第 49 卷第 5 期　　硅　酸　盐　学　报　　Vol. 49，No. 5
2021 年 5 月　　JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY　　May，2021
http://www.gxyb.cbpt.cnki.net　　DOI：10.14062/j.issn.0454-5648.20200448

非规则水泥颗粒水化和孔隙结构表征的数值模拟

刘志勇[1,2]，张云升[1,2]，陈威威[3]，刘　诚[1]，汤安琪[3]，谢德擎[1]

(1. 东南大学，江苏省土木工程材料重点实验室，南京 211189；2. 东南大学材料科学与工程学院，南京 211189；
3. 中国矿业大学力学与土木工程学院，江苏 徐州 221116)

摘　要：为了描述和重构水泥颗粒真实不规则的颗粒形态，更好地理解水泥基材料水化过程、微观结构演变和力学性能变化，基于离散方法和元胞自动机理论的中心生长模型开发了一种不规则颗粒重构方法，构建了水泥粒子形状库，并将不规则水泥颗粒引入 CEMHYD3D 模型中，建立了非规则水泥颗粒的水化模型，分析了颗粒形状对水化进程和孔隙特征参数的影响规律。结合数值模型与实验值或解析模型比对，发现非规则水泥颗粒提高了水化模型的可靠性和精确度；非球形基模型的总孔隙率和孔径范围均小于球形基模型，而非球形基微结构的各类孔隙比表面积均大于球形基模型。

关键词：非规则水泥颗粒；水化模型；微结构演变；孔隙结构
中图分类号：TQ172.1　　**文献标志码：**A　　**文章编号：**0454–5648(2021)05–0955–09
网络出版时间：2021–4–12



Numerical Simulations of Hydration and Pores Characterization of Irregular Cement Particles

LIU Zhiyong[1,2], *ZHANG Yunsheng*[1,2], *CHEN Weiwei*[3], *LIU Cheng*[1], *TANG Anqi*[3], *XIE Deqing*[1]

(1. Jiangsu Key Laboratory of Civil Engineering Materials, Southeast University, Nanjing 211189, China; 2. School of Materials Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China; 3. School of Mechanics and Civil Engineering, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, Jiangsu, China)

Abstract: In order to describe and reconstruct the true irregular particle morphology of cement particles and clarify the hydration process, microstructure evolution and mechanical property development of cement-based materials, an irregular particle reconstruction method was proposed by a discrete method and a central growth model based on a cellular automata theory. A cement particle shape data-base was established. The irregular cement particles were introduced into the CEMHYD3D model, and an irregular basis hydration model was constructed. The effect of particle shape on the hydration process and pore characteristic parameters were analyzed. The reliability and accuracy of the hydration model after the introduction of irregular cement particles were verified. The total porosity and pore size range of the non-spherical-based model are smaller than those of the spherical-based model, while the specific surface area with various pores of the non-spherical-based model is greater than that of the spherical-base model.

Keywords: irregular cement particle; hydration model; microstructure evolution; pore structure

水泥粉末颗粒和集料的形状对水泥基材料工作性能和力学性能起着至关重要的作用[1–4]。因此，准确描述和重构真实不规则的颗粒形态，是更好理解水泥基材料水化过程、微观结构演变和力学性能发展的关键。国内外学者已经建立了众多相对规则的非球形颗粒的几何重构模型。例如，利用二次曲面方程(二次曲线方程)重构椭球形(椭圆形)颗粒[5]，利用线性、非线性规划理论构造凸多面体颗粒[6]，利用延拓方法构造凸多面体颗粒[7]，利用 Fourier 级数和球谐函数重构凸形颗粒[8]等。二次曲面方程重构法是利用二维椭圆形颗粒在笛卡尔坐标系的控制方程构造椭圆，线性、非线性规划理论是指在三维空间利用一定数量的平面构造凸多面体，这些平面的交点构成凸多面体的顶点域，无法控制特定凸多面体

收稿日期：2020–06–21。　修订日期：2020–08–06。
基金项目：国家自然科学基金面上项目(51778613，52078125)；中央高校基本科研业务费专项资金(2242020k40004)。
第一作者：刘志勇(1985—)，男，博士，研究员。

Received date: 2020–06–21.　**Revised date:** 2020–08–06.
First author author: LIU Zhiyong(1985–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: liuzhiyong0728@163.com

的粒径。延拓方法是指在简单正多边形、正多面体基础上延拓构造复杂的凸多边形、凸多面体[7,9]。该方法能构造任意形状的凸多面体，但很难控制特定凸多面体的粒径。Fourier 级数和球谐函数要结合专业的成像设备与图像分析软件才能获取真实颗粒的关键参数。

水泥基材料水化的计算机模型精度决定了水化模型模拟结果的准确及模型的应用范围。绝大数水化模型软件在建模过程中为了降低运行成本，并考虑建模过程的可操作性，都将模拟的颗粒形状近似为球形，如 Jennings-Johnson 模型[10]、Navi-Pignat 模型[11–12]、HymoStruc 模型[13]、μic 模型[14]、CEMHYD3D 模型[15–16]等。其中 CEMHYD3D 模型是基于真实水泥颗粒的粒径分布以及矿物相的空间分布来构造水泥浆体三维结构。利用该模型不仅能够获取各种水化物相的种类、数量及分布等微结构信息，而且还可得到水泥基材料的水化程度。但目前仍然存在一些问题，比如 CEMHYD3D 模型在模拟过程中将水泥颗粒看作为球形颗粒，影响模拟结果的精度和准确度。

本研究基于元胞自动机开发了一种不规则颗粒重构方法，并将构建的不规则水泥颗粒引入 CEMHYD3D 模型中，进行水化进程演变的数值模拟，分析不同颗粒形状对水化产物和孔结构的影响，并通过对比实验数据、解析模型进行模型验证。

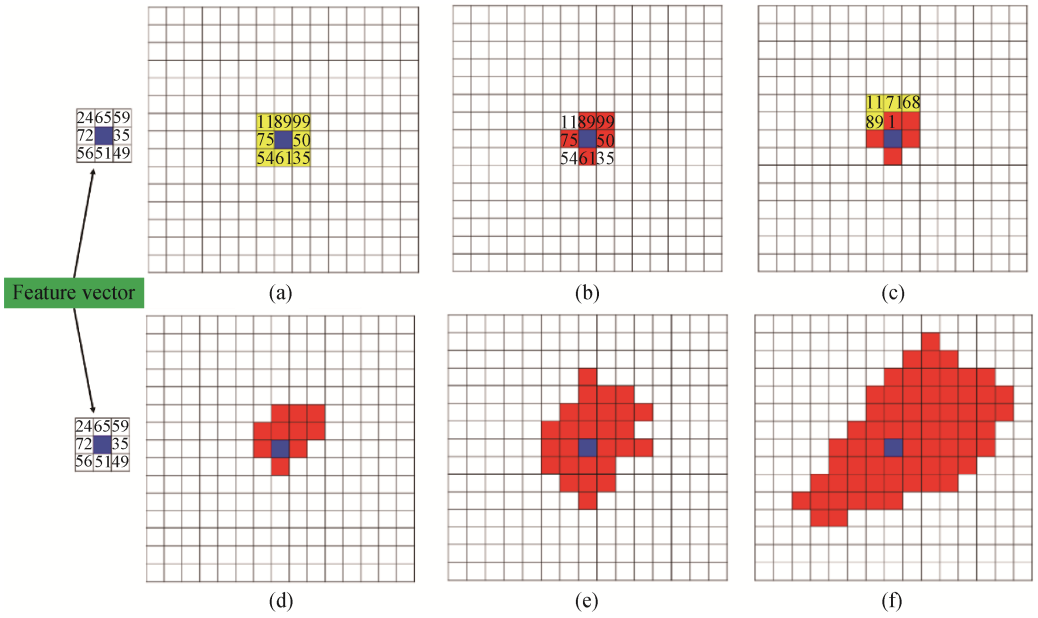
1 重构不规则颗粒

为了建立基于非规则水泥颗粒的水化模型，首先需要构建单个不规则水泥颗粒，并将其引入到 CEMHYD3D 水化模型中。

本研究提出并发展了基于离散方法和元胞自动机理论的中心生长法则，用于重构不规则颗粒。

1.1 单个不规则颗粒重构法则

重构法则的示意图采用二维方式(如图 1)。二维平面内把位邻定义为共边与共点方式，即对于 1 个中心元胞有 8 个邻近单元。



Red pixels are activated cells.

图 1 中心生长法则二维示意图(红色为激活邻近元胞)

Fig. 1 2D schematic diagram of central growth law

重构法则：

(1) 生成 1 个二维离散空间作为生长空间，空间中离散单元为规则的正方形元胞。把空间中的中心位置作为中心元胞，并将中心元胞位置信息和其邻近单元的定义的特征值(特征向量 Feature vector)写入到链表中。特征值表示该位置处生长为颗粒相的概率。图 1a 为 1 个 15×15 的离散平面，选取该平面的核心位置作为中心元胞(蓝色像素)，把特征向量赋给邻近位置的像素(黄色像素)。对于在三维空间中，特征向量中的特征值有 18 个，分别赋给不同的值以控制颗粒生长。

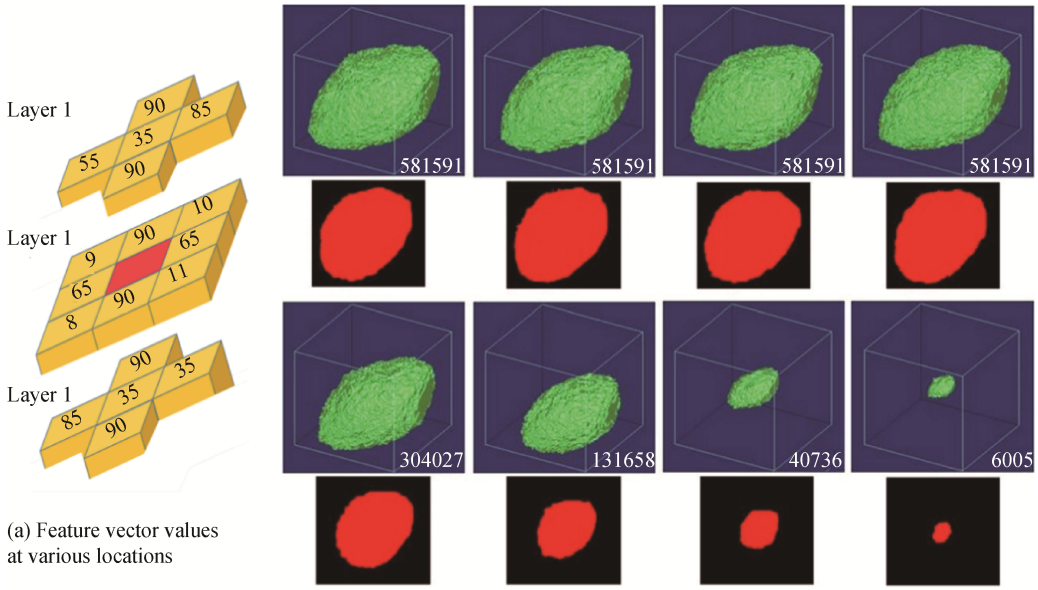
(2) 采用蒙特卡罗法 Monte Carlo 法随机生成 8 个 0～100 的数值，将随机生成的 8 个数字分别与特征值进行对比，若随机值大于该位置处的特征值，则

将其转化为颗粒像素，标记为红色；小于该位置处的特征值则不改变其属性，如图 1b 所示。

(3) 以红色像素为中心，重复上述步骤(1)和(2)，如图 1c 所示。随着不断地进行上述过程，越来越多的像素被标记，形成不规则的水泥颗粒团簇(图 1d 和图 1e)。该过程一直进行到生成的水泥颗粒达到目标颗粒的设定参数。图 1f 是通过重构规则生产的一个像素值为 67 的二维颗粒。在三维空间中，非规则颗粒的产生规则与上述类似，只是将中心近邻位置由 8 改变为 18。

1.2　特征向量

本研究通过特征向量控制不规则颗粒的最终形状，该向量为预先设定的 8 个/18 个 0 至 100 范围内的数字，以表示相应位邻处生长为水泥物相的概率。其数字越大，则转化的概率越小，那么颗粒朝该方向生长的可能性也就越小。为了验证特征向量在控制颗粒形状时的稳定性和可行性，以三维不规则形状颗粒的生长为例，选取特征三维向量生成类椭圆颗粒。分别使用这 2 个特征向量生成具有不同数量最终像素/体素的三维生长颗粒进行研究，结果如图 2 所示。



(a) Feature vector values at various locations

(b) Irregular particles obtained based on growth rules

图 2　三维特征向量生成的包含不同体素数量非规则水泥颗粒

Fig. 2　A circular particle containing different number of voxelses generated by a three-dimensional feature vector

通过比较生成的图形可以看出，采用不同的特征向量生长得到的颗粒形状不同。对同一特征向量生长得到的具有不同面积/体积的颗粒可以看到，虽然颗粒含有的像素/体素数量差别较大，但总体形状仍具有良好的相似性，只是局部形状产生了差异。

2　构建非规则水泥颗粒水化演变模型

一旦建立了颗粒形状库后，随机颗粒的有序堆积过程就可以根据要求的水灰比进行，从而重建水泥浆体的初始三维微结构。

随机颗粒有序堆积步骤如下：

(1) 旋转颗粒

为了保持颗粒真实取向的随机性，本研究使水泥颗粒在生长空间中以随机角度 α 旋转，从而保持其随机取向。

在对水泥颗粒进行旋转时，不仅会造成颗粒边缘的粗糙度增加，更会造成颗粒像素的丢失，出现“筛漏现象”[6]。为了解决由于旋转造成的颗粒像素丢失问题，可以采用 Boolean 运算进行颗粒像素的判断。该算法的主要思想是将丢失像素点“激活”为颗粒像素。

(2) 周期边界与颗粒重叠算法

当生成的不规则颗粒经过旋转后得到随机取向，便可以将该颗粒投入到系统空间内进行微结构的重构。颗粒在引入系统时仍然采用随机分布的算法，控制颗粒中心生长点随机投入到一个系统空间体素点，进而使颗粒填充一定的空间。当颗粒较大

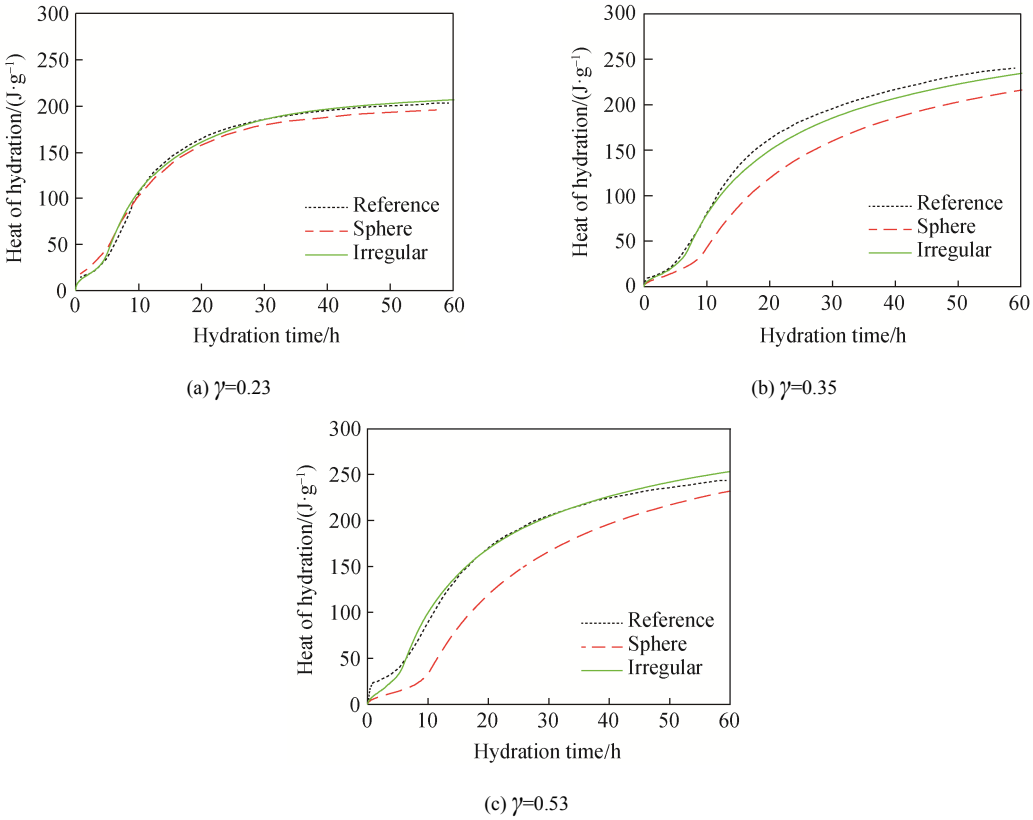
或者中心生长点占据体素比较靠近边界时，其整体颗粒可能出现超出边界的情况，这时可以采用周期边界条件以减小有限尺寸效应。

同时，颗粒在投入系统空间时需要检查是否与前面投入的颗粒发生重叠。本研究采用最小外接圆/球进行重叠算法的优化。需要指出的是，水泥颗粒在随机分布过程中应从最大的粒子开始投入，然后再由较小的粒子来填充，这样剩余可用空间就可以被更小的粒子填充，从而达到更高填充密度。该方法在运行的过程中避开了传统方法中重复复制扫描过程，节省了大量时间，提高了执行效率。

3 水化进程的数值模拟及验证

3.1 水化热

基于球形和非规则水泥颗粒，选取时间-周期转化因子 0.000 17 h/周期[2]，采用 CEMHYD3D 模拟了 3 种水灰比(0.23、0.35、0.53)净浆微结构水化过程，获取水泥水化放热曲线。图 3 为从拌合开始至 60 h 的实验实测[17]和模拟过程获取的水化放热曲线。对比放热曲线可发现：基于非规则颗粒的模拟放热曲线和实测曲线吻合良好，说明本研究构建的非规则水泥颗粒水化模型可以较好地模拟水泥净浆的水化放热过程。



(a) γ=0.23 (b) γ=0.35

(c) γ=0.53

γ is water-to-cement ratio of 0.23, 0.35 and 0.53, respectively.

图 3 水化热的实验结果与模拟值对比

Fig. 3 Comparison between experimental and simulated results of hydration heat

3.2 水化程度

水化程度可采取如式(1)所示的指数型函数[18–19]计算：

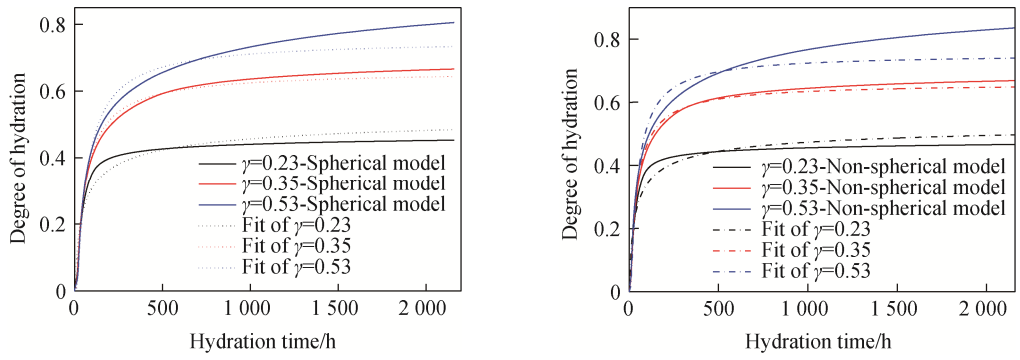
$$\alpha(t_e)=\alpha_u.\exp(-[\frac{\tau}{t_e}]^{\beta}) \tag{1}$$

式中：$\alpha(t_e)$为在时间 t_e 时的水化程度，%；τ 为水化时间参数，h；β 为水化形状参数；α_u 是最终的水化程度，%。Mills[20]指出最终水化程度与水灰比密切相关，其在大量实验基础上得出与水化温度无关的最终水化程度计算公式，如式(2)：

$$\alpha_u=\frac{1.031\gamma}{0.194+\gamma} \tag{2}$$

式中：γ 为水灰比。

基于上述计算公式，把水化程度计算值与模拟值进行对比，结果如图 4 所示。由图 4 可知，模拟结果与计算结果具有较好一致性，这说明 CEMHYD3D 模型模拟水化进程是可行的。



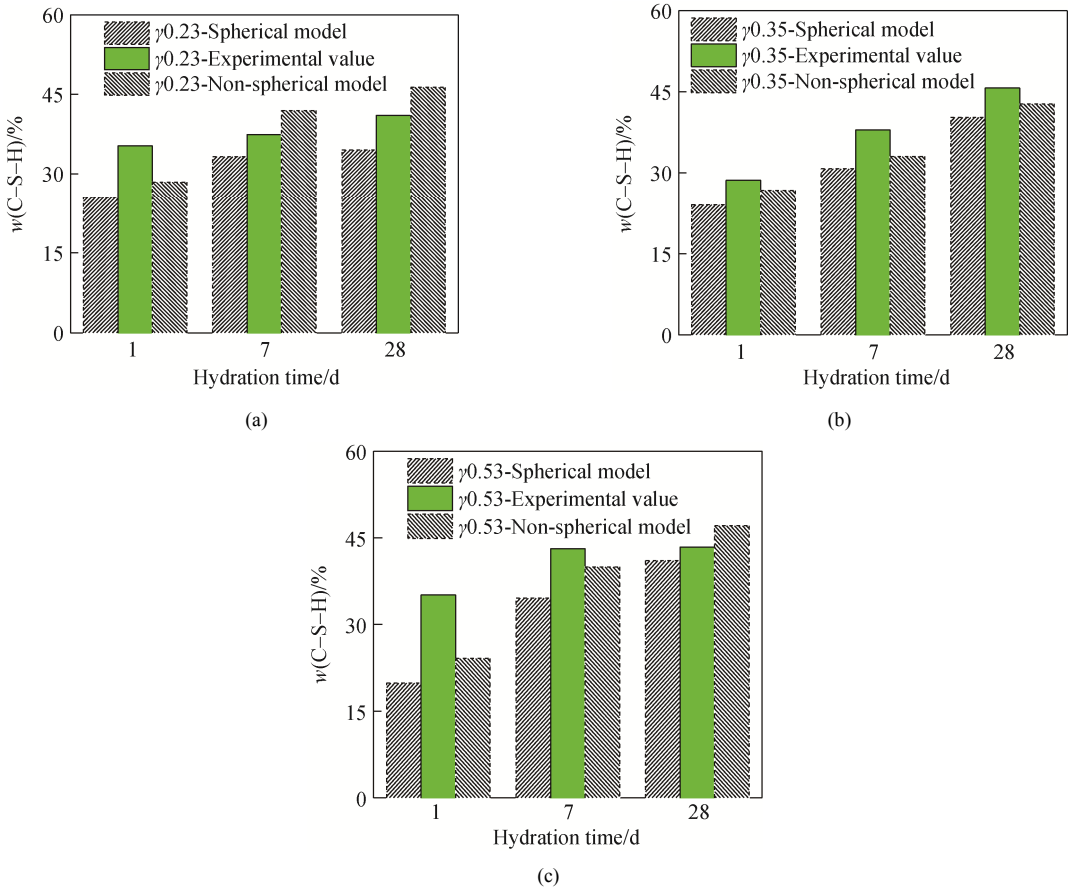
(a) Spherical model　　(b) Non-spherical model

图 4　不同水灰比、龄期水泥浆体水化程度模拟结果与理论模型结果对比

Fig. 4　Comparison between simulation results and theoretical model results

3.3　水化产物

将水化产物中 C–S–H、CH 含量模拟结果与谢德擎实验测得 C–S–H 和 CH 的含量[21]做对比，分别如图 5 和图 6。总体来看，模拟值与实验值吻合良好。需要指出的是，非规则基模型比球形基的水化产物数量多，这是由于非规则水泥颗粒与水分接触面积增大，导致水化反应较快。此外，C–S–H 含量的模拟值与实验值在水化初期差距较大，最大误差达 32%。造成这种差距的原因为：1) 早期水化反应受外界因素的影响非常显著，而水化模拟还未达到能够真实反映所有实际影响因素下的程度；2) Retieved 定量表征 C–S–H 的方法存在缺陷，其在计算时是将结晶相剔除后，以剩余的非结晶相作为 C–S–H 的量，因此造成了统计的误差。对比 CH 含量的模拟值与实验值(图 6)，可以看出二者较为一致。



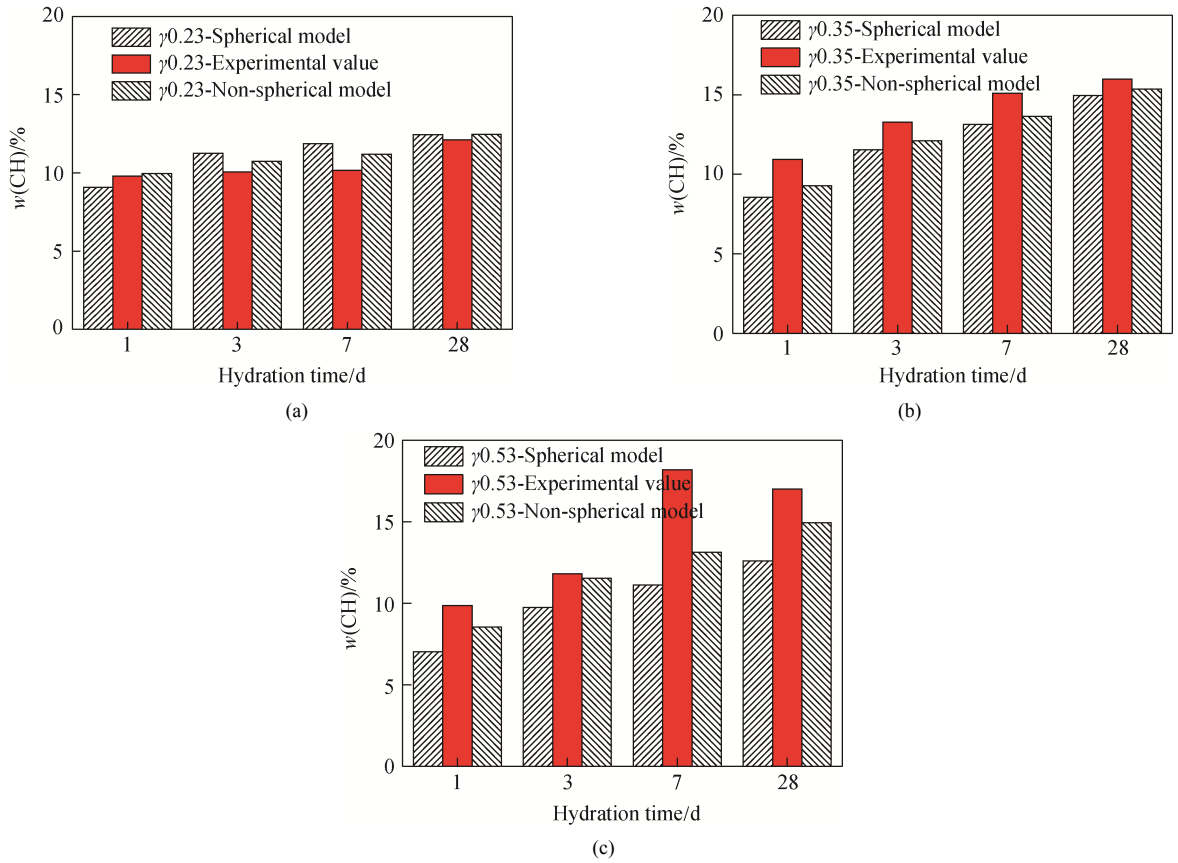
(a)　　(b)

(c)

w is mass fraction.

图 5　C–S–H 含量的模拟值与实验值对比

Fig. 5　Comparison between simulated and experimental values of C–S–H content



γ is water-cement ratio. CH is $Ca(OH)_2$.

图 6 氢氧化钙含量的模拟值与实验值对比

Fig. 6 Comparison between simulated and experimental values of $Ca(OH)_2$ content

4 水化孔隙结构特征参数

4.1 孔隙率

基于 T. C. Powers 提出的胶孔比理论[22]可以得到孔隙率，如式(3)：

$$p_c = \frac{\gamma - 0.36\alpha}{\gamma + 0.32} \times 100\% \quad (3)$$

式中：p_c 为孔隙率，%；γ 为水灰比；α 为水化程度。将式(3)得到的理论值与模拟值进行对比，如图 7 所示。由结果可知，模拟得到的孔隙率与 Powers 理论值表现出较好的一致性；在水化初期模拟值与理论值更为接近，如水灰比为 0.23 且水化程度 10%时二者误差仅为 1.5%。Powers 理论的提出主要针对早期水化过程，因此两者在水化后期出现较大的不同。

4.2 孔径分布

通过三维内侵蚀法模拟得到的累积孔容曲线和孔径分布曲线如图 8 所示。三维内侵蚀法是一种由外向内标记孔相的方法[14–23]。由图 8 可知，随着水化的进行，总孔体积逐渐减小；较大水灰比具有较大的孔径范围，但随水化的进行孔径范围逐渐收窄。然而，在水灰比为 0.35 且水化程度 50%时，孔径的范围却出现了扩大的现象，这与实际情况不符。这种现象出现的原因是由 CEMHYD3D 模型中水化机理决定的：在水化后期，受水灰比限制，水化很难进行，但元胞自动机中元胞扩散机制仍在进行，这有可能导致部分孔径增大。对比两种不同水泥颗粒水化后的孔结构可发现，非球形基模型得到的孔径范围小于球形基模型，这是因为非球形基模型水化过程更为剧烈。

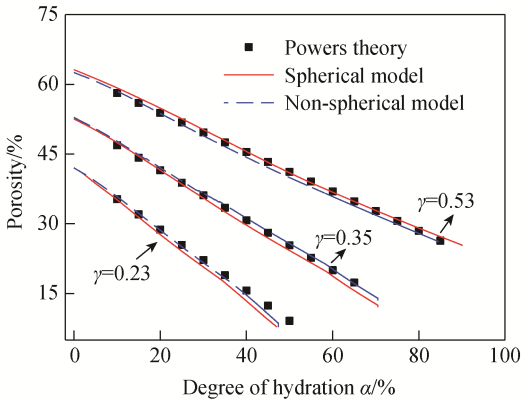
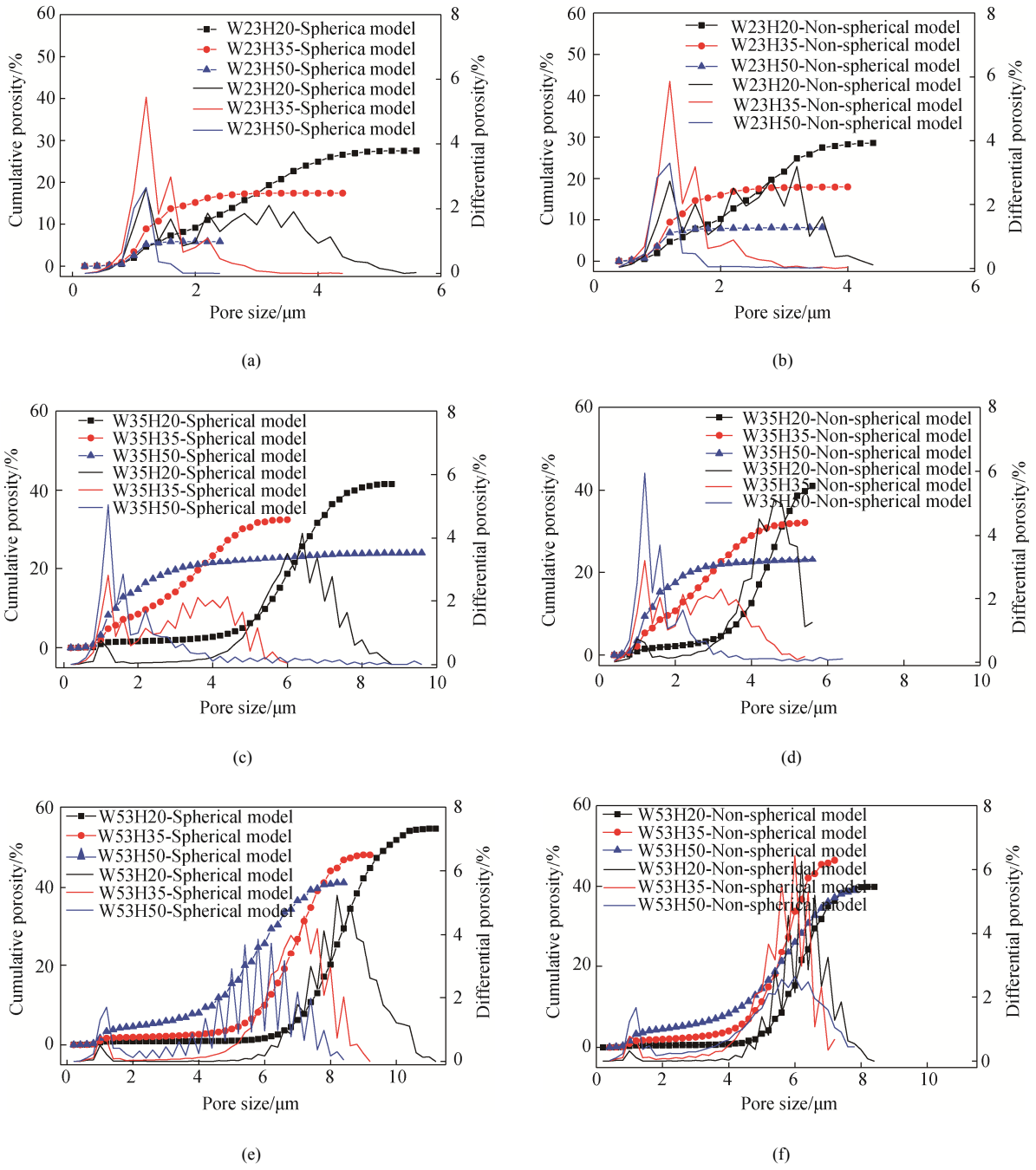


图 7 不同水灰比的孔隙率理论值与模拟值比较

Fig. 7 Comparison of theoretical and simulated values of porosity with different water-cement ratios



W23H20 represents the water cement ratio is 0.23 and hydration degree is 20%.

图 8　采用三维体素内侵蚀法得到的孔径分布

Fig. 8　Pore size distribution by three-dimensional voxel-erosion method

4.3　孔的比表面积

3 种水灰比在不同水化程度下的孔比表面积统计结果如表 1 所示。由表 1 可知，水灰比和水化程度对孔比表面积有显著影响：随着水化进行，水灰比越小，孔比表面积越大，这与水灰比降低而大孔减少和小孔增加相一致。采用相应回归方程的线性关系可以更好地描述表 1 所示的孔比表面积与水化程度的关系，如式(4)：

$$\begin{cases} S_{0.23} = 1.58 + 6.89\alpha \\ S_{0.35} = 1.05 + 4.92\alpha \\ S_{0.53} = 0.62 + 3.45\alpha \end{cases} \tag{4}$$

式中：S 为孔比表面积，m^2/g；α为水化程度，%。可以看出，随着水灰比增大，水化程度的增大对比表面积增加的影响减小。将球形基与非球形基模型的孔比表面积对比，发现除水灰比 0.23 且水化程度 50%外其它条件下球形基模型的孔比表面积均小于非球形基的。

表 1 不同水化程度下孔的比表面积

Table 1 Specific surface area with various hydration degrees

Hydration degree	Shperical model			Non-shperical model		
	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53
0.20	2.945 2	2.022 1	1.305 7	3.056 2	2.204 4	1.509 7
0.35	4.028 2	2.806 7	1.828 1	4.101 6	2.980 2	2.068 7
0.50	5.013 2	3.499 1	2.342	4.765 8	3.676 2	2.558 9

表 2 球型基模型 3 类孔的比表面积

Table 2 Specific surface area of three types of pores in spherical base model

Hydration degree	Continuous pore			Dead-end pore			Isolated pore		
	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53
0.20	2.72	1.89	1.30	4.75	5.19	5.28	5.23	5.54	5.64
0.35	0.00	2.57	1.77	3.39	4.77	4.94	4.33	5.16	5.43
0.50	0.00	2.90	2.17	4.88	3.85	4.65	5.07	4.78	5.22

表 3 非球型基模型 3 类孔的比表面积

Table 3 Specific surface area of the three types of pores in non-spherical base model

Hydration degree	Continuous pore			Dead-end pore			Isolated pore		
	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53	γ=0.23	γ=0.35	γ=0.53
0.20	2.807 6	2.098 4	1.455 9	4.342 7	5.215 1	5.455 3	5.251 4	5.586 9	5.738 1
0.35	0	2.726 5	1.963 3	3.640 2	4.679 7	5.239 1	4.156 7	5.229 2	5.506 1
0.50	0	3.097 7	2.368 2	4.647 3	4.027 3	4.810 7	4.769 6	4.721	5.271 5

基于燃烧算法标记出 3 种孔类型；连通孔、半连通孔和封闭孔。3 种孔的比表面积如表 2 和表 3 所示。结果表明：水化程度 20%～35%，随着水化程度增加，封闭孔和半连通孔的比表面积减小，而连通孔的比表面积增大；水灰比越小，封闭孔和半连通孔的比表面积降低幅度越大。结合孔径分布和孔隙率的统计结果可知，造成这种现象的原因是水化产物填充了孔隙，形成了孔隙尺寸较大的封闭孔和半连通孔隙；水灰比越小，水化产物的这种填充作用就越显著。然而，这种趋势在连通孔消失后发生了变化。当水灰比为 0.23，水化程度为 50%时孔比表面积大于水化程度为 35%时，因为当连通孔消失时，封闭孔和半连通孔减少，孔隙直径减小。对比非球形基与球形基模型可发现，在相同水化程度下非球形基的各类孔比表面积均大于球形基模型的，这说明非球形基模型水化后其孔结构复杂程度大于球形基模型的。

5 结论

1) 将建立的非球形颗粒引入 CEMHYD3D 模型中，构建了非规则颗粒的水化模型。结合非球形基模型与实验值或解析模型比对，验证了非规则水泥颗粒引入后 CEMHYD3D 水化模型的可靠性。

2) 基于 CEMHYD3D 水化模型建立了 3 种不同水灰比的水泥浆体微结构，并获取了 3 者的孔结构特征。非球形基水化模型得到的孔隙率小于球形基的。孔隙率在微结构演变过程中逐渐减小；同一水化程度下孔隙率随水灰比的降低而减小。

3) 随着水化的进行，总孔体积逐渐减小。较大水灰比时具有较大的孔径范围，但随水化的进行而孔径范围变窄。三维内侵蚀法模拟得到非球形基模型的孔径范围小于球形基模型。

4) 非球形基的各类孔比表面积均大于球形基的。水灰比和水化程度对孔比表面积有显著影响：随着水化进行，水灰比越小，孔比表面积越大。随着水化程度的增加，封闭孔和半连通孔的比表面积减小，而连通孔的比表面积增大。

参考文献:

[1] JAMKAR S S, RAO C B K. Index of aggregate particle shape and texture of coarse aggregate as a parameter for concrete mix proportioning[J]. Cem Concr Res, 2004, 34(11): 2021–2027.

[2] LIU L, SHEN D, CHEN H, et al. Aggregate shape effect on the diffusivity of mortar[J]. Compos Struct, 2014, 144: 40–51.

[3] GEIKER M R, BRANDL M, THRANE L, et al. On the effect of coarse aggregate fraction and shape on the rheological properties of self-compacting concrete[J]. Cem Concr Aggr, 2002, 24(1): 3–6.

[4] 许文祥, 陈惠苏. 集料形状和尺寸对混凝土边界效应的影响[J]. 硅

酸盐学报, 2011, 39(09):1498−1504.
XU Wenxiang, CHEN Huisu. J Chin Ceram Soc, 2011, 39(9): 1498−1504.

[5] XU W, CHEN H. Microstructural characterization of fresh cement paste via random packing of ellipsoidal cement particles[J]. Mater Charact, 2012, 66: 16−23.

[6] LEE Y, FANG C, TSOU Y R, et al. A packing algorithm for three-dimensional convex particles[J]. Granular Matter, 2009, 11(5): 307−315.

[7] 高政国, 刘光廷. 二维混凝土随机骨料模型研究[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2003, 43(5): 710−714.
GAO Z, LIU G. J Tsinghua Univ(Sci Tech), 2003, 43(5): 710−714.

[8] KEYS A S, IACOVELLA C R, GLOTZER S C. Characterizing complex particle morphologies through shape matching: Descriptors, applications, and algorithms[J]. J Comput Phys, 2011, 230(17): 6438−6463.

[9] 刘光廷, 高政国. 三维凸型混凝土骨料随机投放算法[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2003, 43(8): 1120−123.
LIU Guangting, GAO Zhengguo. J Tsinghua Univ(in Chines), 2003, 43(8): 1120−1123.

[10] JENNINGS H M, JOHNSON S K. Simulation of microstructure development during the hydration of a cement compound[J]. J Am Ceram Soc, 1986, 69(11): 790−795.

[11] NAVI P, PIGNAT C. Simulation of cement hydration and the connectivity of the capillary pore space[J]. Adv Cem Based Mater, 1996, 4(2): 58−67.

[12] BREUGEL K V. Numerical simulation of hydration and microstructural development in hardening cement-based materials (II) Applications[J]. Cem Concr Res, 1995, 25(3): 522−530.

[13] VAN BREUGEL K. Numerical simulation of hydration and microstructural development in hardening cement-based materials[J]. Cem Concr Res, 1992, 25(2): 319−331.

[14] SHASHANK BISHNOI, Karen L. Scrivener. μic: A new platform for modelling the hydration of cements[J]. Cem Concr Res, 2009, 39: 266−274.

[15] BENTZ D P. CEMHYD3D: A three-dimensional cement hydration and microstructure development modeling package: Version 3.0[R]. NIST Interagency/Internal Report (NISTIR), 2000.

[16] BENTZ D P. Three-dimensional computer simulation of portland cement hydration and microstructure development[J]. J Am Ceram Soc, 1997, 80(1): 3−21.

[17] LIU Z, ZHANG Y, JIANG Q, et al. Solid phases percolation and capillary pores depercolation in hydrating cement pastes[J]. J Mater in Civ Eng, 2013, 26(12): 04014090(1)−04014090 (10).

[18] PANE I, HANSEN W. Concrete hydration and mechanical properties under nonisothermal conditions[J]. Aci Mater J, 2002, 99(6): 534−542.

[19] HANSEN P F, PEDERSEN E J. Curing of concrete structures[J]. CEB Information Bull, 1985, 166: 42.

[20] MILLS R H. Factors influencing cessation of hydration in water cured cement pastes[J]. Highway Res Board Special Report, 1966: 406−424.

[21] 谢德擎. 基于不规则颗粒的水泥基材料水化进程及其传输性能的数值模拟[D]. 南京: 东南大学, 2015.
XIE Deqing. Numerical simulation of transport properties and hydration process of cement-based materials reconstructed by irregular particles (in Chinese, dissertation). Nanjing: Southeast University, 2015.

[22] POWERS T C, BROWNYARD T L. Studies of the physical properties of hardened portland cement paste[J]. ACI J Proc, 1946, 43(9): 469−504.

[23] 刘诚. 多元水泥基材料微结构演变与传输性能的数值模拟[D]. 南京: 东南大学, 2016.
LIU C. Numerical simulation of microstructure development and transport properties of multiple cementitous materials(in Chinese dissertation). Nanjing: Southeast University, 2016.