

基于卵球形集料堆积的混凝土边壁效应

卿龙邦, 李万飞, 李明祺

(河北工业大学土木与交通学院, 天津 300401)

摘 要: 边壁效应使集料在模板附近与基体内部分布不同, 造成混凝土微观结构和宏观性能的差异。为探究混凝土边壁效应对集料分布的影响, 利用蒙特卡洛原理, 构造了单形状-双尺寸、单形状-多尺寸卵球形集料堆积体系, 研究了集料形状、尺寸和体积分数变化对边壁效应层厚度的影响。利用体视学理论和截面分析算法确定了边壁效应层厚度与粒子体积分数和平均直径的量化关系, 建立了粒子分布密度的预测模型并验证了其可靠性。最后, 应用边壁效应层厚度和粒子分布预测模型计算了混凝土不同位置处的弹性模量。统计分析可知, 边壁效应层厚度随粒子的体积分数增加而减小, 随着粒子的平均直径增大而增大, 相比之下受粒子形状的影响较小。

关键词: 卵球形集料; 边壁效应; 集料体积分数; 集料平均直径; 弹性模量

中图分类号: TU528 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2025)01-0060-11

网络出版时间: 2024-11-05



在细观尺度上, 混凝土是一种由集料和水泥浆组成的两相复合材料。由于“边壁效应”存在, 在混凝土试件的成型过程中, 集料在模板附近的分布密度与基体内部不同^[1-2], 以及水泥颗粒在集料周围分布不均匀^[3], 进而导致了边壁效应区性能与基体性能的差异^[4-7]。集料的组成(包括集料形状、尺寸和体积分数等)是影响边壁效应下集料分布形式的关键^[8-10]。因此, 边壁效应成为影响土木工程材料的力学和传输性能设计的一个重要因素^[11-13]。

Kreijger^[14]利用试验的方法研究了混凝土的边壁效应, 并测定了截面上集料的分布密度, 结果表明从边壁到中心区域集料密度先增加后趋于稳定。朱逸等^[13]用压汞法联合 X 射线断层扫描方法研究边壁效应影响下界面过渡区结构变化, 成功解析出界面过渡区的三维形貌, 为研究混凝土结构宏观性能提供了理论指导。许文祥等^[15-16]研究了二维多尺寸椭圆粒子堆积的混凝土边壁效应, 结果表明边壁效应层厚度与粒子最大等效直径相关。Stroeven^[17]用离散元的方法模拟了球形集料混凝土的边壁效

应, 得出了集料的体积分数随着混凝土的边壁层向中心区域先上升, 之后逐渐稳定。郑建军等^[18-19]研究了二维和三维粒子随机堆积体系模拟混凝土细观结构, 并对边壁效应做了研究, 发现边壁层厚度近似为集料的最大粒径。Lin 等^[20]模拟了超球集料的混凝土细观结构来研究边壁效应, 结果显示边壁层厚度与集料体积分数和集料尺寸相关。Huang 等^[21]分析了多尺寸椭圆集料的混凝土边壁效应, 研究发现边壁层厚度几乎等于集料最大直径。由此可知, 上述模型中对边壁效应层厚度的影响因素还存在争议, 同时以上数值方法未将粒子平均直径和粒子的形状的影响考虑在内。

由于试验方法耗时长、成本高且结果离散性大。因此, 利用计算机数值模拟多尺寸卵球形集料对混凝土边壁效应的影响。在三维立方体中随机生成尺寸遵从 Fuller 分布的卵球形集料粒子; 利用截面分析算法获取各集料的信息; 提出边壁层厚度与集料体积分数和集料平均直径的量化关系; 最后, 分析混凝土边壁效应对弹性模量的影响。

收稿日期: 2024-05-25。 修订日期: 2024-07-07。

基金项目: 国家自然科学基金(52308245); 河北省基金(E2022020141, E2023202268, 236Z3805G); 中国博士后科学基金(2023M730907)。

第一作者: 卿龙邦(1982—), 男, 博士, 教授。

通信作者: 李明祺(1997—), 男, 博士, 讲师。

Received date: 2024-05-25. Revised date: 2024-07-07.

First author: QING Longbang (1982—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: qing@hebut.edu.cn

Correspondent author: LI Mingqi (1997—), male, Ph.D., Lecturer.

E-mail: limingqi@hebut.edu.cn

1 混凝土数值模型建立

混凝土数值模型建立过程如下: 在容器中随机生成并投放粒子, 得到粒子的坐标信息。根据体视学原理和截面分析算法获得不同位置处的粒子分布密度以表征细观结构, 并验证数值模型的可靠性。

1.1 建立卵球粒子堆积体系

假设卵球形集料分布在 1 个三维立方体容器中, 容器边长为 L 。立方体容器的边壁符合半周期边界条件, 即上下边壁为刚性边界, 其余各面为周期性边界条件。为了保证模拟的真实性, 集料粒子为硬粒子, 确保粒子间不碰撞。在数值模拟中, 集料的粒径分布通常采用 Fuller 函数^[22] [式(1)和式(2)]。图 1 比较了生成模型结构的粒径分布曲线与 Fuller 函数曲线, 结果显示二者具有较好的一致性, 验证了 Fuller 分布的有效性。

$$f_V(D_{eq}) = \frac{-2.5}{(D_{max,eq}^{-2.5} - D_{min,eq}^{-2.5})D_{eq}^{3.5}} \quad (1)$$

$$F_V(D_{eq}) = \frac{D_{eq}^{-2.5} - D_{min}^{-2.5}}{D_{max,eq}^{-2.5} - D_{min,eq}^{-2.5}} \quad (2)$$

式中: $D_{max,eq}$ 、 $D_{min,eq}$ 分别为粒子最大、最小等效直径; $f_V(D_{eq})$ 为体积基概率密度; $F_V(D_{eq})$ 为累计体积基概率函数; D_{eq} 为集料等效直径, 即不规则外形物体的体积与球体体积相等时, 该球体的直径。

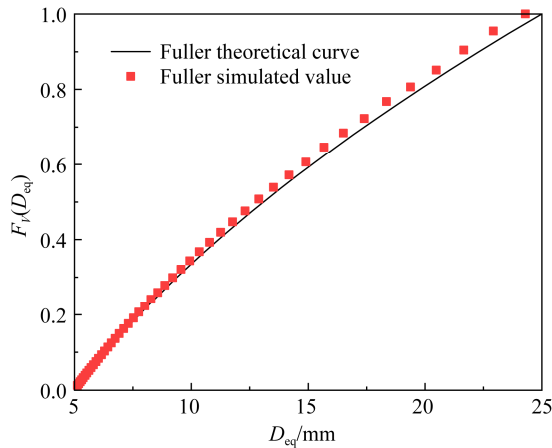


图 1 Fuller 分布下粒径级配的理论结果与模拟结果的对比
Fig. 1 Comparison of theoretical and simulated results for particle size gradation under Fuller distribution

构造了如式(3)所示的卵球粒子^[23], 其中构造的卵球粒子中心位于坐标原点。对于空间任意位置和角度的卵球粒子的构造, 可通过对粒子平移、旋转来实现, 如式(4)和式(5)所示。粒子堆积过程为: 预先设置容器尺寸 L 、容器边壁类型、粒子粒径范围

和粒子的体积分数 V_F ; 确定不同粒径对应的粒子数量并按照粒子的粒径由大到小的顺序在容器中生成; 验证将要生成的粒子与已经生成的粒子不碰撞, 判断粒子间碰撞可通过“几何势”方法判断^[24]; 最后在容器中实现粒子堆积。

$$F_{\text{ovoid}}(x, y, z) = \left(\frac{1}{T \frac{z}{c} + 1} \right)^2 \left(\frac{x}{a} \right)^2 + \left(\frac{1}{T \frac{z}{c} + 1} \right)^2 \left(\frac{y}{b} \right)^2 + \left(\frac{z}{c} \right)^2 - 1 \quad (3)$$

式中: T 为锥化参数; a 、 b 和 c 分别为粒子在 x 、 y 和 z 轴方向的半轴长。

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{rm} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & x_0 \\ 0 & 1 & 0 & y_0 \\ 0 & 0 & 1 & z_0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \mathbf{R}_{om} &= \begin{bmatrix} \cos \gamma_z & -\sin \gamma_z & 0 & 0 \\ \sin \gamma_z & \cos \gamma_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &\begin{bmatrix} \cos \gamma_y & 0 & -\sin \gamma_y & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sin \gamma_y & 0 & \cos \gamma_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \gamma_x & -\sin \gamma_x & 0 \\ 0 & \sin \gamma_x & \cos \gamma_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

式中: $\mathbf{T}_{rm}$ 为平移矩阵; $\mathbf{R}_{om}$ 为旋转矩阵; x_0 、 y_0 和 z_0 为粒子中心坐标; γ_x 、 γ_y 和 γ_z 分别为颗粒在 x 轴、 y 轴和 z 轴方向的旋转角。

其中判断粒子间的重叠时, 假设容器中存在任意两粒子 i 和 j , 粒子中心到粒子表面的最大和最小距离分别为 $d_{max,i}$ 、 $d_{max,j}$ 和 $d_{min,i}$ 、 $d_{min,j}$, 两粒子中心距离 d_{ij} , 判断粒子间重叠判据算法包括以下步骤:

1) 当 $d_{ij} > d_{max,i} + d_{max,j}$ 时粒子 i 和 j 不重叠; 当 $d_{ij} \leq d_{min,i} + d_{min,j}$ 时粒子 i 和 j 重叠。

2) 当 $d_{min,i} + d_{min,j} < d_{ij} \leq d_{max,i} + d_{max,j}$ 时, 可通过几何势算法判断。假设粒子 j 表面存在任意一点 $M(x_M, y_M, z_M)$, 则 M 到粒子 i 的几何势 G_{pov} 可由式(6)获得, 当几何势 $G_{pov} \leq 0$ 时, M 点位于粒子 i 的内部。计算粒子 j 所有表面点到 i 的几何势, 若存在几何势 G_{pov} 小于 0 的点(如图 2 中在 i 内部的点), 则表明粒子 i 和 j 重叠。

$$G_{\text{pov}} = \left(\frac{1}{T_i \frac{z_M}{c_i} + 1} \right)^2 \left(\frac{x_M}{a_i} \right)^2 + \left(\frac{1}{T_i \frac{z_M}{c_i} + 1} \right)^2 \left(\frac{y_M}{b_i} \right)^2 + \left(\frac{z_M}{c_i} \right)^2 + 1 \quad (6)$$

式中： a_i 、 b_i 和 c_i 分别为粒子 i 在 x 轴、 y 轴和 z 轴的半轴长； T_i 为粒子 i 的锥化参数。

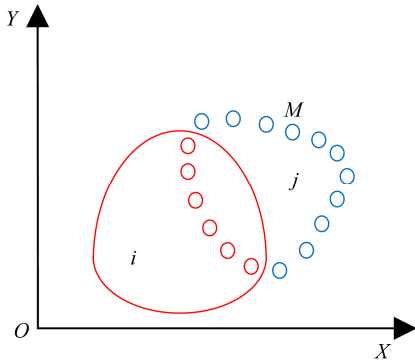


图2 几何势算法示意图

Fig. 2 Schematic diagram of the geometric potential algorithm

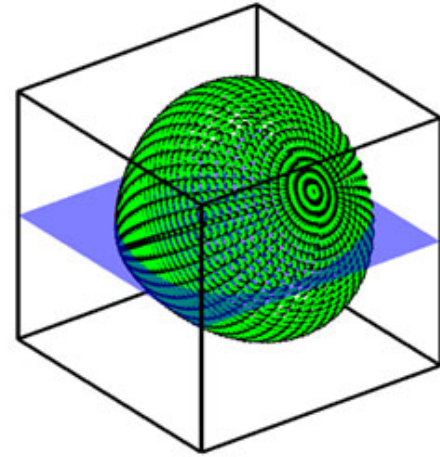
1.2 特征参数表征混凝土细观结构

在粒子堆积体系构建完成后，为了获取结构不同位置处的粒子信息，在距离刚性边界 h 处设置截面，通过截面分析算法^[25]得到不同 h 处二维截面上粒子面积分数 A_A 。其中，截面分析算法获取粒子面积步骤如下：

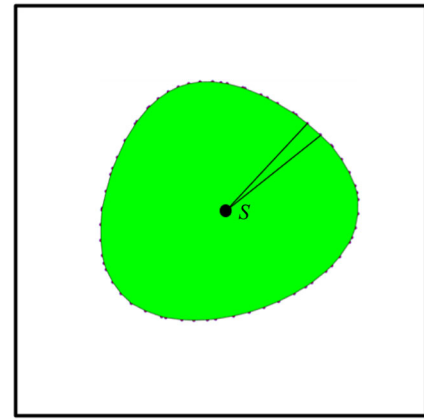
- 1) 对粒子表面进行点离散，将离散点用线段连接，并与截面相交，如图3a所示；
- 2) 结合数学的理论方法求解线段与截面的交点；连接各交点形成封闭的凸多边形，如图3b所示；
- 3) 在凸多边形内任取一点 S ， S 与粒子内相邻两交点相连构成三角形，平面内的三角形累加即可近似为截取的面积 A 。

根据截面分析算法可知，获取的面积主要受粒子表面离散点的数量影响，作为实例，截面在 $h=L/2$ 时，粒子表面分别选取 10^2 、 20^2 、 30^2 、 40^2 和 50^2 个离散点，图4展示了随离散点数量增加，截面面积的变化。

由图4可见，随着表面点数量增加，同一截面高度获取的面积逐渐增大，最后趋于稳定。由此说明采用的截面算法可以保证截面面积的精度。



(a) Surface discretization



(b) Cross-sectional area

图3 截面分析算法示意图

Fig. 3 Schematic diagram of the cross-section analysis algorithm

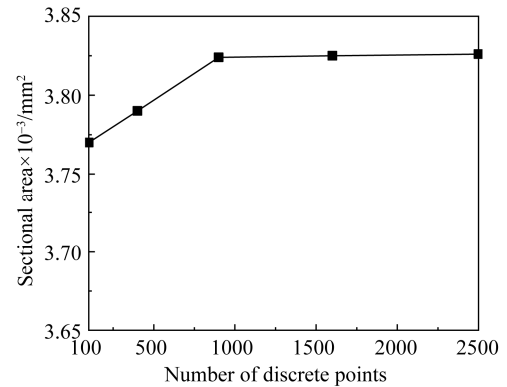


图4 截面面积随离散点数量变化

Fig. 4 Variation of cross-sectional area with the number of discrete points

根据体视学的理论，三维结构的特征参数可以用二维截面确定，即三维结构的粒子分布密度 V_V 可以用二维截面内粒子面积分数 A_A 无偏估计。对于混凝土细观结构，通常用粒子分布密度 V_V 来反映边

壁效应层的厚度 T_p (它对应了粒子分布密度曲线上升区间的距离, 如图 5 所示)^[26]。图 6 展示了截面分析算法得到的距离刚性边壁 h 处细观结构粒子分布密度的示意图, 统计方法如式(7)所示:

$$V_V = A_A = \frac{\sum A(D_{eq})}{L^2} \quad (7)$$

式中: $A(D_{eq})$ 为截面截到粒子尺寸为 D_{eq} 的非球形粒子在二维截面内的面积; A_A 为截面在 h 处时粒子面积分数。

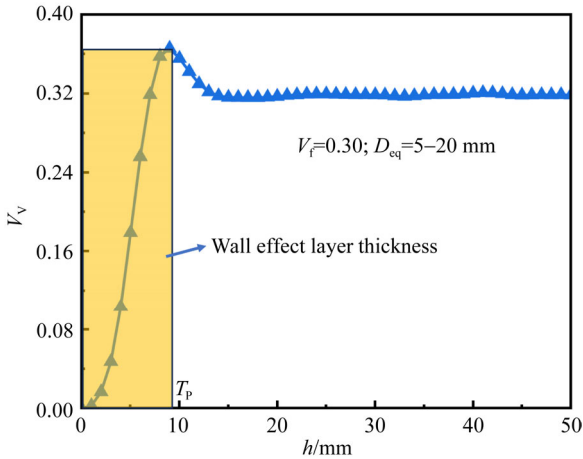


图 5 边壁效应层厚度示意图

Fig. 5 Schematic diagram of wall effect layer thickness

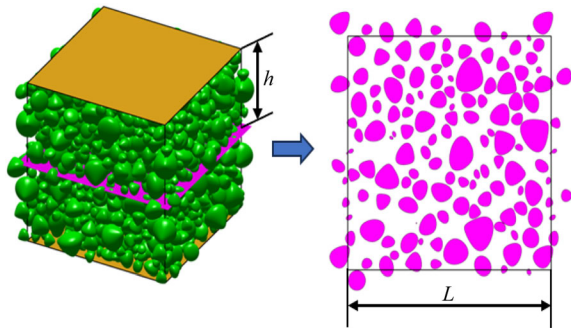
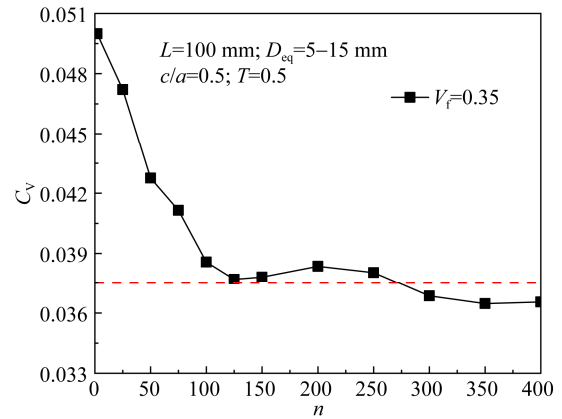


图 6 截面分析示意图

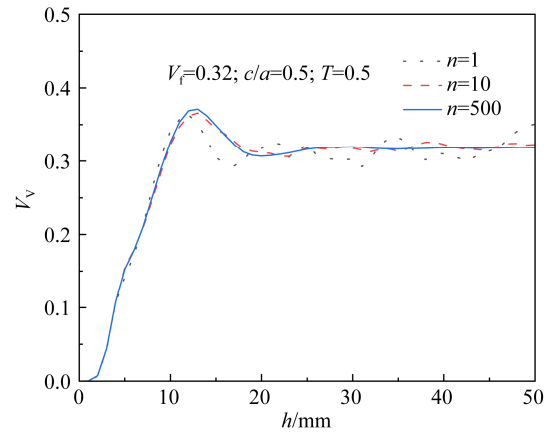
Fig. 6 Schematic of cross-section analysis

由于混凝土中粒子分布密度 V_V 随着 h 变化而变化, 所以随着平面在 $h=0$ 向 $h=L/2$ 逐渐移动, 集料分布密度发生变化。为使结果更具稳定性, 利用计算机模拟 n 次多尺寸卵球粒子堆积, 取 n 次的平均值作为统计结果。为了确定模拟的次数, 可以用变异系数(C_V)来表示数据的稳定性, 图 7 展示了变异系数随模拟次数变化的曲线。由图 7a 可见, 当模拟次数达到 400 次时 $C_V < 0.037$, 此时可认为结果趋于稳定, 图 7b 展示了模拟次数不同时粒子分布密度曲线变化, 可以看到当 $n=1$ 和 $n=10$ 时曲线存在较大

的波动性, 当模拟次数 $n=500$ 时, 曲线基本稳定。所以设定 $n=500$ 次模拟后的平均结果作为卵球形集料对混凝土边壁效应影响的参考值。



(a) Curve of C_V-n



(b) Curve of V_V-h with different simulation times

图 7 C_V-n , V_V-h 变化曲线

Fig. 7 Curves of variation of C_V-n , V_V-h

2 边壁效应影响因素分析

根据研究可知边壁效应层的厚度可被用于表征边壁效应的影响程度^[27], 主要分析集料粒子的形状、尺寸分布和体积分数对边壁效应层厚度的影响。

2.1 粒子形状对边壁效应的影响

为研究粒子形状的影响, 选取了扁卵球形、长卵球形、扁椭圆形和长椭圆形 4 种形状的粒子, 如图 8 所示。预先设置粒子体积分数 $V_f=0.38$, 粒子尺寸服从 Fuller 分布 $D_{eq}=5\sim 25$ mm。图 9 为集料分布密度由刚性边壁到结构中心的变化曲线。

由图 9 可见, 随着边壁到中心的距离 h 增加, 粒子分布密度在边壁效应区逐渐增大, 在结构中心趋于平稳。不同形状对应的 V_V-h 曲线在上升和稳定段基本重合, 意味着不同形状的粒子堆积体系的

边壁效应层厚度 T_P 几乎相同。因此, 可以得出粒子的形状对细观结构边壁效应影响不显著。

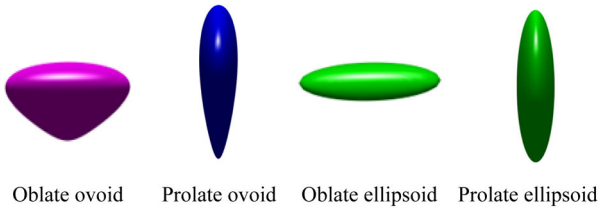


图 8 不同形状粒子示意图

Fig. 8 Schematic diagram of different shaped particles

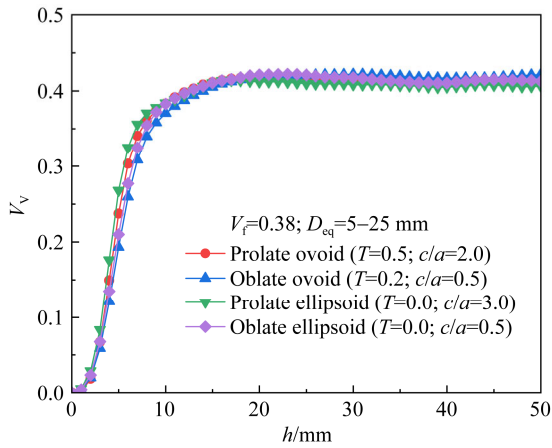


图 9 集料分布密度由刚性边壁到结构中心的变化曲线

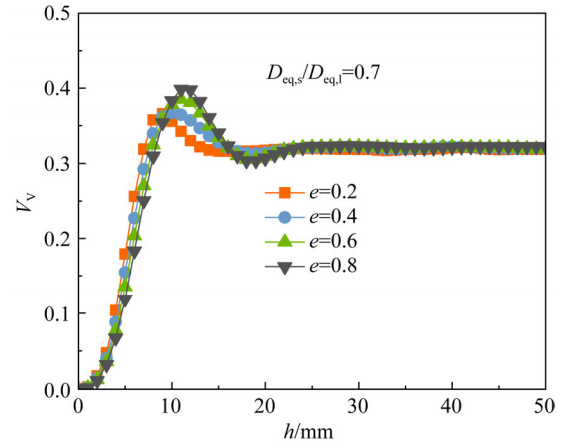
Fig. 9 Curves of aggregate distribution density from rigid boundary to the center of the structure

2.2 尺寸对边壁效应的影响

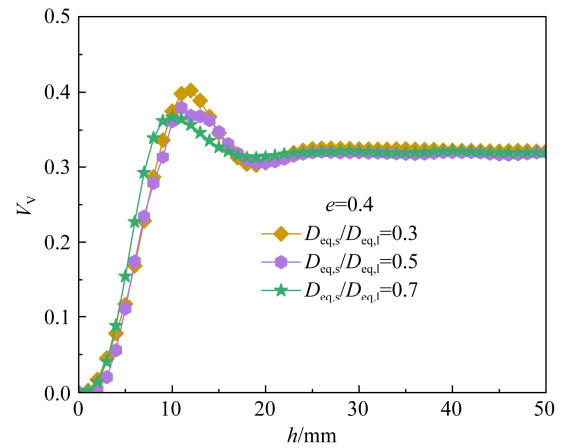
2.2.1 单形状-双尺寸 假设以一种形状的卵球 ($c/a=0.5$; $T=0.5$) 粒子为研究对象, 建立了单形状-双尺寸粒子堆积模型。较小和较大尺寸粒子的等效直径分别为 $D_{eq,s}$ 和 $D_{eq,l}$, 2 种粒子直径的比值用 μ 来表示, 即 $\mu=D_{eq,s}/D_{eq,l}$ 。另外, 小粒子与大粒子的数量分别用 N_s 和 N_l 表示, e 表示大粒子的数量与粒子总数的比值, 即 $e=N_l/(N_l+N_s)$ 。将模型中大尺寸粒子的等效直径 $D_{eq,l}$ 恒定为 10 mm, 尺寸比 μ 的取值分别为 0.3、0.5 和 0.7, 大尺寸粒子的数量占比 e 的取值分别为 0.2、0.4、0.6 和 0.8, 容器边长 $L=100$ mm, 给定粒子体积分数 $V_f=0.3$, 图 10 为双尺寸粒子堆积结构的分布密度曲线。

图 10a 为当给定 2 种粒子的尺寸比例 $\mu=0.7$ 时, 曲线最高点随着大尺寸粒子数量占比 e 增加而增大, 同时曲线上升段向右移动即与边界的距离也增大, 意味着此时边壁层厚度 T_P 不断增大, 因为大尺寸粒子占比越大, 在边壁层附近大尺寸粒子越多, 结构致密性越差。图 10b 中展示了当 2 种粒子中大

尺寸粒子数量占比 e 给定时, 曲线最高点与边界的距离随着粒子的尺寸比值 μ 增大而减小, 因为当 e 固定时, μ 增大代表 2 种粒子的尺寸相差越大, 小尺寸粒子数量越多, 则分布在边壁层附近的小尺寸粒子越多, 边壁层厚度越大。



(a) Proportion of the number of particles



(b) Size ratio of the particle

图 10 双尺寸粒子堆积结构的分布密度曲线

Fig. 10 Density of distribution curves for double-size particle packing structures

为验证在粒子单形状-双尺寸的条件下, 边壁效应层厚度 T_P 与粒子尺寸的关系, 提出了用双尺寸堆积粒子的平均直径 $\langle D \rangle$ 量化边壁效应层厚度 T_P , $\langle D \rangle$ 的求解方式见式(8)。图 11 为平均直径 $\langle D \rangle$ 条件下, T_P 随大粒子占比 e 的变化曲线。

$$\langle D \rangle = eD_{eq,l} + (1-e)D_{eq,s} \quad (8)$$

式中: $\langle D \rangle$ 为双尺寸粒子的平均直径; $D_{eq,s}$ 和 $D_{eq,l}$ 分别为小粒子和大粒子的等效直径。

由图 11 可见, 在给定 μ ($\mu=0.7$) 的条件下, 粒子堆积体系的边壁效应层厚度 T_P 随大尺寸粒子数量占比 e 增加而升高, 原因可能是大尺寸数量多导致体

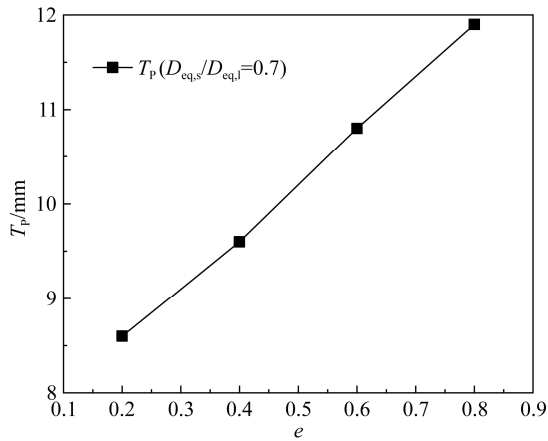
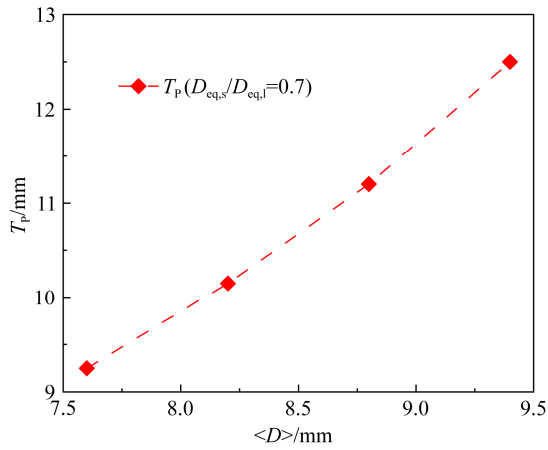
(a) Variation of T_p with e (b) Variation of T_p with $\langle D \rangle$

图 11 单形状-双尺寸粒子堆积体系 T_p 随 $\langle D \rangle$ 、 e 的变化
Fig. 11 Variation of T_p with e , $\langle D \rangle$ for the single shape-double size particle packing system

系密实度减小; 根据式(7)可知 $\mu=0.7$ 对应的粒子的平均直径 $\langle D \rangle$, T_p 随平均直径 $\langle D \rangle$ 增加而增大, 如图 11b 所示。为便于表达粒子不同尺寸对应的边壁效应层厚度, 本文提出借助平均直径 $\langle D \rangle$ 来反映单形状-双尺寸粒子边壁效应层厚度的变化。接下来, 将探究并验证在多尺寸粒子堆积体系中 T_p 与粒子平均直径 $\langle D \rangle$ 的关系。

2.2.2 单形状-多尺寸 本节考察了单形状-多尺寸集料粒子对细观结构边壁效应的影响, 周小飞等^[28]认为椭圆形集料分布的界面过渡区厚度与集料最大粒径相关; 许文祥等^[15]模拟多尺寸椭圆形粒子混凝土, 结果显示混凝土结构中粒子分布密度随集料粒径的最大尺寸变化而变化。由 2.2.1 节知在单形状-双尺寸粒子堆积的细观结构中, 粒子的平均直径可以被用来表征结构的边壁效应层厚度, 为了研究在多尺寸体系中粒子的平均直径对细观结构边壁效应的影响, 式(9)给出了多尺寸粒子的平均直径的

表达式。

$$\langle D \rangle = \int_{D_{\min,eq}}^{D_{\max,eq}} D_{eq} f_N(D_{eq}) dD_{eq} \quad (9)$$

式中: $\langle D \rangle$ 为平均直径; $f_N(D_{eq})$ 为数量基概率密度; $D_{\min,eq}$ 、 $D_{\max,eq}$ 分别为粒子的最小和最大等效直径。

以扁卵形($T=0.2$; $c/a=2.0$)集料粒子为例, 初始参数设置为 $D_{\min,eq}=5$ mm, $D_{\max,eq}=10\sim 30$ mm, $V_f=0.38$ 。图 12 为多尺寸集料粒子堆积的细观结构粒子分布密度 V_v 在考虑边壁效应时边壁到结构中心之间的统计结果。

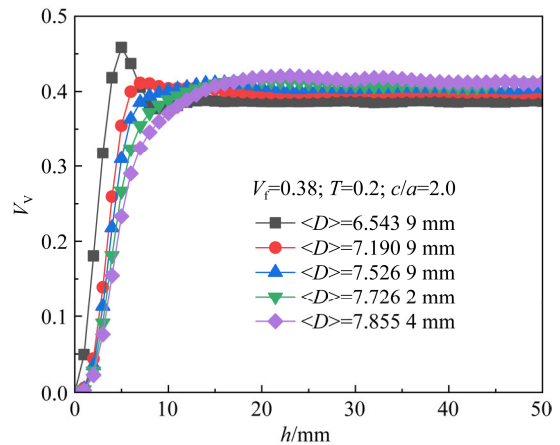


图 12 不同尺寸时, 粒子分布密度由边界到中心的变化
Fig. 12 Variation of particle distribution density from boundary to center at different sizes

图 12 为在不同粒子级配各自对应的平均直径条件下, 粒子分布密度由边壁到中心的变化曲线。由图 12 可见, 当单形状-多尺寸粒子平均直径 $\langle D \rangle$ 小于 7.19 mm 时, 混凝土结构中的粒子分布密度 V_v 分为上升、下降, 最后趋于稳定, 与 Xu 等^[29]研究的椭圆形单尺寸和多尺寸椭圆形集料对边壁效应影响以及郑建军等^[30]研究的圆盘形集料体积分数曲线形状一致。当卵球形集料平均直径大于等于 7.52 mm 时, 混凝土结构的集料粒子分布密度曲线形状分为上升和稳定 2 个阶段, 而且随着平均直径增加, 曲线会变得更加平滑, 与 Sayari 等^[27]的实验结果一致。图 13 为随着粒子平均直径变化, 边壁层厚度 T_p 的变化。由图 13 可见, 随着粒子的平均直径变大, 图 12 中对应的曲线的上升段向右移动, 即边壁效应层厚度 T_p 逐渐变大。

2.3 体积分数对边壁效应的影响

图 14 为不同集料体积分数($V_f=0.32, 0.35, 0.38, 0.41$)对应的混凝土细观结构的特征参数集料分布密度 V_v 从边壁到结构中心的统计结果。

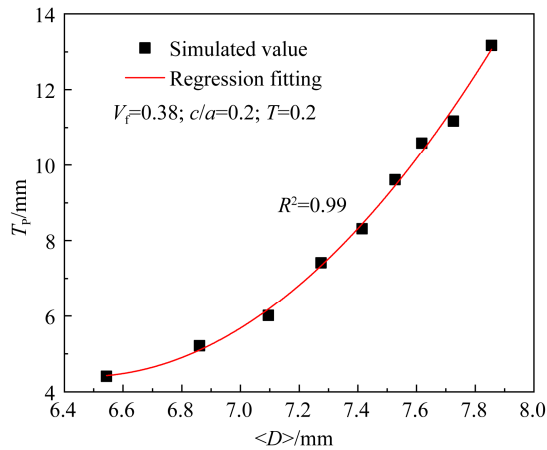
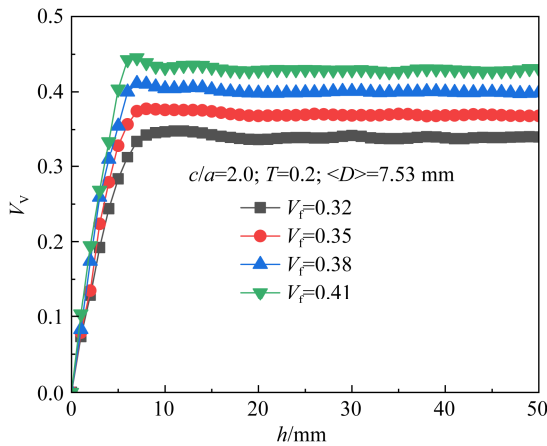
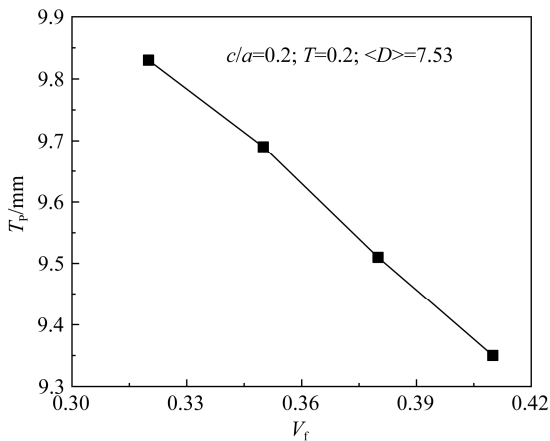


图 13 尺寸分布时, 比较边壁层厚度模拟值与解析值
Fig. 13 Comparison of simulated and analyzed values of wall layer thickness for size distribution



(a) Particle distribution density curves



(b) Variation of \$T_p\$ with \$V_f\$

图 14 粒子分布密度、边壁层厚度的变化曲线
Fig. 14 Curves of variation of particle distribution density, thickness of wall effect layer

由图 14a 可见, 虽然粒子分布密度 \$V_v\$ 的曲线形状非常相似, 但是在中心区域 \$V_v\$ 趋于稳定时都对应着不同的 \$V_f\$。随着集料体积分数 \$V_f\$ 变化, 混凝土成

型过程中模板与集料之间的边壁效应层厚度 \$T_p\$ (粒子分布密度上升区域对应的距离) 也发生变化, 随着 \$V_f\$ 增大, 混凝土边壁效应层厚度随之减小, 如图 14b 所示, 原因可能是集料的体积分数增大, 集料粒子数量增加, 混凝土密实度增加, 混凝土边壁效应层厚度 \$T_p\$ 减小。

为研究单形状-多尺寸粒子的细观结构边壁层厚度与粒子平均直径、粒子体积分数的关系, 提出了式(9)来量化三者的关系。

$$T_p = a_1 V_f + a_2 <D> + a_3 V_f <D> + a_4 <D>^2 + a_5 V_f <D>^2 + a_6 <D>^3 \quad (10)$$

式中: \$V_f\$ 为粒子体积分数; \$<D>\$ 为粒子的平均直径; \$T_p\$ 为边壁效应层厚度; \$a_1 \sim a_6\$ 为拟合参数, 其值见表 1。

表 1 式(10)中拟合参数的值
Table 1 Values of fitted parameters in Eq. (10)

Fitting parameter						\$R^2\$
\$a_1\$	\$a_2\$	\$a_3\$	\$a_4\$	\$a_5\$	\$a_6\$	
214.3	10.6	-62.4	-3.24	4.42	0.27	0.992 7

图 15 为同时考虑粒子体积分数 \$V_f\$ 和粒子平均直径 \$<D>\$ 的影响时, 对边壁层厚度 \$T_p\$ 的理论值与模拟值做了比较。由图 15 可见, 随着粒子体积分数增加, 边壁层厚度减小; 随着粒子的平均直径增加, 边壁层厚度增大; 给出的解析方程基本能够反映单形状-多尺寸粒子堆积体系中粒子体积分数 \$V_f\$ 和粒子平均直径 \$<D>\$ 耦合作用对边壁层厚度 \$T_p\$ 的影响。

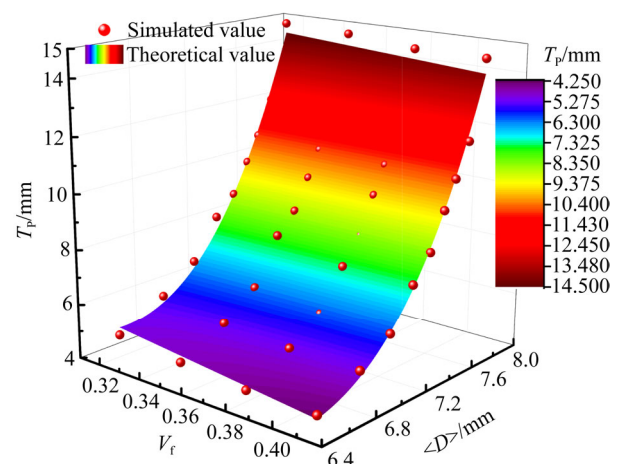


图 15 边壁层厚度 \$T_p\$ 与集料体积分数 \$V_f\$、平均等效直径 \$<D>\$ 的关系

Fig. 15 Relationship between wall effect layer thickness \$T_p\$ and aggregate volume fraction \$V_f\$ average equivalent diameter \$<D>\$

3 粒子分布密度量化

粒子的分布密度函数 $D(h)$ 可以较为准确地描述粒子堆积的细观结构从边壁到中心区域粒子的分布情况。由于边壁效应, 中心区域粒子分布密度 D_Z 往往大于预设的粒子体积分数 V_f , 同时, 粒子的分布密度 D_Z 还与粒子的平均直径相关。图 16 为不同的粒子体积分数 V_f 条件下, D_Z/V_f 与边壁效应层厚度 T_p 、平均直径 $\langle D \rangle$ 比值的量化关系。

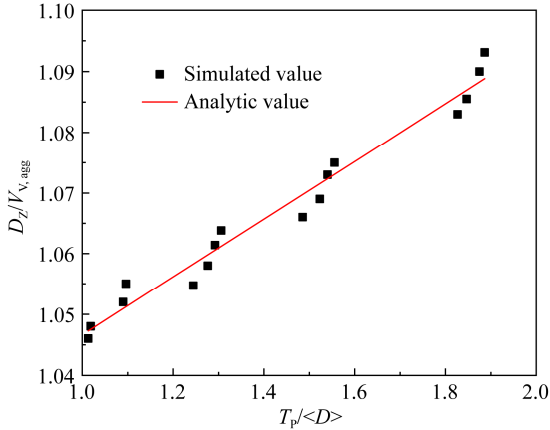


图 16 D_Z/V_f 的模拟值和解析解

Fig. 16 Simulated values and analytical solutions for D_Z/V_f

由图 16 可见, D_Z/V_f 与 $T_p/\langle D \rangle$ 的关系, 在粒子平均直径一致的情况下, 随着粒子体积分数增加, D_Z/V_f 的值逐渐减小, 原因为细观结构整体的体积分数固定, 粒子体积分数大, 则对应的边壁层厚度小, 为保证总体体积分数稳定, 中心区域的体积分数变小。为便于计算, 提出了统一的计算式(11), 并比较了模拟值与解析解, 结果显示二者的一致性较好。

$$\begin{aligned} D_Z/V_f &= 0.047(T_p/\langle D \rangle) + 0.988 \\ R^2 &= 0.978 \end{aligned} \quad (11)$$

式中: V_f 为粒子的体积分数; D_Z 为细观结构中心区域粒子分布密度; $\langle D \rangle$ 为粒子的平均直径; T_p 为边壁效应层厚度。

根据 2.3 节知粒子分布密度曲线可以被看作由上升段和水平段 2 部分组成, 为获得粒子分布密度函数 $D(h)$ 的解析式, 提出式(12)表征 $D(h)$, 假设 $D(h)$ 形式为:

$$D(h) = \begin{cases} B_1 h^3 + B_2 h^2 + B_3 h & 0 \leq h \leq T_p \\ D_Z & h \geq T_p \end{cases} \quad (12)$$

式中: $D(h)$ 为粒子分布密度; D_Z 为细观结构中心区域粒子分布密度; T_p 为边壁层厚度; B_1 、 B_2 和 B_3 为与 T_p 、 V_f 和 D_Z 相关的系数, 表达式如式(13)所示。

$$B_1 = \frac{-12D_Z(\frac{L}{2} - T_p) + 6V_f L - 8D_Z(T_p)T_p}{T_p^4} \quad (13a)$$

$$B_2 = \frac{24D_Z(\frac{L}{2} - T_p) - 12V_f L + 15D_Z(T_p)T_p}{T_p^3} \quad (13b)$$

$$B_3 = \frac{-12D_Z(\frac{L}{2} - T_p) + 6V_f L - 6D_Z(T_p)T_p}{T_p^2} \quad (13c)$$

根据数值模拟与数学拟合方式结合, 为此式(12)需要满足以下条件: (1)在 $h=T_p$ 处, $D(T_p)=D_Z(T_p)$, 且 $D'(h)=0$; (2)由于边壁效应中心区域的粒子体积分数略高于给定值, 所以为保证总体的体积分数不变, 需要满足式(14)。

$$\begin{aligned} V_f L/2 &= \int_0^{T_p} (B_1 h^3 + B_2 h^2 + B_3 h) dh + D_Z(L/2 - T_p) \end{aligned} \quad (14)$$

式中: L 为结构的边长; V_f 为给定的粒子体积分数; T_p 为边壁层厚度; D_Z 为结构中心区域的粒子分布密度。

将预设的参数代入式(12), 例如, 令 $V_f=0.32$ 、0.35、0.38 和 0.41; $D_{\min,eq}=5$ mm, $D_{\max,eq}=20$ mm; 根据式(9)和式(10)获得粒子平均直径, 边壁效应层厚度 T_p , 则中心区域粒子的密度 D_Z 可知, 根据(1)、(2) 2 个条件将理论结果与数值解比较, 结果如图 17 所示。

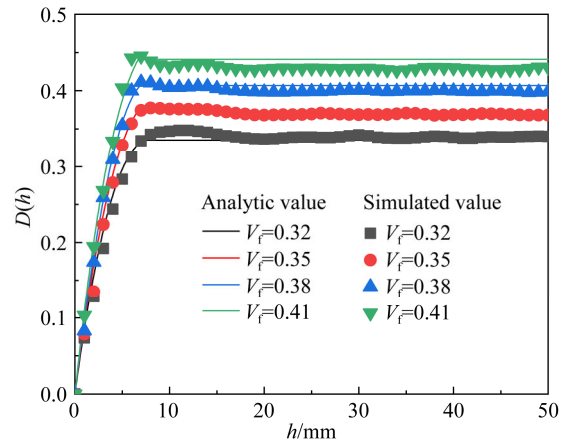


图 17 较不同体积分数的粒子分布密度模拟值与解析值
Fig. 17 Comparison of simulated and analyzed values of particle distribution density for different volume fractions

由图 17 可见, 随粒子体积分数的变化, 粒子的分布密度曲线形状相似, 边壁层厚度 T_p 随着粒子体积分数增加而减小, 理论值与模拟值有较好的一致性, 说明了所提出的粒子堆积的细观结构中粒子的分布密度函数 $D(h)$ 能反映边壁效应作用下粒子空间分布的实际情况。

4 宏观性能应用

混凝土通常被看作由固相和基体组成的二相复合材料^[15, 27], 它的物理力学性能, 如弹性模量^[31–32]、扩散系数^[4, 33–34]等, 均和集料的分布密度(体积分数)密切相关。作为工程中的常见应用, 本工作主要探究考虑边壁效应时集料分布密度对混凝土弹性模量的影响。边壁效应的存在使混凝土中集料分布不均匀, 结构边壁与中心区域的性能差异较大, 因此研究受边壁效应影响的混凝土弹性模量的变化规律, 对于提高混凝土结构性能提供了理论指导。

在计算弹性模量之前, 还需要确定混凝土体积模量 K 和剪切模量 G , 根据 Mori 等^[35]的研究, 体积模量和剪切模量可由式(15)和式(16)获得, 混凝土有效弹性模量可由式(18)获得。

$$\frac{K^{\text{MT}} - K_0}{K^{\text{MT}} + \frac{4}{3}G_0} = \sum_{i=1}^N f_i \frac{K_i - K_0}{K_i + \frac{4}{3}G_0} \quad (15)$$

$$\frac{G^{\text{MT}} - G_0}{G^{\text{MT}} + H_0} = \sum_{i=1}^N f_i \frac{G_i - G_0}{G_i + H_0} \quad (16)$$

$$H_0 = \frac{G_0(\frac{3}{2}K_0 + \frac{4}{3}G_0)}{K_0 + 2G_0} \quad (17)$$

$$E^{\text{MT}} = \frac{9K^{\text{MT}}G^{\text{MT}}}{3K^{\text{MT}} + G^{\text{MT}}} \quad (18)$$

式中: f_i 为第 i 相的体积分数, 其中 $i=0$ 为基体相, $i=1$ 为固相; K_0 、 G_0 分别为基体相的体积模量和剪切模量; K_i 、 G_i 分别为集料相的体积模量和剪切模量; K^{MT} 、 G^{MT} 为混凝土有效体积模量和剪切模量; E^{MT} 为有效弹性模量。

Bentz 等^[36]通过试验获得了混凝土各相的性能, 见表 2。根据前面介绍的粒子堆积模拟二相混凝土复合材料, 假设预设集料体积分数 $V_f=0.32$ 、 0.35 、 0.38 和 0.41 , 将第 3 节中粒子分布密度值 f_i 和表 2 的数据代入式(15)~式(18), 计算得到不同集料体积分数条件下, 有效弹性模量由边界到中心的变化曲线, 如图 18 所示。

表 2 混凝土各相的性能
Table 2 Properties of concrete phases

Concrete phase	Bulk modulus/GPa	Shear modulus/GPa
Aggregate	67	30
Matrix	13	9

图 18 为不同集料体积分数条件下, 有效弹性模量由边界到中心的变化曲线。由图 18 可见, 弹性模量变化曲线与体积分数曲线形状相似, 由上升和平稳 2 段组成。在边界处弹性模量小, 因为在边界

处集料较少, 整体粘聚力较弱; 结构中心处弹性模量增加且比较稳定, 因为在中心处集料分布密度稳定。另外, 随着集料体积分数增加, 弹性模量逐渐增加, 边壁层厚度逐渐减小, 即随集料体积分数增加, 弹性模量受边壁效应的影响逐渐减弱。考虑边壁效应的影响可为准确预测和增强复合材料的宏观性能提供指导。

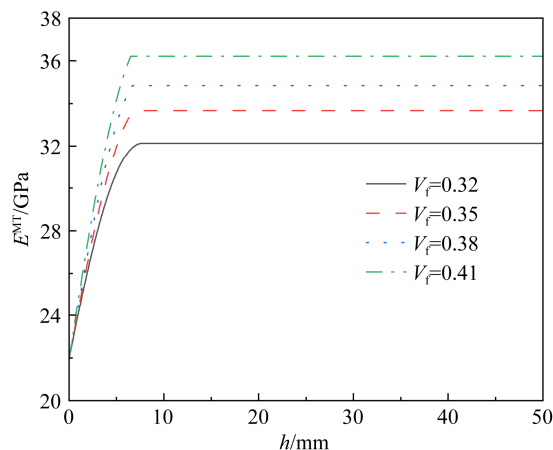


图 18 不同集料体积分数的混凝土弹性模量由边界到中心的变化曲线

Fig. 18 Variation curves of modulus of elasticity of concrete from boundary to center for different aggregate volume fractions

5 结论

1) 根据多种形状粒子的分布密度知粒子的形状对边壁效应的影响不显著。

2) 根据构造单形状-双尺寸、单形状-双尺寸集料的混凝土数值模型并结合截面分析算法, 建立了边壁效应层厚度 T_p 的预测模型, 结果显示边壁层厚度随集料平均直径增大而增大; 根据粒子分布密度随边壁到结构中心区域的变化规律, 结果显示边壁效应层厚度随集料体积分数增加而减小。

3) 根据粒子分布密度解析式, 计算了混凝土不同位置处的弹性模量, 弹性模量由边壁到中心分为增大和稳定 2 部分。弹性模量随集料体积分数增大而增大, 且集料体积分数增大具有削弱边壁效应的作用。

参考文献:

- [1] ZOU R P, YU A B. The packing of spheres in a cylindrical container: The thickness effect[J]. Chem Eng Sci, 1995, 50(9): 1504–1507.
- [2] XU W X, LV Z, CHEN H S. Effects of particle size distribution, shape and volume fraction of aggregates on the wall effect of concrete via random sequential packing of polydispersed ellipsoidal particles[J]. Phys A Stat Mech Appl, 2013, 392(3): 416–426.

- [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(5): 678–685.
SHI Huisheng, SUN Dandan, WU Kai. J Chin Ceram Soc, 2016, 44(5): 678–685.
- [4] 周宇, 刘清风. 三维混凝土细观模型构建与骨料形态对氯离子扩散影响的数值研究[J]. 材料导报, 2023, 37(24): 167–173.
ZHOU Yu, LIU Qingfeng. Mater Rep, 2023, 37(24): 167–173.
- [5] 徐泽华, 赵庆新, 张津瑞, 等. 界面过渡区对混凝土徐变性能的影响[J]. 硅酸盐学报, 2021, 49(2): 347–356.
XU Zehua, ZHAO Qingxin, ZHANG Jinrui, et al. J Chin Ceram Soc, 2021, 49(2): 347–356.
- [6] 陈惠苏, 孙伟, PIET S. 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, 32(1): 70–79.
CHEN Huisu, SUN Wei, PIET S. J Chin Ceram Soc, 2004, 32(1): 70–79.
- [7] 陈惠苏, 孙伟, Stroeven Piet. 水泥基复合材料集料与浆体界面研究综述(一): 实验技术[J]. 硅酸盐学报, 2004, 32(1): 63–69.
CHEN Huisu, SUN Wei, STROEVEN Piet. J Chin Ceram Soc, 2004, 32(1): 63–69.
- [8] LYU K, SHE W, CHANG H L, et al. Effect of fine aggregate size on the overlapping of interfacial transition zone (ITZ) in mortars[J]. Constr Build Mater, 2020, 248: 118559.
- [9] 童良玉, 刘清风. 考虑多尺度非均质性的混凝土传输性能预测模型[J]. 建筑材料学报, 2023, 26(10): 1062–1071.
TONG Liangyu, LIU Qingfeng. J Build Mater, 2023, 26(10): 1062–1071.
- [10] 陈惠苏, 孙伟, STROEVEN Piet. 水泥基复合材料界面材料宏观性能的影响[J]. 建筑材料学报, 2005, 8(1): 51–62.
CHEN Huisu, SUN Wei, STROEVEN Piet. J Build Mater, 2005, 8(1): 51–62.
- [11] ZOUAOUI R, MILED K, LIMAM O, et al. Analytical prediction of aggregates' effects on the ITZ volume fraction and Young's modulus of concrete[J]. Num Anal Meth Geomechanics, 2017, 41(7): 976–993.
- [12] TONG L Y, LIU Q F, XIONG Q X, et al. Modeling the chloride transport in concrete from microstructure generation to chloride diffusivity prediction[J]. Computer Aided Civil Eng, 2024, <https://doi.org/10.1111/mice.13331>.
- [13] 朱逸, 杨日交, 彭宇, 等. 水泥基材料界面过渡区的压汞法联合 X 射线断层扫描表征[J]. 硅酸盐学报, 2022, 50(8): 2136–2144.
ZHU Yi, YANG Rijiao, PENG Yu, et al. J Chin Ceram Soc, 2022, 50(8): 2136–2144.
- [14] KREIJGER P C. The skin of concrete composition and properties[J]. Mat Constr, 1984, 17(4): 275–283.
- [15] 许文祥, 陈惠苏. 多尺度椭圆形集料尺寸分布对混凝土边界效应的影响[J]. 东南大学学报(自然科学版), 2011, 41(5): 1048–1053.
XU Wenxiang, CHEN Huisu. J Southeast Univ Nat Sci Ed, 2011, 41(5): 1048–1053.
- [16] XU W X, CHEN H S, LV Z. An overlapping detection algorithm for random sequential packing of elliptical particles[J]. Phys A Stat Mech Appl, 2011, 390(13): 2452–2467.
- [17] STROEVEN M. Discrete numerical modelling of composite materials[D]. Delft: Delft University of Technology, 1999.
- [18] 郑建军, 周欣竹, 邢鸿燕. 二维圆形骨料分布的边界效应及简单应用[J]. 浙江工业大学学报, 2003, 31(1): 7–11.
ZHENG Jianjun, ZHOU Xinzhu, XING Hongyan. J Zhejiang Univ Technol, 2003, 31(1): 7–11.
- [19] ZHENG J J. Mesostructure of Concrete-Stereological analysis and some mechanical implications[D]. Delft: Delft University of Technology, 2000.
- [20] LIN J J, CHEN H S, ZHANG R L, et al. Characterization of the wall effect of concrete via random packing of polydispersed superball-shaped aggregates[J]. Mater Charact, 2019, 154: 335–343.
- [21] HUANG Q H, LI C Z, SONG X B. Spatial distribution characteristics of ellipsoidal coarse aggregates in concrete considering wall effect[J]. Constr Build Mater, 2022, 327: 126922.
- [22] ZHENG J J, LI C Q, ZHAO L Y. Simulation of two-dimensional aggregate distribution with wall effect[J]. J Mater Civ Eng, 2003, 15(5): 506–510.
- [23] LI M Q, CHEN H S, LI X Y, et al. Permeability of granular media considering the effect of grain composition on tortuosity[J]. Int J Eng Sci, 2022, 174: 103658.
- [24] 李明祺. 基于缺陷连通性和曲折性定量表征的水泥基复合材料渗透性能研究[D]. 南京: 东南大学, 2022.
LI Mingqi. Quantitative characterization of the connectivity and tortuosity of defects and their effects on permeabilities of the cementitious composites[D]. Nanjing: Southeast University, 2022.
- [25] LI M Q, CHEN H S, LIN J J, et al. Areal analysis induced bias on interface thickness around ovoidal particles[J]. Constr Build Mater, 2020, 262: 120583.
- [26] 许文祥. 基于非球形粒子随机堆积行为的水泥基复合材料微细观结构与传输性能的理论研究[D]. 南京: 东南大学, 2013.
XU Wenxiang. Transport property and micro/meso-structure of cementitious composites based on non-spherical particle random packing[D]. Nanjing: Southeast University, 2013.
- [27] SAYARI T, HONORIO T, BENBOUDJEMA F, et al. Numerical and experimental investigation of wall effect in concrete[M]//RILEM Bookseries. Cham: Springer International Publishing, 2022: 311–326.
- [28] 周小飞, 郑建军, 周欣竹, 等. 混凝土中椭圆形骨料分布的边界效应[J]. 建材世界, 2012, 33(1): 8–10.
ZHOU Xiaofei, ZHENG Jianjun, ZHOU Xinzhu, et al. World Build Mater, 2012, 33(1): 8–10.
- [29] XU W X, CHEN H S. Microstructural characterization of fresh cement paste via random packing of ellipsoidal cement particles[J]. Mater Charact, 2012, 66: 16–23.
- [30] 郑建军, 周欣竹, 刘彦青. 混凝土骨料二维分布的模拟和应用[J]. 水利学报, 2003, 34(7): 80–84.
ZHENG Jianjun, ZHOU Xinzhu, LIU Yanqing. J Hydraul Eng, 2003, 34(7): 80–84.
- [31] SHARMA M, BISHNOI S. Influence of properties of interfacial transition zone on elastic modulus of concrete: Evidence from micromechanical modelling[J]. Constr Build Mater, 2020, 246: 118381.
- [32] CHEN H L, LI D D, MA X, et al. Mesoscale analysis of rubber particle effect on Young's modulus and creep behaviour of crumb rubber concrete[J]. Int J Mech Mater Des, 2021, 17(3): 659–678.
- [33] WU K, HAN H, LI H X, et al. Experimental study on concurrent factors influencing the ITZ effect on mass transport in concrete[J]. Cem Concr Compos, 2021, 123: 104215.
- [34] LIU C, ZHANG M Z. Multiscale modelling of ionic diffusivity in unsaturated concrete accounting for its hierarchical microstructure[J]. Cem Concr Res, 2022, 156: 106766.
- [35] MORI T, TANAKA K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions[J]. Acta Metall, 1973, 21(5): 571–574.
- [36] BENTZ D P, ARNOLD J, BOISCLAIR M J, et al. Influence of aggregate characteristics on concrete performance[R]. US Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, 2017.

Concrete Wall Effect Based on Packing of Ovoid Aggregates

QING Longbang, LI Wanfei, LI Mingqi

(School of Civil and Transportation Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)

Extended Abstract

Introduction The micro-structure evolution and macro-property development of cement-based composites are affected by the wall effect. For the cement paste, the formation of the interfacial transition zone (ITZ) is related to wall effect, *i.e.*, the lower density of cement particles near aggregate induces the formation of ITZ. In addition, the aggregate density is low near the formwork during the concrete placement and molding, which results in a difference of properties between the wall effect zone and the material interior. Characterizing the influences of aggregate or cement particle shape and size-polydispersity on the thickness of wall effect layer and further on the volume fraction distribution of particles is important for controlling the performance of cement-based composite. Compared with theoretical and numerical simulation methods, the experimental method, such as concrete section cutting is time-consuming and labor-intensive. With the development of computer technology, it provided a technical basis for the study of wall effects in concrete through numerical simulation. In general, cement-based composite can be regarded as a particle packing system. However, most of the existing numerical and theoretical studies employs simple particle, such as circles, ellipses and spheres to model the aggregate or cement particles, which makes it difficult to accurately analyze the role of particle shape and size-polydispersity on the wall effect. It is thus of great significance to construct a complex particle packing system and develop a micro-structure characterization algorithm applicable to the particle packing system to investigate the influence of the particle shape and size-polydispersity on the wall effect.

Methods This work used variable shaped ovoidal particles to construct aggregate and cement particles. A contact detection algorithm for ovoidal particles was proposed based on a geometric potential concept, and ovoidal particle packing systems were generated to simulate the packing state of aggregate and cement particles. Moreover, the cross-section analysis algorithm applicable to the ovoid particle packing system was proposed. Based on the cross-section analysis algorithm and the stereology unbiased estimation method, the influences of particle shape and size-polydispersity on the thickness of the wall effect layer were analyzed and a quantitative relationship between the thickness of the wall effect layer and particle shape and size-polydispersity was established. A prediction formula was proposed to determine the particle volume fraction distribution at different section planes considering the wall effect, and the accuracy of the prediction formula was verified *via* comparing it with the results of the existing studies. Finally, the modulus of elasticity of concrete at different locations was calculated by the quantitative model of wall effect layer thickness and particle volume fraction distribution based on the differential effective medium theory.

Results and discussions For monoshaped-monosized particle packing system, the relationship between volume fraction of particle (V_v) and distance from boundary plane to cross-section plane (h) is obtained. The results show that the V_v – h curves for different shaped particle packing systems are basically similar, indicating that the influence of particle shape on the thickness of wall effect layer T_P can be ignored.

For monoshaped-binarysized particle packing systems, the V_v – h curves move in the direction of increasing distance as the proportion of larger size particles increases. The results indicate that the thickness of wall effect layer T_P enlarges with increasing the proportion of larger size particles. For monoshaped-polysized particle packing system, the thickness of wall effect layer T_P enlarges with the increase of average equivalent diameter of particles.

Based on the obtained results, the prediction formulas are proposed to determine the wall effect layer thickness and particle volume fraction distribution, and the reliability of prediction formulas is verified *via* comparing the predicted data with the results from this work and other publications.

The relationship between elastic modulus E^{MT} and distance h is similar to that between volume fraction of particle (V_v) and distance h . The variation of E^{MT} – h curves can be divided into the increasing and stabilizing parts. The results indicate that the elastic modulus E^{MT} is small near the boundary plane, which is induced at a low particle volume fraction.

Conclusions This work could provide a guidance for the optimization of the microfine structure of concrete and the regulation of macroscopic properties, and the following conclusions were summarized: 1) The influence of particle shape on the wall effect was not dominant; 2) The thickness of wall effect layer T_P increased with enlarging the average diameter of aggregate, and the thickness of wall effect layer T_P decreased with enlarging the aggregate volume fraction; 3) The relationship between elastic modulus E^{MT} and distance h was similar to that between volume fraction of particle (V_v) and distance h .

Keywords ovoid aggregate; wall effect; volume fraction of aggregate; average diameter of aggregate; modulus of elasticity