

基于部分反弹格子 Boltzmann 方法研究砂浆水渗透性能

李 凯^{1,2}, 许 立^{1,2}, 杨璐璐^{1,2}, 史才军^{1,2}

(1. 湖南大学土木工程学院, 绿色先进土木工程材料及应用技术湖南省重点实验室, 长沙 410082;

2. 湖南省绿色先进土木工程材料国际科技创新合作基地, 长沙 410082)

摘 要: 为了揭示砂浆的水分传输机制, 构建了细骨料-界面过渡区-水泥浆体的砂浆三相模型, 采用部分反弹格子 Boltzmann 方法模拟了水分在砂浆内部的传输过程, 研究了骨料体积分数、界面过渡区厚度及孔隙结构对砂浆水分渗透系数的影响。结果表明: 当界面过渡区厚度较小、孔隙率较低时, 砂浆的水分渗透系数随骨料含量的增大而降低且始终低于水泥浆体的水分渗透系数; 当界面过渡区厚度增至 150 μm 或有效孔隙率超过水泥基体 2 倍时, 砂浆的水分渗透系数会接近甚至超过水泥浆体的水分渗透系数。界面过渡区效应、骨料稀释作用以及迂曲传输路径的相互竞争是产生上述现象的根本原因。

关键词: 砂浆; 界面过渡区; 格子 Boltzmann 方法; 水分渗透系数

中图分类号: TU528 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2022)10-2701-11

网络出版时间: 2022-08-25



Water Permeability of Mortar Investigated by Partial Bounce-Back Lattice Boltzmann Method

LI Kai^{1,2}, XU Li^{1,2}, YANG Lulu^{1,2}, SHI Caijun^{1,2}

(1. Key Laboratory for Green and Advanced Civil Engineering Materials and Application Technology of Hunan Province, College of Civil Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China; 2. International Science and Technology Innovation Center for Green and Advanced Civil Engineering Materials of Hunan Province, Changsha 410082, China)

Abstract: To clarify the mechanism of water transport in mortar, a three-phase model consisting of fine aggregate-interface transition zone (ITZ)-cement paste was developed to represent mortar, and then the water transport process in mortar was simulated by a partial bounce-back lattice Boltzmann method (PBB-LBM). The influences of aggregate volume fraction, the ITZ's thickness and pore structure on the water permeability of mortar were evaluated. The results show that mortar's water permeability declines at an increased aggregate content and it is always below cement paste's water permeability at a thin thickness of ITZ and a low porosity. Once the thickness of ITZ exceeds 150 μm or its effective porosity is two times greater than that of cement paste, the permeability of mortar is close to or even above the matrix's water permeability. This is attributed to the competitions among the ITZ effect, aggregate dilution effect and tortuous transport path in mortar.

Keywords: mortar; interfacial transition zone; lattice Boltzmann method; water permeability

与水泥基体相比, 界面过渡区(ITZ)具有更高的孔隙率和更大的孔洞^[1-2], 因此通常被视为混凝土的薄弱区域^[3]。水分和侵蚀性离子容易通过 ITZ 进入材料内部, 微裂纹也会优先在 ITZ 中产生和扩展, 这将不可避免地影响混凝土的力学性能和耐久性^[4-7]。

由于 ITZ 的成因十分复杂, 其结构和厚度与骨料掺量、颗粒粒径、水灰比、养护条件等因素密切相关^[3,8], 所以 ITZ 对混凝土水分传输机制的影响仍存在争议。一方面, 随着骨料含量的增大, ITZ 的体积分数也随之增大。据文献[7, 9-11]报道, 当骨料体积分

收稿日期: 2022-02-24。 修订日期: 2022-04-10。

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金项目(51908207); 国家自然科学基金面上项目(52178205); 湖南省自然科学基金青年基金项目(2021JJ40075)。

第一作者: 李 凯(1988—), 男, 博士, 副教授。

通信作者: 史才军(1963—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2022-02-24. Approved date: 2022-04-10.

First author: LI Kai (1988—), male, Ph.D., Associate Professor.

E-mail: kaili@hnu.edu.cn

Correspondent author: SHI Caijun (1963—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: cshi@hnu.edu.cn

数达到 35%~60%，ITZ 之间会发生重叠且形成连通路径，这将明显促进水分传输，此时混凝土的水分渗透系数可达水泥浆体的 10~100 倍。另一方面，骨料对浆体的取代亦会产生稀释效应，水分传输路径也变得更加迂曲，这两者都会降低混凝土的传输性能^[9, 12–13]。基于材料切片的扫描电子显微镜技术 (SEM)^[14–15]可用于 ITZ 的结构分析和厚度计算，但该方法需要进行大量的图像处理，不仅耗时长、成本高^[16]，而且无法对错综复杂、相邻且高度重合的 ITZ 进行精准辨识^[17]，仅适用于 ITZ 传输性能的简化评估^[12, 18]。与实验方法相比，计算机模拟不仅简洁高效，而且能够实现水分在混凝土中传输过程的可视化观测，这为研究水泥基材料的水分传输机制提供了新途径。

基于材料的细观结构模型，可以采用有限元方法(FEM)、孔管道模型(PNM)和格子 Boltzmann 方法(LBM)来模拟水分传输过程，继而计算出混凝土的水分渗透系数，其中，LBM 具有计算精度高、支持并行计算、适用于复杂边界条件等优势，已被用于水泥基材料的介质传输与离子扩散研究^[19]。基于 LBM 得到的水泥浆体内部速度流场，宋杨等^[20]发现介质传输行为主要发生在毛细孔中。同样采用 LBM 模拟，Zhang 等^[21]发现水泥浆体的水分渗透系数与有效孔隙率存在特定的对应关系。Zalzal 等^[22]利用 LBM 模型探究了水化硅酸钙(C—S—H)凝胶对非饱和水泥浆体水分渗透系数的影响，研究表明：当饱和度很低时，C—S—H 凝胶对水分传输的贡献占据主导地位。在已见报道的研究中，水泥浆体通常被简化为固相和孔洞组成的两相材料，水分仅能在孔洞中进行传输，这与实际情况并不相符^[23–25]。此外，基于 LBM 的水分传输研究仍集中于水泥浆体，关于砂浆和混凝土的报道仍不多见。

本工作采用离散元方法建立了砂浆的三相模型，开发了基于部分反弹格子 Boltzmann 方法的计算程序，考虑了 ITZ 和水泥浆体对水分传输的不同贡献，模拟了水分在砂浆中的传输过程，探究了骨料体积分数、ITZ 厚度和孔隙结构对砂浆水分渗透系数的影响，研究成果为水泥基材料的耐久性评估与预测提供了理论依据。为了提升计算效率，本工作仅针对砂浆的二维结构，但所开发的算法和程序亦可用于三维情况，这将是今后的工作重点。

1 砂浆三相模型构建

为了建立砂浆的细观结构模型，需要确定细骨

料、ITZ 以及水泥基体的组成。在本工作中，水泥浆体被视作均质材料，仅考虑其有效孔隙率对水分传输的贡献，不涉及浆体的微观结构。为了提升计算效率，细骨料被简化为具有规则形状的颗粒(圆形和球体)，ITZ 亦被视为具有特定厚度的过渡层。基于离散元方法，在周期性边界条件的正方形区域内生成了互不重叠的细骨料，ITZ 则被允许发生重合。根据《建筑用砂》(GB/T 14684—2011)，选用的细骨料粒径分布如表 1 所示，细骨料含量为 0 到 60%。正方形区域的大小应能满足表征性体积单元(REV)的要求。根据文献[26]，该区域的尺寸设为 8 mm×8 mm，图像分辨率为 5 μm 每个像素，格子长度为 1 600，故长度转换系数 $C_L=L_p/L_t=(8\times10^{-3}\text{ m})/1\,600=5\times10^{-6}\text{ m}$ ，渗透率转换系数 $C_k=C_L\times C_L=(5\times10^{-6}\text{ m})^2=2.5\times10^{-11}\text{ m}^2$ 。

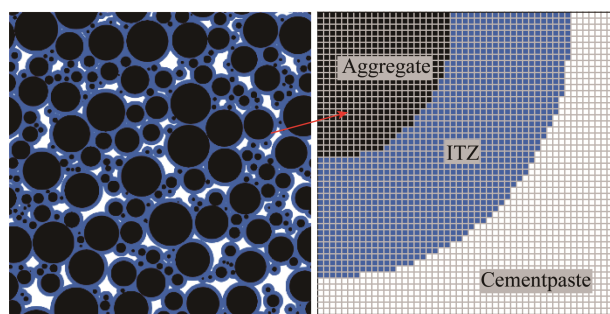
表 1 细骨料的粒径分布

Table 1 Particle size distribution of fine aggregate

Sieve size/mm	Passing percentage/%
1.180	100.00
0.600	24.24
0.300	9.02
0.150	3.10
0.075	0.06

由于 ITZ 厚度与骨料粒径之间的量化关系仍不明确^[17, 27]，故假设 ITZ 厚度与骨料尺寸无关，即骨料表面附着的 ITZ 具有相同厚度。根据文献[5, 28–29]，ITZ 厚度的取值在 0~200 μm，将在这一范围内进行 ITZ 厚度对砂浆水分渗透系数影响的研究。图 1 为由细骨料、ITZ 和水泥浆体组成的砂浆细观结构模型，细骨料含量为 60%，ITZ 厚度为 100 μm。通过像素化分析，砂浆被离散为由不同物相表示的格点，用于后续的水分传输模拟。

与水泥基体相比，ITZ 的孔隙率更高且会随与



(a) Three-phase model of mortar (b) Enlarged photo of a particle
ITZ represents the interfacial transition zone.

图 1 砂浆的细观结构

Fig. 1 Meso-structure of mortar

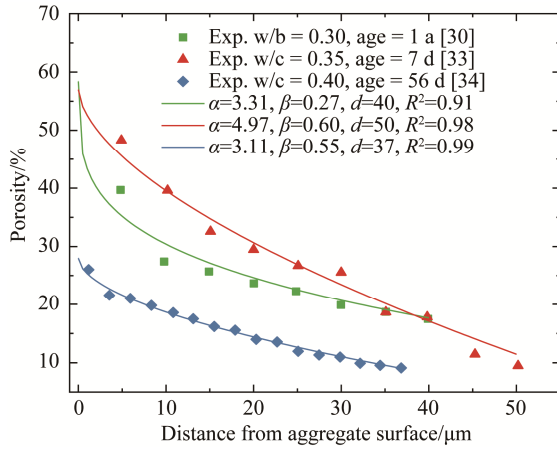
骨料表面距离的增大而降低^[30], 见式(1):

$$\varphi(x) = \varphi_{\text{if}} - (\varphi_{\text{if}} - \varphi_{\text{cp}})(x/d)^\beta; x \leq d, 0 < \beta < 1 \quad (1)$$

式中: $\varphi(x)$ 为距骨料表面距离为 x 处的孔隙率; φ_{cp} 为水泥基体的孔隙率; φ_{if} 是骨料表面处($x=0$)的孔隙率; d 为 ITZ 的厚度; β 体现了孔隙率的变化趋势。根据文献[29–31], 骨料表面处的孔隙率 φ_{if} 与 φ_{cp} 呈现线性关系, 即 $\varphi_{\text{if}} = \alpha\varphi_{\text{cp}}$, 故式(1)可进一步简化[如式(2)所示]。

$$\varphi(x) = \varphi_{\text{cp}}[\alpha - (\alpha - 1)(x/d)^\beta]; x \leq d, 0 < \beta < 1 \quad (2)$$

式中: α 为骨料表面处孔隙率与水泥基体孔隙率之比, 已有文献[29–32]报道 α 的值常大于等于 2。 α 和 β 均为反映 ITZ 孔隙结构特征的经验参数。图 2 为由式(2)计算得到的 ITZ 孔隙率和实测结果^[30, 33–34]的对比。由图 2 可见, 虽然试样的水胶比和龄期会影响 α 和 β 的取值, 但式(2)可以有效表征 ITZ 的孔隙率分布情况。假设 ITZ 中的有效孔隙率与孔隙率具有相同的分布趋势, 因此, 一旦水泥基体的有效孔隙率 $\varphi_{\text{e, cp}}$ 被确定, 将基于式(2)来描述 ITZ 中的有效孔隙率分布 $\varphi_{\text{e}}(x)$, 并探究 α 和 β 对砂浆水分渗透系数的影响。



Exp denotes experimental data.

图 2 距骨料表面不同距离时 ITZ 的孔隙率

Fig. 2 Porosity of the ITZ at different distances to aggregate's surface

2 格子 Boltzmann 方法

2.1 部分反弹格子 Boltzmann 方法

在格子 Boltzmann 模型中, 物理空间和速度空间被离散成一系列晶格节点和速度向量, 流体运动用密度分布函数来表示。在每个晶格节点, 密度分布函数循环迭代地进行迁移和碰撞。为了提高计算的精度和稳定性, 采用多松弛时间碰撞算子和 Guo 外力格式^[35]来表示 LBM 方程, 见式(3):

$$\begin{cases} \text{Streaming: } f_i^*(r + e_i \delta_t, t) = f_i(r, t) \\ \text{Collision: } f_i(r, t + \delta_t) = f_i^*(r, t) - (M^{-1}SM)_{ij} \\ [f_j^*(r, t) - f_j^{\text{eq}}(r, t)] + \delta_t M^{-1} \left(I - \frac{1}{2}S \right) MF \end{cases} \quad (3)$$

式中: I 为单位矩阵, $M^{-1}SM$ 项为多松弛时间碰撞算子, 这比单松弛时间碰撞算子具有更高的计算稳定性和精确性。 M 是正交变换矩阵^[36], S 为包含了多个松弛时间的对角松弛矩阵, 取值为:

$$S = \text{diag}(1.0, 0.8, 0.8, 1.0, 1.1, 1.0, 1.1, 1/\tau, 1/\tau) \quad (4)$$

其中: τ 为松弛时间, 本研究中取值 1.0, 可用于计算流体黏度 $\nu = c_s^2(\tau - 0.5)\delta_t$, $c_s = 1/\sqrt{3}$ 为格子声速。

$f_i(r, t)$ 表示在位置矢量 r 和时间 t 的密度分布函数; $\delta_t = 1$ 为时间步长; e_i 为 i 方向上的单位速度分量。为了简化计算, 选用 D2Q9 晶格模型(图 3)来表示格点的运动方向。 $f_i^{\text{eq}}(r, t)$ 为平衡密度分布函数, 由式(5)计算:

$$f_i^{\text{eq}}(r, t) = w_i \rho \left[1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u \cdot u}{2c_s^2} \right] \quad (5)$$

其中: w_i 为方向 i 上的权重系数, 在 D2Q9 中, 其取值为 $w_i = 4/9$ ($i=0$), $w_i = 1/36$ ($i=1, 3, 5, 7$) 和 $w_i = 1/9$ ($i=2, 4, 6, 8$)。

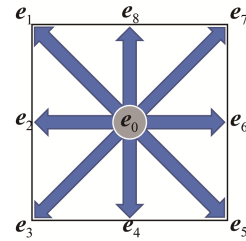


图 3 D2Q9 晶格模型

Fig. 3 D2Q9 lattice model

此外, F 为外力项^[35], 由式(6)表示:

$$F_i = w_i \left[\frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{c_s^4} \right] \cdot F^{\text{ext}} \quad (6)$$

其中: F^{ext} 为流体所受外力。根据文献[37], 可以确定由该力引起的压差与无量纲数 Reynolds 数之间的关系。 F^{ext} 的单位 lu(晶格单位)与国标单位制单位之间的转换系数 $C_F = F_P/F_L = C_P^{-2} C_\mu^2 C_L^{-3} = (\rho_L u_P / \rho_P u_L)^2 \cdot (L_P/L_L)^{-3} = 2.88 \times 10^{-5} \text{ Pa/m}$ 。流体的宏观密度和速度根据式(7)进行计算:

$$\begin{cases} \rho(r, t) = \sum_i f_i(r, t) \\ \rho(r, t)u(r, t) = \sum_i (f_i(r, t) \cdot e_i) + \delta_t \frac{F^{\text{ext}}}{2} \end{cases} \quad (7)$$

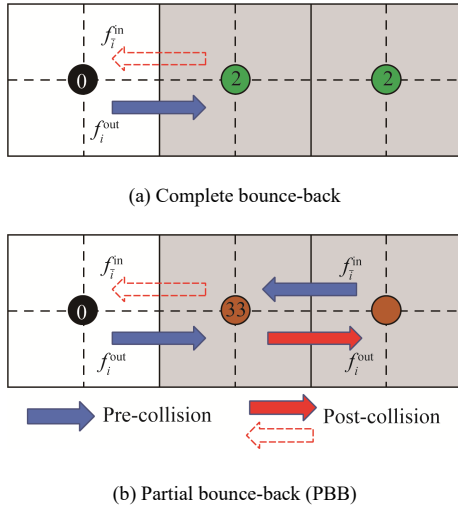


图4 密度分布在固体格点处发生碰撞

Fig. 4 Collision of density distribution function at solid points

为了表征水泥浆体和 ITZ 对水分传输的不同贡献,开发了部分反弹格子 Boltzmann 方法(PBB-LBM)模型,其与传统格子 Boltzmann 模型的差异如图 4 所示。在图 4a 中,格点 2 代表不具有渗透性的固体格点,当体系发生碰撞时,格点 2 会将相邻格点迁移过来的密度分布函数 f_i^{out} 进行完全反弹 ($f_i^{\text{in}} = f_i^{\text{out}}$)。在图 4b 中,格点 3 表示具有部分反弹能力的固体格点,此处的密度分布函数在碰撞后将发生部分反弹,这一过程可由式(8)表示:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Streaming:} \\ f_i^*(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \delta_t, t) = f_i(\mathbf{r}, t) \\ \text{Collision:} \\ f_i^{**}(\mathbf{r}, t + \delta_t) = f_i^*(\mathbf{r}, t) - (\mathbf{M}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{M})_{ij} \\ [f_j^*(\mathbf{r}, t) - f_j^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] + \delta_t \mathbf{M}^{-1} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2} \mathbf{S} \right) \mathbf{M} \mathbf{F} \quad (8) \\ \text{Partial Bounce-Back:} \\ f_i(\mathbf{r}, t + \delta_t) = f_i^{**}(\mathbf{r}, t + \delta_t) + \\ n_s(\mathbf{r})(f_i^*(\mathbf{r}, t) - f_i^{**}(\mathbf{r}, t + \delta_t)) \end{array} \right.$$

流体所受外力 $\mathbf{F}^{\text{ext}}$ 取值为 $\mathbf{F}_x^{\text{ext}} = 1.34 \times 10^{-7}$ lu, $\mathbf{F}_y^{\text{ext}} = 0$ lu; $n_s(\mathbf{r})$ 用来表征固体的渗透性能,即晶格节点在 $\mathbf{r}$ 处的固体分数。 $n_s(\mathbf{r}) = 0$, 表示无任何阻碍的孔洞; $n_s(\mathbf{r}) = 1$, 代表不具有渗透性的固体; $0 < n_s(\mathbf{r}) < 1$, 则为具有不同渗透性能的固相。流体的宏观密度和速度可由式(9)计算:

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \rho(\mathbf{r}, t) = (1 - n_s) \left(\sum_i (f_i(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{e}_i) + \delta_t \frac{\mathbf{F}^{\text{ext}}}{2} \right) \quad (9) \end{array} \right.$$

当模拟达到稳定后,可通过 Darcy 定律可计算渗透率:

$$K_1 = \frac{v \langle \mathbf{u}_x \rangle}{\mathbf{F}_x^{\text{ext}}} \quad (10)$$

式中: $\langle \mathbf{u}_x \rangle$ 是所有格点在 x 方向上的平均速度,以晶格单位表示的 K_1 可通过渗透率转换系数 C_k 转换为以实际物理单位表示的渗透率 K_p ($K_p = K_1 C_k$)。

2.2 基准测试

为了对 PBB-LBM 模型进行验证,进行了基准测试,包括两平行板间的 Poiseuille 流、Brinkman 流、分层通道流和渗透率计算。图 5 为一定压力梯度下流体在间距为 L 的平行板间流动的基准测试。在图 5a 中,两板之间的流体是均匀介质,即 $n_s(\mathbf{r})$ 为常数。当 $n_s(\mathbf{r}) = 0$ 时(格点对流体无阻挡作用),将发生 Poiseuille 流动,依据式(11)可以求得流体沿 y 轴的速度分布 $u(y)$:

$$u(y) = \frac{\mathbf{F}_x^{\text{ext}} (L - y)}{2\mu} \quad (11)$$

式中所有变量的单位均为 lu; L 为平板宽度; μ 为流体动力黏度。根据文献[37],模拟域的大小被设为 $51 \text{ lu} \times 101 \text{ lu}$, τ 值取为 1.0,故 $\mu = \rho \nu = 1/6$ 。图 6 为由 PBB-LBM 模型算得的 Poiseuille 流速度分布和由式(11)算出的解析值,两者吻合较好,这表明所开发的 PBB-LBM 模型能够准确反映流体运动。

若两平板之间为低渗透性均匀介质 ($0 < n_s(\mathbf{r}) < 1$),流体的速度分布则应符合 Brinkman 模型,见式(12):

$$u(y) = -\frac{\nabla P}{\phi \rho} \left[1 - \frac{\cosh[A(y - L/2)]}{\cosh(AL/2)} \right] \quad (12)$$

式中: $\phi = 2n_s$; $A = \sqrt{\phi/\nu}$ 。图 7 为不同 n_s 值时流体沿 y 轴的速度分布。与 Poiseuille 流体类似,依据 PBB-LBM 模型算得的结果与解析值十分吻合。

当两板间存在不同介质时(中间层和两侧介质的 n_s 分别为 0.5 和 0.9),中间层宽度分别设为 20 lu 和 80 lu,见图 5b。PBB-LBM 模型计算结果与解析值^[37]的对比如图 8 所示。较好的一致性表明 PBB-LBM 模型能够准确反映平板之间非均质流体的速度分布。

当 n_s 取值不同时,平板渗透率的解析值可由式(13)(Walsh 模型^[38])计算:

$$K_1 = \frac{1 - n_s}{2n_s} \nu \quad (13)$$

图 9 为不同 n_s 下渗透率的计算结果与解析值的对比, 两者体现了较高的吻合性。因此, 基准测试结果表明 PBB-LBM 模型能够有效表征不同条件下流体的传输行为。

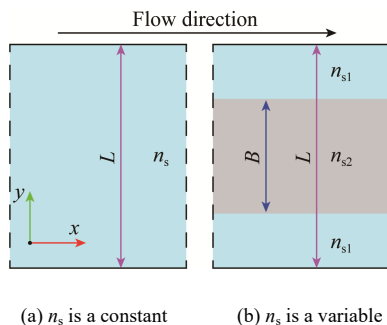
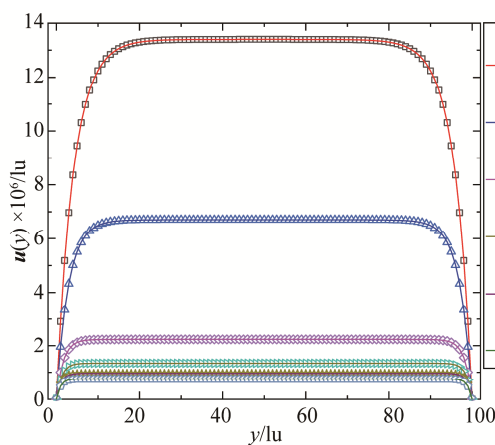
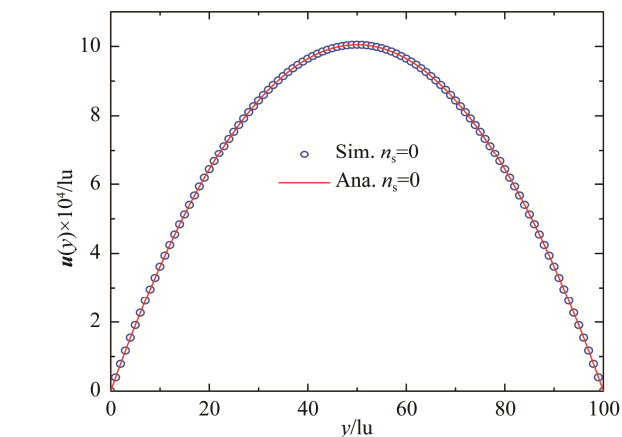


图 5 两板流基准测试

Fig. 5 Flow test between two parallel plates



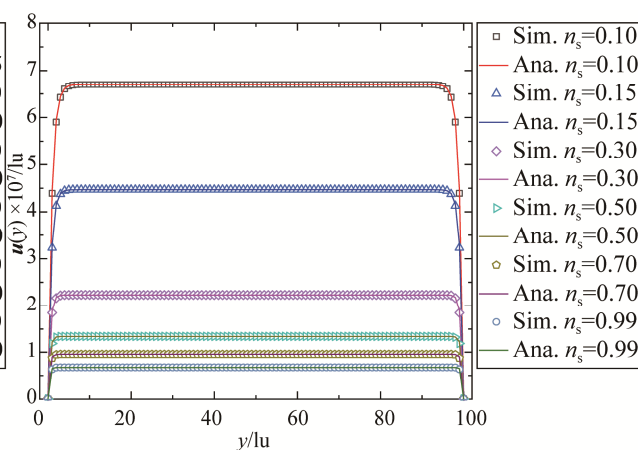
(a) $n_s=0.005-0.090 \text{ lu}$



Sim denotes simulation data; Ana represents analytical result.

图 6 两平板间 Poiseuille 流速度分布的模拟结果与解析值

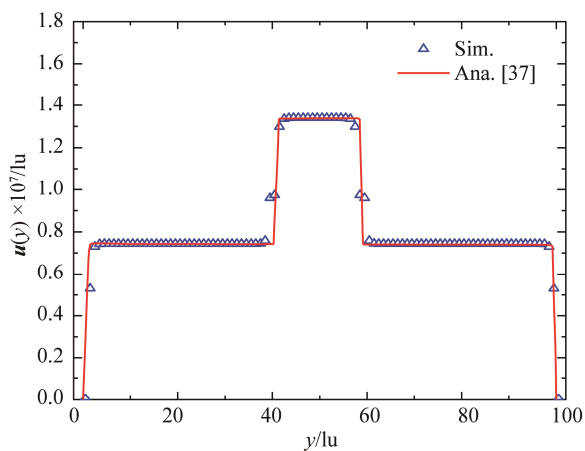
Fig. 6 Numerical result and analytical solution of velocity distribution of Poiseuille flow between two parallel plates



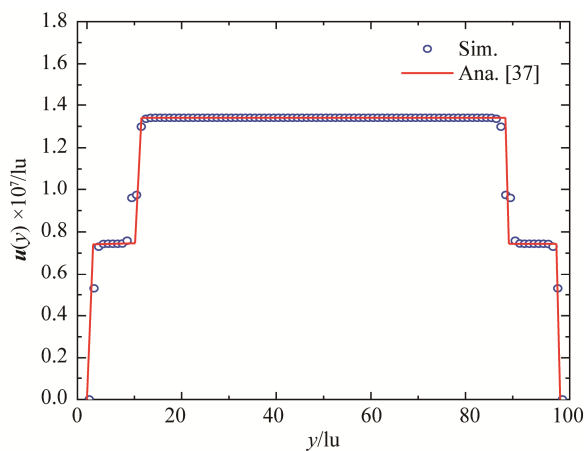
(b) $n_s=0.10-0.99 \text{ lu}$

图 7 不同 n_s 下两平板间流体速度分布的模拟结果与解析值

Fig. 7 Numerical result and analytical solution of flow velocity distribution between two parallel plates at different n_s



(a) $B=20 \text{ lu}$



(b) $B=80 \text{ lu}$

图 8 两平板之间流体速度分布的模拟值与解析值

Fig. 8 Numerical result and analytical solution of flow velocity distribution between two parallel plates

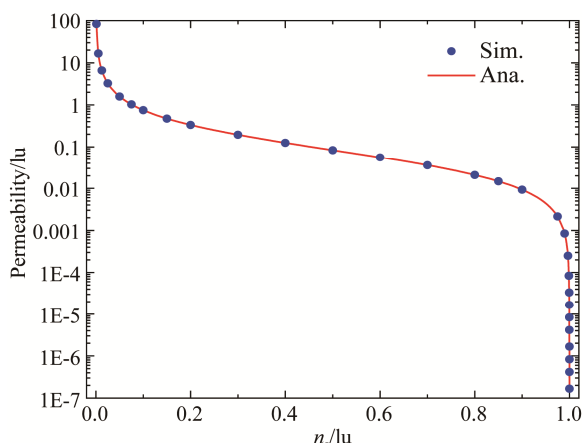
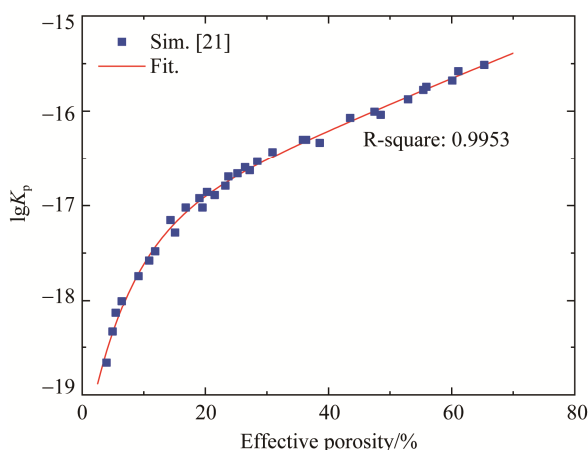


图9 不同 n_s 时两平板间通道的渗透率模拟结果与解析值
Fig. 9 Comparison between computed permeability and analytical solution at different n_s

2.3 n_s 的确定

砂浆被视为由细骨料、ITZ 和水泥基体组成的三相非均质复合材料，骨料不具有传输能力，水分仅能在 ITZ 和水泥浆体中进行传输。基于所建立的砂浆模型，采用 PBB-LBM 模型来模拟水分在砂浆中的传输过程。作为 PBB-LBM 模型的输入，仍需确定 ITZ 和水泥基质的水分渗透系数。虽然水泥浆体的有效孔隙率受水灰比、水化龄期、颗粒粒径分布等的影响，但 Zhang 等^[21]发现水泥浆体的水分渗透系数仅取决于其有效孔隙率 φ_e ，如图 10 所示。



Fit represents the fitting result.

图10 不同有效孔隙率下水泥浆体的水分渗透系数
Fig. 10 Water permeability of cement paste at different effective porosities

故水分渗透系数 K_p 可由有效孔隙率 φ_e 来表示，见式(14)。在本工作中，材料参数对水分传输的影响将被归咎为有效孔隙率的不同，不再考虑材料配

比和水化龄期的影响。

$$\lg K_p = -2.283 \times \exp(-13.990 \times \varphi_e) - 17.350 \times \exp(-0.171 \times \varphi_e) \quad (14)$$

由于 ITZ 的成因十分复杂，较难对其水分渗透系数进行准确测定，故假定 ITZ 的水分渗透系数亦取决于有效孔隙率，即遵循式(14)。一旦确定了 ITZ 和水泥基体的有效孔隙率，便可根据式(13)算得两者的 n_s 值。图 11 为骨料含量为 0.6 的砂浆的 n_s ，其中 $\alpha=2.0$, $d=100$, $\beta=0.4$, $\varphi_{e,cp}=0.3$ 。由图 11 可见，此试样中 ITZ 和水泥浆体的 n_s 均较高且相差较小，将详细探讨两者对砂浆中水分传输贡献的差异。

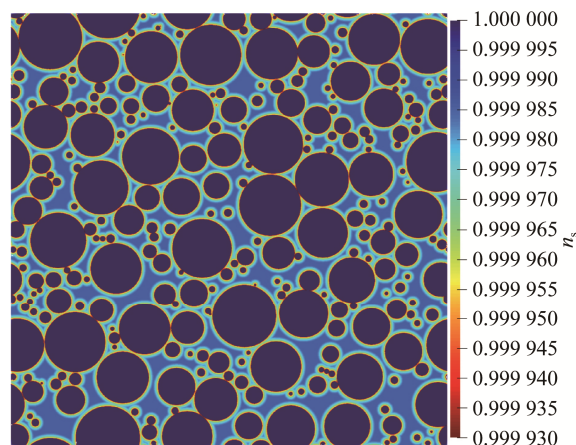


图11 骨料含量为 0.6 时砂浆的 n_s 值 ($\alpha=2.0$, $d=100$, $\beta=0.4$, $\varphi_{e,cp}=0.3$)

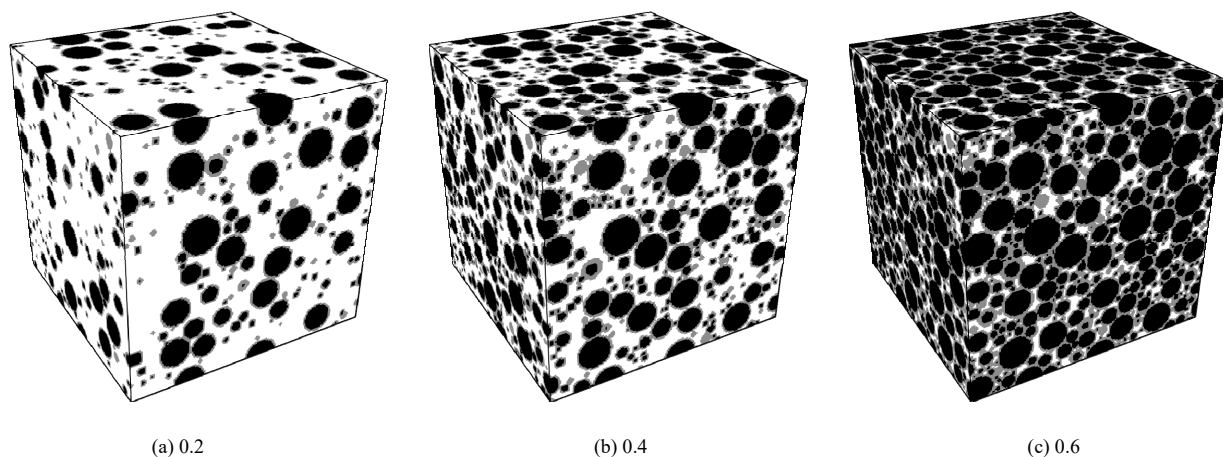
Fig. 11 Value of n_s of mortar when fine aggregate content is 0.6 ($\alpha=2.0$, $d=100$, $\beta=0.4$, $\varphi_{e,cp}=0.3$)

2.4 模型验证

为了验证 PBB-LBM 模型的有效性，以水灰比是 0.6，水化龄期为 3 个月的砂浆的实验数据^[39]作为参照对象。为与实验条件保持一致，水泥浆体的有效孔隙率取为 0.439，通过等效模拟过程中骨料含量为 40% 的砂浆中 ITZ 对水分传输的贡献程度，由此确定 ITZ 结构参数为： $d=50 \mu\text{m}$, $\alpha=2.0$, $\beta=0.2$ 。图 12 为骨料含量为 0.2, 0.4 和 0.6 的砂浆的三维结构 (分辨率为 $50 \mu\text{m}$ 每个三维像素)。为了便于对比和提升计算效率，针对砂浆的二维结构和三维结构进行水分传输模拟，模拟结果和试验数据的对比如图 13 所示。由于三维研究对计算资源要求高且耗时长，三维算例仅用于模型验证。由图 13 可见，模拟结果与实验数据吻合很好，这验证了 PBB-LBM 模型的正确性。随着骨料含量增大，无论计算结果还是试验数据，砂浆的水分渗透系数均呈现下降趋势。与砂浆二维算例相比，砂浆的三维模型更能反映真实试样的结构特性，由此算得的水分渗透系数与实

测结果吻合更好。此外, 颗粒形状、ITZ 厚度、水泥持续水化均会影响水分在砂浆中的传输过程, 计

算模拟时并未考虑上述因素, 这也导致模拟结果与试验数据仍存在了一定差异。



Black: Aggregate, White: Cement paste, Gray: ITZ.

图 12 不同骨料含量下砂浆的三维结构(ITZ 厚度为 50 μm)

Fig. 12 Three dimensional structure of mortar at different aggregate contents (ITZ thickness is 50 μm)

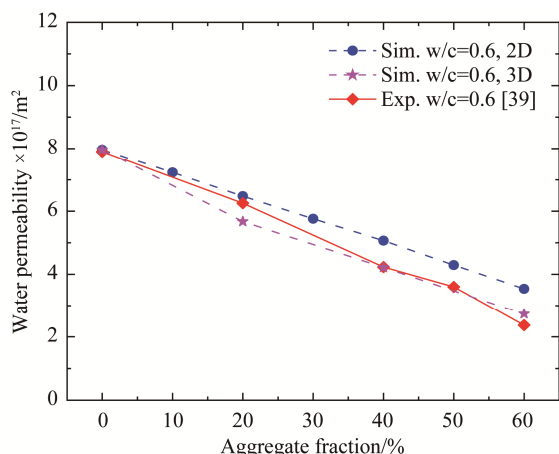


图 13 砂浆水分渗透系数的模拟结果和实验数据

Fig. 13 Numerical result and experimental data of water permeability of mortar

3 结果与讨论

3.1 砂浆的微观结构

图 14 为不同骨料含量下 ITZ 分数随其厚度的变化情况。由图 14 可见, 在 ITZ 厚度较小时, 相邻骨料之间的 ITZ 较少发生重叠, ITZ 分数会随其厚度的增大而线性增加。随着骨料含量的增加, 这一趋势逐渐减弱, 这是因为高骨料含量砂浆中 ITZ 的空间占比率低于低骨料含量砂浆。当 ITZ 厚度等于 100 μm 时, 骨料含量为 70% 砂浆的 ITZ 含量仅为骨料含量为 50% 砂浆的 80%。图 15 为 ITZ 厚度为 100 μm 时不同骨料含量下砂浆的微观结构, 可以发现: 当骨料含量达到 40% 时, 砂浆中的 ITZ

会形成连通的传输路径, 此时将发生渗滤现象。渗滤阈值取决于骨料形状、比表面积、骨料最大粒径等^[40]。

3.2 骨料含量对砂浆水分渗透系数的影响

为了量化表征骨料含量对砂浆水分渗透系数的影响, 暂不考虑 ITZ 作用, 选取不同的水泥浆体(有效孔隙率分别为 0.2, 0.3 和 0.4), 由 PBB-LBM 模型得到的计算结果如图 16 所示。由图 16 可见, 随着骨料含量增大, 砂浆的水分渗透系数出现线性下降, 这是因为骨料对水泥浆体取代产生的稀释效应以及水分传输路径变得更加曲折。在骨料含量增量相同的情况下, 基体有效孔隙率为 0.4 的砂浆的水分渗透系数的下降比其他试样更为显著, 此时骨料的稀释效应最为显著。

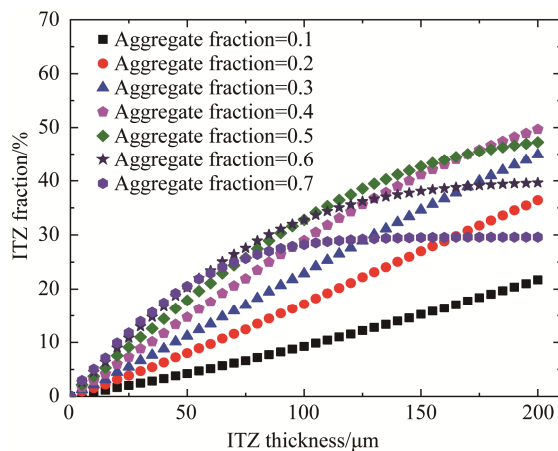
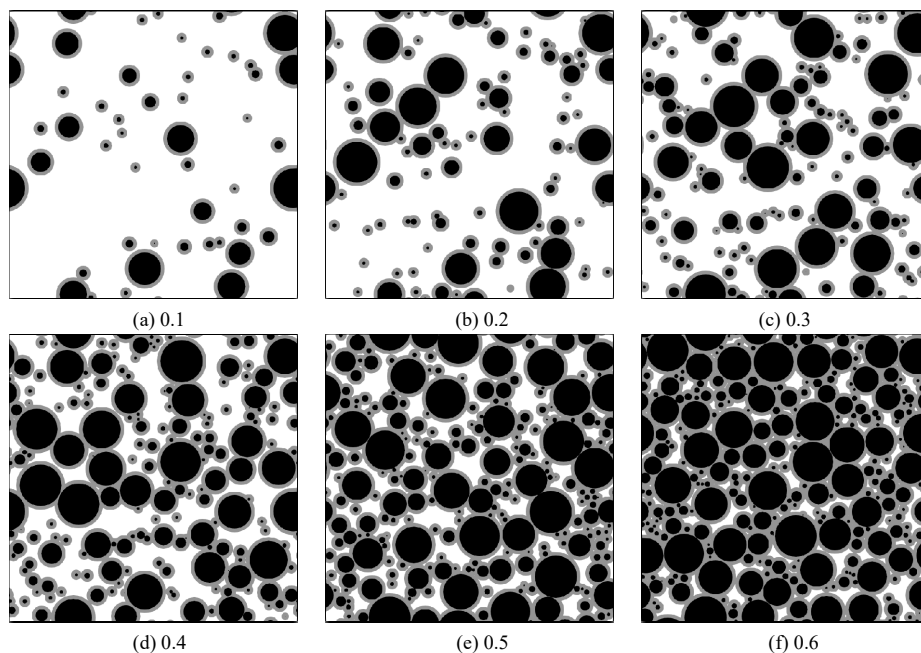


图 14 不同骨料含量下 ITZ 分数与其厚度的关系

Fig. 14 Relationship between ITZ fraction and its thickness at different aggregate contents



Black: Aggregate, White: Cement paste, Gray: ITZ

图 15 不同骨料含量下砂浆的二维细观结构(ITZ 厚度为 100 μm)

Fig. 15 Two dimensional meso-structure of mortar at different aggregate contents (ITZ thickness is 100 μm)

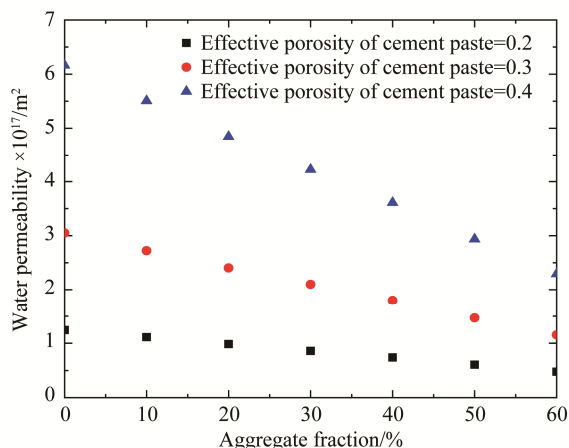


图 16 不同骨料含量下砂浆的水分渗透系数

Fig. 16 Water permeability of mortar at different aggregate fractions

3.3 ITZ 厚度对砂浆水分渗透系数的影响

图 17 为 ITZ 厚度分别为 25, 50, 75, 100, 150 μm 和 200 μm 时砂浆水分渗透系数的变化情况, 水泥浆体的有效孔隙率 $\phi_{e,cp}=0.3$ 。为了探究 ITZ 孔隙结构十分致密的情况下骨料稀释效应与 ITZ 增强效应之间的竞争作用, α 和 β 分别设为 2.0 和 0.4。由图 17a 可见, 砂浆的水分渗透系数随 ITZ 厚度的增加而增大; 在 ITZ 厚度增量相同的情况下, 骨料含量较高的砂浆具有更多的 ITZ, 故其水分渗透系数增长更加明显。此外, 无论骨料含量与 ITZ 厚度如何变化, 砂浆的水分渗透系数始终低于水泥浆体的水分渗透系数, 这被归咎于骨料稀释效应和传输

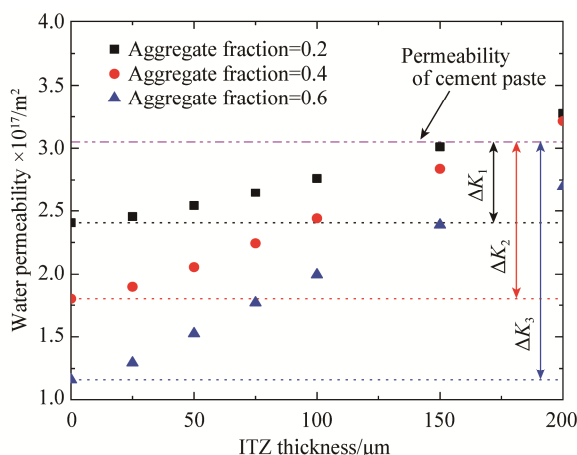
路径迂曲度效应仍占据主导地位。随着 ITZ 厚度的增大, ITZ 对水分传输的促进作用会使砂浆的水分渗透系数增大。对于骨料含量为 0.2 的砂浆, 当其 ITZ 厚度大于 150 μm 时, 砂浆的水分渗透系数十分接近水泥浆体的水分渗透系数。当砂浆的骨料含量增至 0.6, 即使 ITZ 厚度达到 200 μm , 砂浆的水分渗透系数依然小于水泥浆体的水分渗透系数。这是因为此时骨料稀释效应和迂曲度效应对水分传输的影响更加显著。图 17b 为骨料含量为 0.4 时砂浆水分渗透系数与不含 ITZ 试样水分渗透系数的比值随 ITZ 厚度的变化情况。由于文献[41]中仅有关于混凝土的结果, 因此将 PBB-LBM 模型计算结果与之进行对比, 其中混凝土的 ITZ 被视作水分渗透系数 n 倍于水泥浆体的均质材料(图 17 中 $n=2, 5, 10$ 和 20)。由图 17 可见, PBB-LBM 模型计算结果与文献[41]数据呈现相同的变化趋势且与 $n=5$ 时混凝土的结果十分吻合, 这不仅验证了所开发的 PBB-LBM 模型, 而且直观体现了 ITZ 厚度的增长会促进水分传输。

3.4 ITZ 孔隙结构对砂浆水分渗透系数的影响

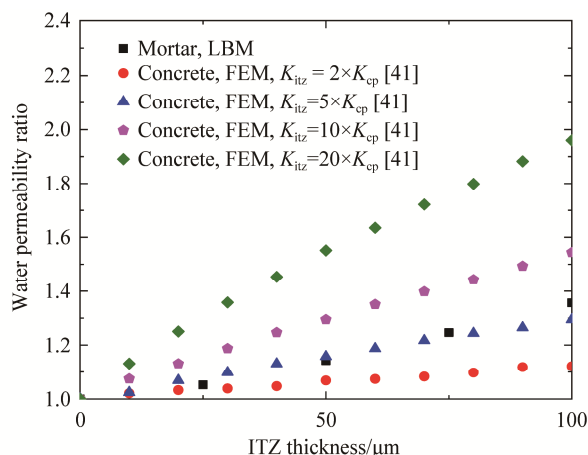
为了进一步探究 ITZ 孔隙结构对砂浆水分渗透系数的影响, 将对参数 α 和 β 进行量化研究。根据文献[30, 33–34], α 设为 2.0, 2.5 和 3.0, β 则取值 0.4, 0.5, 0.6, 0.7 和 0.8。水泥基质的有效孔隙率 $\phi_{e,cp}=0.3$, 砂浆骨料分数为 0.6, 此时 ITZ 的有效孔隙率分布如图 18 所示。图 19 为 ITZ 厚度为 100 μm 时计算得到的砂浆水分渗透系数。由图 19 可见, 在 α

相同时, 砂浆的水分渗透系数会随 β 的增加而增大。当 $\alpha=2.0$ 时, ITZ 对水分传输的促进作用弱于骨料稀释效应和迂曲度效应, 此时无论 β 如何取值, 砂浆的水分渗透系数始终小于水泥浆体的水分渗透系数

数。随着 α 不断增大, 一旦 ITZ 的有效孔隙率 2 倍于水泥基体的有效孔隙率, 砂浆的水分渗透系数将超过水泥浆体的水分渗透系数, 此时 ITZ 的增强作用成为影响砂浆水分渗透系数的主导因素。



(a) Water permeability



(b) Water permeability ratio

LBM denotes lattice Boltzmann method; FEM represents finite element method.

图 17 不同 ITZ 厚度下砂浆的水分渗透系数

Fig. 17 Water permeability of mortar at different ITZ thicknesses

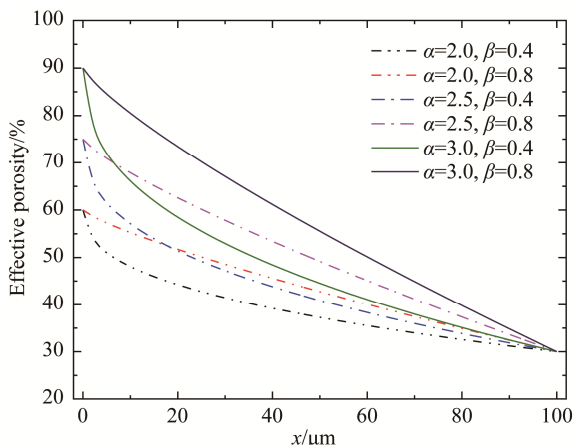
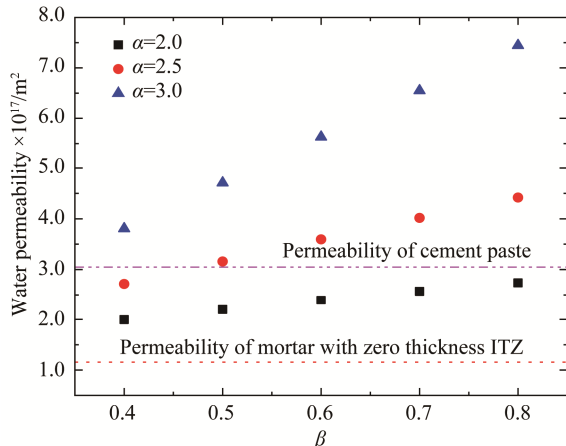


图 18 距骨料表面不同距离时 ITZ 的有效孔隙率

Fig. 18 Effective porosity of ITZ at different distances to aggregate's surface

图 19 不同 β 时砂浆的水分渗透系数Fig. 19 Water permeability of mortar at different β

3.5 三种效应之间的竞争作用

砂浆的水分传输特性由 ITZ 效应, 骨料稀释作用和传输路径迂曲度效应之间的竞争作用决定。图 20 为由 PBB-LBM 模型计算出的 $\phi_{e, cp}=0.3$, $d=100 \mu\text{m}$ 的砂浆水分渗透系数。由图 20 可见, 随着 ITZ 厚度和孔隙结构的变化, 砂浆水分渗透系数随骨料含量增大呈现出截然不同的变化趋势。当 $\alpha=2.0$, $\beta=0.4$ 时, 砂浆水分渗透系数随骨料含量增加而降低, 此时 ITZ 作用不明显, 骨料稀释效应和迂曲度效应发挥主要作用。随着孔隙

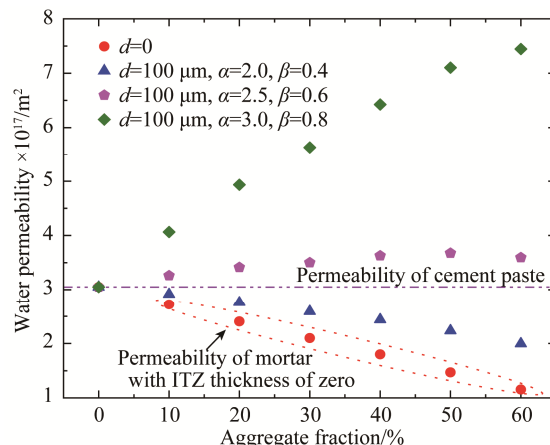
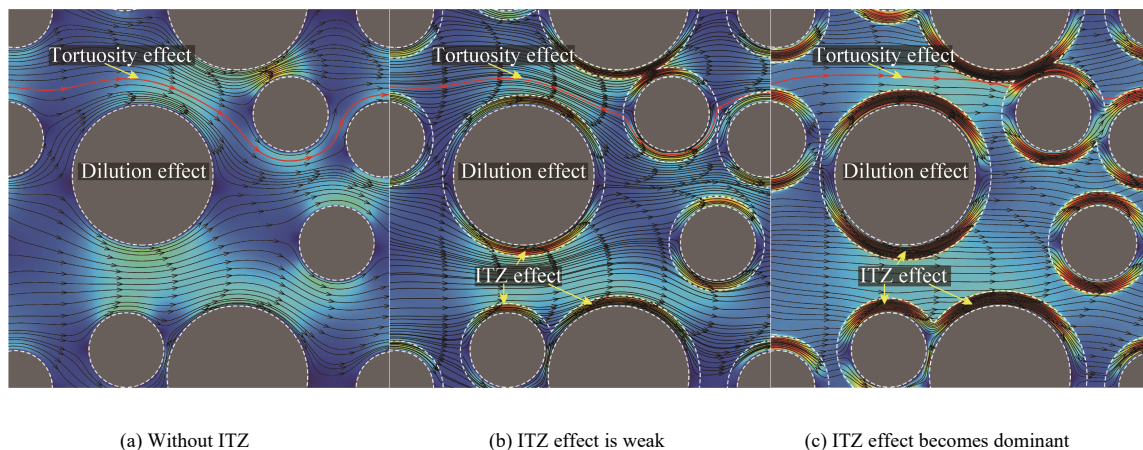


图 20 ITZ 效应、骨料稀释作用和传输路径迂曲效应对砂浆中水分传输的影响

Fig. 20 Influence of the ITZ, particle dilution and tortuous transport path on water transport in mortar

率增大(d , α 或 β 增大), 砂浆水分渗透系数随骨料含量增加而上升且在 ITZ 孔隙结构粗化时增长较快。一旦 ITZ 之间形成了连通路径, 将会对水分传输产生了显著的促进作用, ITZ 效应成为主导砂浆水分传输的关键因素。图 21 为 3 种不同效

应对砂浆中水分传输的影响。由图 21 可见, 随着 ITZ 效应不断增强, 水分传输速度和路径(见图中流线图)均发生变化。当 ITZ 效应占据主导作用时, 水分优先选择 ITZ 形成的通道进行传输, 传输路径趋于平滑。



(a) Without ITZ

(b) ITZ effect is weak

(c) ITZ effect becomes dominant

图 21 ITZ 效应、骨料稀释作用和传输路径迂曲效应对砂浆中水分传输影响的示意图

Fig. 21 Schematic diagram of the influence of ITZ, particle dilution and tortuous transport path on water transport in mortar

4 结论

1) 部分反弹格子 Boltzmann 方法能够考虑不同固相(ITZ 和水泥浆体)对水分传输的贡献, 从而实现砂浆水分传输过程的量化表征, 具有计算精度高、支持并行计算、可用于大规模计算和多尺度模拟。所开发的 PBB-LBM 模型的有效性已通过砂浆二维结构和三维结构算例得到验证, 但三维计算对计算资源要求高且耗时长, 基于自适应网格划分技术进行 PBB-LBM 模型优化是未来工作的重点。

2) 在骨料含量较低时, ITZ 含量随其厚度增大而线性增加。受限于骨料之间的可用空间, 高骨料含量砂浆的 ITZ 含量会随其厚度增长呈现先增大后减小的变化趋势。

3) ITZ 效应、骨料稀释作用以及迂曲传输路径之间的竞争作用决定了砂浆的水分渗透系数, 且与 ITZ 厚度和孔隙结构密切相关。当 ITZ 厚度较小或孔隙率较低时, 骨料稀释作用和传输路径迂曲度效应占据主导地位, 砂浆水分渗透系数随骨料含量增大而降低。随着 ITZ 厚度增大或孔隙率升高(α 或 β 增大), ITZ 对水分传输的增强作用成为关键因素, 砂浆水分渗透系数随骨料含量增加而上升。

参考文献:

[1] SCRIVENER K L, CRUMBIE A K, LAUGESSEN P. The interfacial transition zone (ITZ) between cement paste and aggregate in

concrete[J]. Interface Sci, 2004, 12(4): 411–421.

[2] BOURDETTE B, RINGOT E, OLLIVIER J P. Modelling of the transition zone porosity[J]. Cem Concr Res, 1995, 25(4): 741–751.

[3] 施惠生, 孙丹丹, 吴凯. 混凝土界面过渡区微观结构及其数值模拟方法的研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2016, 44: 678–685.

SHI Huisheng, SUN Dandan, WU Kai. J Chin Ceram Soc, 2016, 44: 678–685.

[4] 申艳军, 张欢, 潘佳, 等. 混凝土界面过渡区微-细观结构识别及形成机制研究进展[J]. 硅酸盐通报, 2020, 39: 3055–3069.

SHEN Yanjun, ZHANG Huan, PAN Jia, et al. Bull Chin Ceram Soc (in Chinese), 2020, 39: 3055–3069.

[5] CWIRZEN A, PENTTALA V. Aggregate–cement paste transition zone properties affecting the salt–frost damage of high-performance concretes[J]. Cem Concr Res, 2005, 35(4): 671–679.

[6] XIONG Q, WANG X, JIVKOV A P. A 3D multi-phase meso-scale model for modelling coupling of damage and transport properties in concrete[J]. Cem Concr Compos, 2020, 109: 103545.

[7] WONG H S, ZOBEL M, BUENFELD N R, et al. Influence of the interfacial transition zone and microcracking on the diffusivity, permeability and sorptivity of cement-based materials after drying[J]. Mag Concr Res, 2009, 61(8): 571–589.

[8] 陈惠苏, 孙伟, STROEVEN P. 水泥基复合材料集料与浆体界面研究综述(二): 界面微观结构的形成、劣化机理及其影响因素[J]. 硅酸盐学报, 2004: 70–79.

CHEN Huisu, SUN Wei, STROEVEN P. J Chin Ceram Soc, 2004: 70–79.

[9] NYAME B. Permeability of normal and lightweight mortars[J]. Mag Concr Res, 1985, 37(130): 44–48.

[10] HALAMICKOVA P, DETWILER R J, BENTZ D P, et al. Water permeability and chloride ion diffusion in portland cement mortars: Relationship to sand content and critical pore diameter[J]. Cem Concr Res, 1995, 25(4): 790–802.

[11] YOUNG J F. Review of the pore structure of cement paste and

- concrete and its influence on permeability[J]. ACI Sym Publ, 108: 1–18.
- [12] LI K, XU L, STROEVEN P, et al. Water permeability of unsaturated cementitious materials: A review[J]. Constr Build Mater, 2021, 302: 124168.
- [13] DELAGRAVE A, MARCHAND J, PIGEON M. Influence of microstructure on the tritiated water diffusivity of mortars[J]. Adv Cem Based Mater, 1998, 7(2): 60–65.
- [14] GAO Y, DE SCHUTTER G, YE G, et al. Characterization of ITZ in ternary blended cementitious composites: Experiment and simulation[J]. Constr Build Mater, 2013, 41: 742–750.
- [15] SUN X, ZHANG B, DAI Q, et al. Investigation of internal curing effects on microstructure and permeability of interface transition zones in cement mortar with SEM imaging, transport simulation and hydration modeling techniques[J]. Constr Build Mater, 2015, 76: 366–379.
- [16] 贾耀东, 阎培渝. 用于水泥基材料微观结构研究的计算机断层扫描技术的发展历史与现状[J]. 硅酸盐学报, 2010, 38: 1346–1356. JIA Yaodong, YAN Peiyu. J Chin Ceram Soc, 2010, 38: 1346–1356.
- [17] LYU K, SHE W, CHANG H, et al. Effect of fine aggregate size on the overlapping of interfacial transition zone (ITZ) in mortars[J]. Constr Build Mater, 2020, 248: 118559.
- [18] WONG H S, ZIMMERMAN R W, BUENFELD N R. Estimating the permeability of cement pastes and mortars using image analysis and effective medium theory[J]. Cem Concr Res, 2012, 42(2): 476–483.
- [19] ESHGHINEJADFARD A, DARÓCZY L, JANIGA G, et al. Calculation of the permeability in porous media using the lattice Boltzmann method[J]. Int J Heat Fluid Fl, 2016, 62: 93–103.
- [20] 宋杨, 李金远, 李俊峰, 等. 硬化水泥浆体气体渗透特征研究[J]. 硅酸盐通报, 2020, 39: 3799–3805. SONG Yang, LI Jinyuan, CHEN Wang, et al. Bull Chin Ceram Soc (in Chinese), 2020, 39: 3799–3805.
- [21] ZHANG M, YE G, VAN BREUGEL K. Microstructure-based modeling of permeability of cementitious materials using multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method[J]. Comput Mater Sci, 2013, 68: 142–151.
- [22] ZALZALE M, MCDONALD P J, SCRIVENER K L. A 3D lattice Boltzmann effective media study: Understanding the role of C-S-H and water saturation on the permeability of cement paste[J]. Model Simul Mater Sci Eng, 2013, 21(8): 085016.
- [23] 李登科, 赵铁军, 卢世伟, 等. 基于分子动力学水分和离子在水化硅酸钙纳米孔道中的传输特性研究[J]. 硅酸盐通报, 2017, 36: 2560–2564, 2588. LI Dengke, ZHAO Tiejun, LU Shiwei, et al. Bull Chin Ceram Soc (in Chinese), 2017, 36: 2560–2564, 2588.
- [24] 贾玉婷, 赵铁军, 侯东帅, 等. 非饱和及饱和状态下水化硅酸钙孔道中水分和离子传输的分子动力学研究[J]. 硅酸盐通报, 2019, 38: 615–621. JIA Yuting, ZHAO Tiejun, HOU Dongshuai, et al. Bull Chin Ceram Soc (in Chinese), 2019, 38: 615–621.
- [25] 黄庆华, 周承宗, 顾祥林, 等. 混凝土界面过渡区水分传输特性试验研究[J]. 建筑结构学报, 2019, 40: 174–180. HUNAG Qinghua, ZHOU Chengzong, GU Xianglin, et al. J Build Struct (in Chinese), 2019, 40: 174–180.
- [26] ZHANG M. Multiscale Lattice Boltzmann-Finite Element Modelling of Transport Properties in Cement-based Materials[M]. Netherlands: Delft University of Technology, 2013: 139–141.
- [27] ZHENG J-J, WONG H S, BUENFELD N R. Assessing the influence of ITZ on the steady-state chloride diffusivity of concrete using a numerical model[J]. Cem Concr Res, 2009, 39(9): 805–813.
- [28] MALEKI M, RASOOLAN I, KHAJEHDEZFULY A, et al. On the effect of ITZ thickness in meso-scale models of concrete[J]. Constr Build Mater, 2020, 258: 119639.
- [29] BAO H, XU G, YU M, et al. Evolution of ITZ and its effect on the carbonation depth of concrete under supercritical CO₂ condition[J]. Cem Concr Compos, 2022, 126: 104336.
- [30] GAO Y, DE SCHUTTER G, YE G, et al. The ITZ microstructure, thickness and porosity in blended cementitious composite: Effects of curing age, water to binder ratio and aggregate content[J]. Compos B Eng, 2014, 60: 1–13.
- [31] WU K, SHI H, XU L, et al. Microstructural characterization of ITZ in blended cement concretes and its relation to transport properties[J]. Cem Concr Res, 2016, 79: 243–256.
- [32] SHANE J D, MASON T O, JENNINGS H M, et al. Effect of the interfacial transition zone on the conductivity of portland cement mortars[J]. J Am Ceram Soc, 2000, 83(5): 1137–1144.
- [33] JIA Z, HAN Y, ZHANG Y, et al. Quantitative characterization and elastic properties of interfacial transition zone around coarse aggregate in concrete[J]. J Wuhan Univ Technol Mater Sci Ed, 2017, 32(4): 838–844.
- [34] LUTZ M P, MONTEIRO P J M, ZIMMERMAN R W. Inhomogeneous interfacial transition zone model for the bulk modulus of mortar[J]. Cem Concr Res, 1997, 27(7): 1113–1122.
- [35] GUO Z, ZHENG C, SHI B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method[J]. Phys Rev E, 2002, 65(4): 046308.
- [36] LALLEMAND P, LUO L-S. Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability[J]. Phys Rev E, 2000, 61(6): 6546–6562.
- [37] LI R, YANG Y S, PAN J, et al. Lattice Boltzmann modeling of permeability in porous materials with partially percolating voxels[J]. Phys Rev E, 2014, 90(3): 033301.
- [38] WALSH S D C, BURWINKLE H, SAAR M O. A new partial-bounceback lattice-Boltzmann method for fluid flow through heterogeneous media[J]. Comput Geo Sci, 2009, 35(6): 1186–1193.
- [39] HAMAMI A A, TURCRY P, AÏT-MOKHTAR A. Influence of mix proportions on microstructure and gas permeability of cement pastes and mortars[J]. Cem Concr Res, 2012, 42(2): 490–498.
- [40] WU K, HAN H, LI H, et al. Experimental study on concurrent factors influencing the ITZ effect on mass transport in concrete[J]. Cem Concr Compos, 2021, 123: 104215.
- [41] LI X, XU Q, CHEN S. An experimental and numerical study on water permeability of concrete[J]. Constr Build Mater, 2016, 105: 503–510.