiang, et al. Formation and function of ettringite in cement hydrates [J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2017, 45(11):1569-1581. (in Chinese)
- [36] DAMIDOT D, LORS C. Mutual interaction between hydration of Portland cement and structure and stoichiometry of hydrated calcium silicate [J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2015, 43(10):1324-1330.