

自修复水泥基材料微胶囊均匀分布设计策略及修复效率计算

吕 忠¹, 宋向龙¹, 梁 可¹, 袁 静¹, 史梦言¹, 陈惠苏²(1. 安徽工业大学建筑工程学院, 安徽 马鞍山 243032; 2. 东南大学材料科学与工程学院, 重大基础设施工程材料
国家重点实验室, 江苏省土木工程材料重点实验室, 南京 211189)

摘 要: 微胶囊团聚和不均匀分布降低自修复作用的效率。受蜜蜂蜂巢结构形式的启发, 设计一种微胶囊均匀分布的空间结构模型应用于胶囊法自修复水泥基材料。研究了基材内随机产生的裂纹与内置微胶囊相遇的概率关系, 建立了相遇概率的表达式, 分析了微胶囊尺寸、形态和掺量对相遇概率的影响, 采用蒙特卡罗模拟验证了理论模型的准确性。结果表明: 蜂巢式的设计策略能提高微胶囊的分布均匀性, 增加胶囊的破裂概率, 提升自修复效率; 相较于球形胶囊, 球柱形微胶囊具有更高的破裂概率和修复潜力。

关键词: 自修复; 微胶囊团聚; 修复效率; 水泥基材料; 蒙特卡罗模拟

中图分类号: TU528.01 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2025)11-3114-13

网络出版时间: 2025-09-29



“自修复”常用于描述生物体或植物在受损后实现结构和功能恢复的内在能力。在材料研究领域, 其也用于描述材料从物理损伤中恢复的能力。研究人员基于仿生学理论, 尝试开发具有自修复能力的智能混凝土, 可自主响应和及时修复基体中出现的损伤^[1-2]。自 White 等^[3]提出具有自主修复裂缝能力的微胶囊自修复聚合物材料以来, 微胶囊自修复系统以其快速反应、快速修复、有效恢复材料的强度和刚度等特点引起了广泛关注^[4-5]。因此, 使用微胶囊自修复系统进行裂缝自主修复正在成为恢复受损结构的耐久性和强度的一种可行的解决方案^[6]。

微胶囊自修复系统的核心在于微胶囊设计和制备, 一般需要满足 3 个基本要求: 稳定性、灵敏性和可修复性^[7]。“稳定性”指的是微胶囊能稳定存在于基体中, 在发挥作用前不退化或变性; “灵敏性”指的是当自愈材料劣化或开裂时, 微胶囊必须灵敏地作出反应, 及时触发微胶囊以及能发挥修复作用; “可修复性”指的是在自愈材料出现损伤或裂纹后, 裂缝能及时被修复。水泥基材料的微胶囊制备方面,

有多种修复剂如硫铝酸钙水泥(CSA)、磷酸盐、甲苯二异氰酸酯(TDI)等被壁材如聚苯乙烯树脂、聚丙烯酰胺(PAM)、石蜡等封装成尺寸在 200~800 μm 的微胶囊, 用于自修复水泥基材料微胶囊的修复性能(如裂缝宽度、抗压强度、渗透性能等)研究^[8-10]。微胶囊形貌方面, 主要包括球形、圆柱形、棒状(空心管/纤维)和无定形颗粒, 其中球形和球柱形最为常见^[11]。Mookhoek 等^[12]和 Bon 等^[13]研究了棒状微胶囊自修复系统中修复剂的释放情况, 并与常见的球形胶囊进行了比较。与球形微胶囊相比, 大长径比棒状胶囊如空心纤维管等细长胶囊能显著提高基体材料的力学性能, 并表现出更高的修复效率。Ghosh 等^[14]认为球形胶囊便于修复剂可控、可预测的释放, 同时减少修复剂释放后由于空隙的存在而导致的应力集中。Van der Zwaag 等^[15]则认为球形胶囊在自修复系统中的唯一缺点是无法将大量修复剂远距离输送到受损区域, 而胶囊的长径比与所需胶囊掺入数量之间存在相关性。即, 长径比增加会导致所需掺入胶囊数量减少, 进而降低裂缝

收稿日期: 2025-05-06。 修订日期: 2025-06-16。

基金项目: 安徽省高校科研项目(2024AH040029); 国家重点研发计划(2021YFB3802005); 高校优秀拔尖人才培养资助项目(gxyqZD2021106); 安徽省自然科学基金项目(2008085ME164)。

第一作者: 吕 忠(1982), 男, 博士, 教授。

通信作者: 陈惠苏(1973), 男, 博士, 教授。

Received date: 2025-05-06. Revised date: 2025-06-16.

First author: LYU Zhong (1982-), male, Ph.D., Professor.

E-mail: zhonglv1982@163.com

Correspondent author: CHEN Huisu (1973-), male, Ph.D., Professor.

E-mail: chenhs@seu.edu.cn

遇到胶囊概率。可见, 柱形胶囊被裂缝激发的概率并不一定大于球形胶囊, 胶囊本身的几何参数也必须考虑在内。

从微胶囊的角度来看修复效率主要取决于 5 个主要因素: 胶囊的设计和制备、形状、掺量、尺寸和分布特征^[16-17]。大量实验证据表明^[18], 微胶囊的形状、尺寸和掺量会对自修复材料基体的性能和效率产生显著影响。然而, 由于必须考虑多种因素, 在实验设计中确定自修复系统所需的最佳尺寸和掺量具有很大的挑战性^[16]。由于实验环境、设备等因素的影响, 预计实验结果与预期修复效果之间会有较大的偏差。此外, 通过实验研究需要投入更多的时间和精力, 材料的生产和测试也成本高昂。虽然已有不少探索性实验来验证理论模型, 但最终的结果恰恰证实了最初的预期, 即实验结果与模型结果之间存在偏差^[19]。Lv 等^[20]提出了胶囊形状影响自愈效率的理论模型, 对比了不同形状胶囊对胶囊破裂概率的影响, 发现圆柱形胶囊的相遇概率并不总是高于球形胶囊, 与圆柱形胶囊的长径比有关。Papaioannou 等^[21]研究了大尺寸球形胶囊修复水泥裂缝的效果, 使用计算机程序模拟胶囊大小和掺量对不同裂缝宽度修复的影响, 其目的是研究胶囊如何在水泥基体中分布、如何影响水泥基体的性能以及如何实现裂缝修复。模拟结果表明, 每个样品中 10% 掺量的胶囊就足以修复宽度超过 500 μm 的裂缝。鉴于上述的困难因素, 选择理论模型和数值模拟研究作为某些替代实验变得越来越普遍。当然, 在实际应用理论模型之前, 必须验证所提出理论模型的可靠性。研究人员已开始利用计算机模拟技术验证所建立微胶囊自修复材料的数学模型^[21-25]。因此, 通过模拟和分析裂纹遇到微胶囊的多种工况, 就有可能明晰微胶囊自修复复合材料在多种条件下的物理性能。

内置在水泥基体内的微胶囊分布特征会影响基体所需掺入的微胶囊数量, 进而影响整体的自修复效率。自修复系统本质上是一种被动系统, 在出现裂缝时会自动启动修复过程。系统发挥效果的关键因素之一是微胶囊在基体中合理的分布^[26]。当前, 一个主要障碍是胶囊在基体中的聚集和不均匀分布, 严重影响自修复水泥基材料微胶囊的修复效率。初步实验表明, 当使用干燥的微胶囊时, 胶囊的聚集会增加, 导致胶囊在整个基体中分散不均匀^[27]。Milla 等^[28]提到微胶囊的不均匀分布导致骨料颗粒与水泥浆之间的局部界面薄弱, 从而在荷载作用

下诱发裂缝过早扩展。这种不均匀分布降低了胶囊的修复潜力, 并对试件早期强度等性能产生不利影响^[25, 29]。此外, 胶囊在基体中的不均匀分布还会导致裂缝遇到的胶囊数量减少。所以, 在设计基于胶囊的自修复复合材料时, 必须确保胶囊在基体中的均匀分布, 以最大限度地提高微胶囊破裂的概率和自修复能力。

在前期二维球形微胶囊自修复复合材料的概率模型^[30]的基础上, 为了避免微胶囊在基体内聚集及分布不均匀, 受蜜蜂蜂巢结构形式的启发, 本研究计划设计一种蜂窝状的水泥基体材料结构来内置微胶囊, 基体由若干小单元体随机组合而成, 部分小单元体内随机分散着微胶囊, 实现微胶囊在自修复水泥基材料中均匀分布的设计策略。进而, 探讨水泥基材料基体内部出现的平面状裂缝与内置微胶囊之间的概率关系, 建立表达此关系的概率模型, 分析微胶囊尺寸和掺量对相遇概率的影响, 对比不同形状的微胶囊修复潜力, 利用蒙特卡罗模拟验证模型结果的准确性。

1 微胶囊均匀分布设计策略

1.1 裂纹模式

由于受到外部荷载和环境因素的作用, 水泥基材料在服役过程中易于开裂, 某些裂缝在整个基体中呈平面或类平面状。而类似平行平面状裂纹是常见的裂缝模式, 其通常与试件受到弯曲荷载有关。图 1a 所示为间距相同的平行平面状裂缝, 其通常为梁或板挠曲开裂的特征^[31]。图 1b 显示了混凝土构件中常见的平行平面状裂缝模式, 其产生是由于纤维混凝土和钢筋混凝土构件受到拉力所致^[32]。因此, 将基材内的裂缝模式视为平面状裂缝模式, 忽略裂缝的宽度。

1.2 微胶囊均匀分布模型

胶囊的分布显然会影响复合材料的性能和自修复效率, 在设计自修复材料时必须将其考虑在内。如图 2a 所示, 在基于微胶囊技术的水泥基材料微生物自修复系统中, 有些微胶囊在裂缝出现时破裂, 表明所设计的触发系统确实起作用, 而另一些微胶囊则发生团聚^[33]。如图 2b 所示, 自修复微胶囊复合材料的场发射扫描电子显微镜图像显示了 2 个截然不同的区域: 微胶囊团聚的区域和微胶囊单独分布且未团聚的区域^[34]。然而, 随机均匀分布的微胶囊能提高微胶囊的自修复效率。使用微计算机断层扫描技术对含有微胶囊的试样进行扫描, 然后将原

始数据载入图像处理系统并进行三维重建, 得到微胶囊的分布三维图, 如图 2c 所示。微胶囊的三维重构显示它们均匀地分布在水泥基体中, 这为裂纹触发微胶囊和发挥自修复作用提供了有利条件。基于

图 2 所示微胶囊三维重建和蜜蜂蜂巢结构形式的启发, 将水泥基材料基体视为由多个小立方体(单元体)构成的蜂巢模型, 单元体(蜂巢)内随机分散一些含有修复剂的微胶囊, 如图 3 所示。

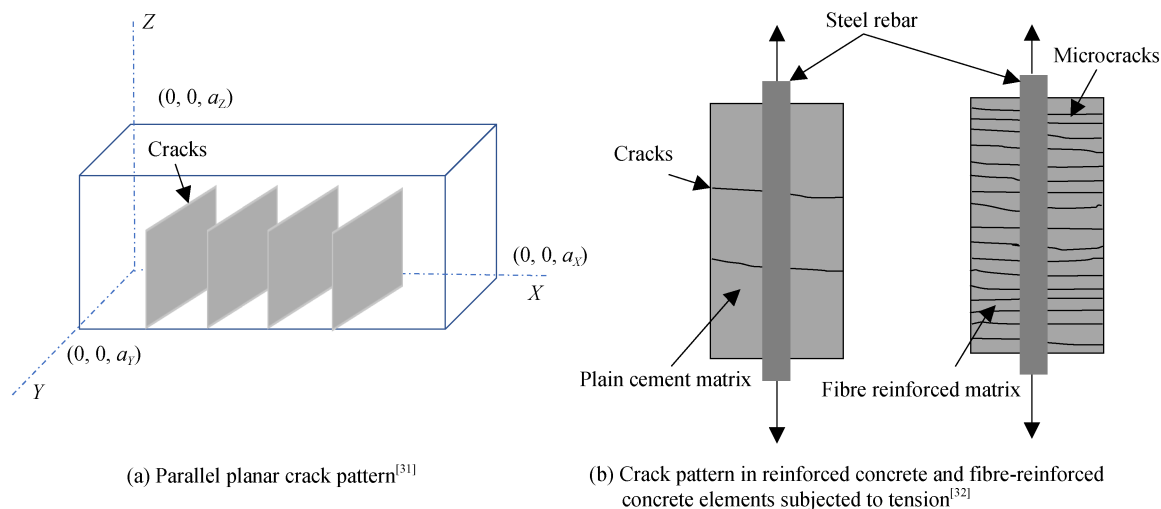


图 1 基材中裂纹模式

Fig. 1 Schematic of a representative domain for crack patterns

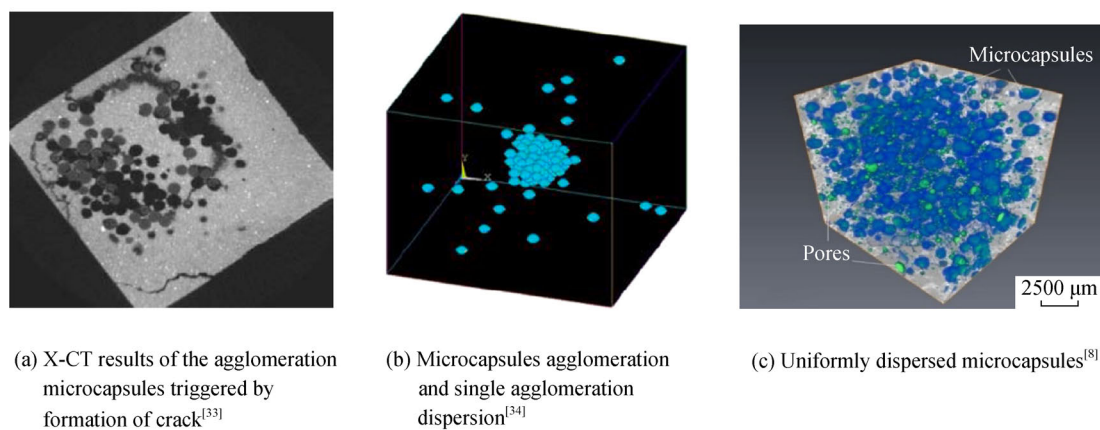


图 2 自修复复合材料中的微胶囊

Fig. 2 Microcapsules distributed in self-healing composite material

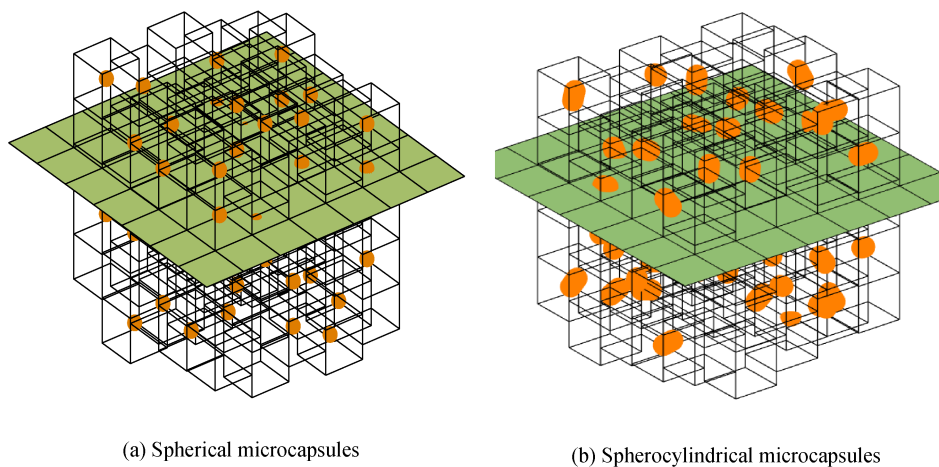


图 3 微胶囊随机均匀分布策略

Fig. 3 A strategy for random and uniform distribution of microcapsules

图 3a 和图 3b 分别展示了自修复基体中随机分散球形或球柱形微胶囊的情形。蜂窝状复合材料结构是由多个小方块(单元体)组成的三维结构,一定数量的球形或球柱形微胶囊随机分散在小单元体中,确保微胶囊均匀分布,避免微胶囊的聚集。通常,采用分散系数来表达微胶囊在基体中的分散程度^[21]。史梦言^[35]研究表明,同等掺量情形下,球形胶囊的分散性系数要略高于柱形微胶囊。当材料内出现随机平面状裂缝时,裂缝会遇到微胶囊,引起微胶囊破裂,释放出修复剂来修复裂缝。所以,裂纹遇到微胶囊是自修复发挥作用的必要条件。下一步,针对不同形状的微胶囊,建立概率解析模型来表达平面状裂缝与随机分散的微胶囊的相遇概率,分析胶囊掺量、尺寸和形貌对基于相遇概率的自修复效率的影响。

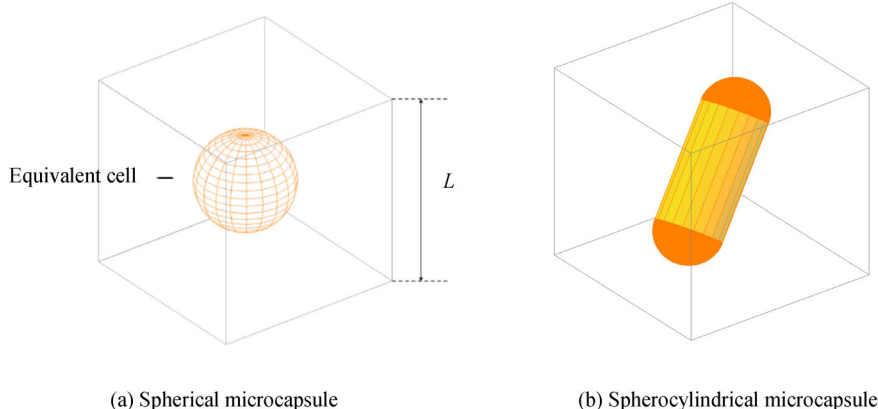


图 4 含有微胶囊的单元体

Fig. 4 A single cube containing a microcapsule

1.3 微胶囊-裂缝相遇概率模型

为了简化计算过程,相遇概率模型涉及 4 个主要参数:微胶囊的体积分数、数量和单个微胶囊的粒径、间距。微胶囊的数量通常可用微胶囊的总质量除以单个微胶囊的质量来近似表示^[36]。同时,研究表明微胶囊的粒径从纳米到毫米不等,典型的粒径一般在几微米到 1 mm 之间^[16, 37]。由于胶囊的大小分布不均,且分散在基质中,难以获得胶囊之间的平均间距。尽管试验研究中掺入微胶囊有多种尺寸,但本研究选择微胶囊的平均粒径作为建模参数。因此,假定微胶囊的平均直径 D ,以便对自修复水泥基材料及其在不同条件下的修复效率进行简单、易懂和实用的评估。如图 3a 和图 3b 所示,蜂窝模型中的单元体随机错位,某些微胶囊被随机内置于单元体内。这种不规则性和随机性决定随机的平面状裂纹与微胶囊相交的概率。这是因为,对于单

图 4a 和图 4b 分别为单元体含有 1 个球形和球柱形微胶囊的示意图,微胶囊的中心与单元体的中心重合。设定自修复水泥基材料是由多个随机分布的尺寸为 L 的小单元体构成,则 L 可由计算取样区域的总体积得出,如式(1)和式(2)所示。单元体的不规则且紧凑排列意味着每列中的单元体在 $[0, L]$ 范围内随机错位,这种不规则性增加微胶囊的分散性。根据图 4a 和图 4b 的特征,可构建出不同形状胶囊的自修复水泥基复合材料,正如图 3a 和图 3b 所示。

$$V_t = N^3 \cdot L^3 \quad (1)$$

$$L = \sqrt[3]{\frac{V_t}{N^3}} \quad (2)$$

其中: N^3 为小单元体的数量; V_t 为试件取样区域的总体积; L 为单元体的边长。

元体内每个微胶囊而言,其相交概率是唯一的,如图 5(球形微胶囊)和图 6(球柱形微胶囊)所示。本节将建立平面状裂缝与随机分布在蜂窝模型单元中的球形或球柱形微胶囊相交概率模型。

1) 球形微胶囊情形

如图 5 所示,随机出现的平面状裂缝穿过含有微胶囊的单元体时只有 2 种可能的结果:相遇(平面状裂缝 2)或不相遇(平面状裂缝 1)。如果裂缝与微胶囊中心的距离小于或等于球形微胶囊的半径,则会出现相遇,反之则不然。当裂纹位置满足 $y \in [L/2 - D/2, L/2 + D/2]$ (其中, D 为球形胶囊直径)时,裂纹与球形微胶囊会相遇。由于 $y \in [0, L]$, 裂纹遇到单个球形微胶囊的相遇概率为:

$$p_1 = \frac{D}{L} \quad (3)$$

当基材内出现平面状裂纹时,裂纹遇到球形微

胶囊很大程度上取决于裂纹模式而不是裂纹宽度，后者在平面状裂纹开始时可以忽略不计。假设 n 个球形微胶囊随机分散于 N^3 ($n \ll N^3$) 个小单元体内，满足单元体中心和球形微胶囊中心重合，则每个单元体内有一个微胶囊的概率为式(4)。

$$p_2 = \frac{n}{N^3} \quad (4)$$

式中： N^3 为小单元体的数量； n 为基材随机分散的微胶囊数量。于是，随机出现的平面状裂缝遇到单个球形微囊的概率为：

$$p_3 = \frac{D}{L} \cdot \frac{n}{N^3} \quad (5)$$

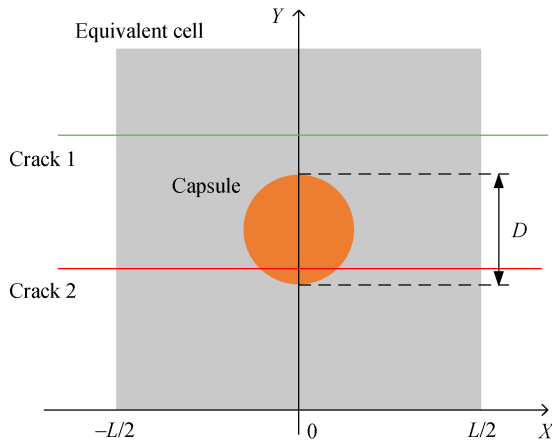
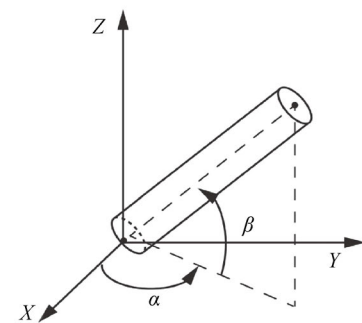


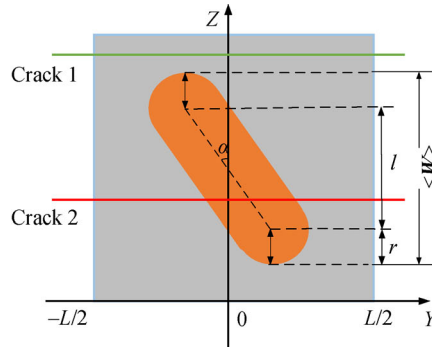
图5 平面状裂缝与球形微胶囊的相遇概率关系

Fig. 5 Hitting probabilistic relationship between a planar crack and a spherical microcapsule

应用初等概率论，随机平面状裂纹出现在试样取样区域并与球形微胶囊相遇的事件符合伯努利试验的定义^[38]。因此，基于伯努利试验与二项分布的关系，图 3a 中随机出现的平面状裂纹遇到 m 个球形微胶囊的几何概率可用二项分布表达。从而，平面状裂缝正好与 m 个球形微胶囊相遇的概率 $P(m)$ 为：



(a) Orientation of a spherocylindrical microcapsule in three-dimensional matrix



(b) Crack intersects a microcapsule in an equivalent cell

图6 平面裂缝与球柱形微囊相交

Fig. 6 A planar crack intersects a spherocylindrical microcapsule

$$P(m) = \frac{N^3!}{(N^3 - m)!m!} (p_3)^m (1 - p_3)^{N^3 - m} = \frac{N^3!}{(N^3 - m)!m!} \left(\frac{D}{L} \cdot \frac{n}{N^3} \right)^m \left(1 - \frac{D}{L} \cdot \frac{n}{N^3} \right)^{N^3 - m}, m < N^3 \quad (6)$$

2) 球柱形微胶囊情形

为了评估胶囊法自修复水泥基材料的修复效率，Fang 等^[39]研究了球柱形胶囊的壳厚度对自修复效率的影响(球柱形为圆柱体的两端各有 1 个半球冠的组合体)，计算了平面状裂缝与单个球柱形微胶囊相遇的概率。本节将按照推导球形微胶囊相遇概率的方法和步骤，推导出平面状裂缝遇到随机分散分布的球柱形微胶囊的概率模型。如图 6 所示，平面状裂缝随机穿过含有球柱形微胶囊的单元体，只有 2 种可能的结果：相遇(平面状裂缝 2)或不相遇(平面状裂缝 1)。相较于球形微胶囊的相遇概率，裂纹遇到球柱形微胶囊的相遇概率的计算稍显复杂。不失一般性，如图 6 所示，球柱形微胶囊在基体内的方向可表示为 (α, β) 。先将微囊投影到 YZ 平面上，然后再投影到 Y 轴上。类似于式(3)的计算过程，对于每个球柱形微胶囊，只有当裂缝位置满足 $y \in [L/2 - \langle w \rangle/2, L/2 + \langle w \rangle/2]$ 时，二者才会相遇。由于 $y \in [0, L]$ ，平面状裂缝遇到单个球柱形微胶囊的相交概率为式(7)。

$$p_4 = \frac{\langle w \rangle}{L} \quad (7)$$

式中： $\langle w \rangle$ 是球柱形微胶囊所有可能取向 ($\alpha \in [0, 2\pi]$, $\beta \in [-\pi/2, \pi/2]$) 的平均值。如果 1 个平面状裂缝遇到一个球柱微胶囊，那么从微胶囊中心到平面状裂缝的距离满足小于或等于球柱微胶囊尖端半径的投影与柱体长度一半之和(其中球柱微胶囊的柱体长度为 l ，尖端半径为 r)。即， $\langle w \rangle$ 须满足^[39]：

$$\langle w \rangle = l \times \varphi + 2r \quad (8)$$

$$\varphi = \frac{\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{2\pi} |\cos \alpha \cdot \cos \beta| d\alpha d\beta}{2\pi^2} = \frac{4}{\pi^2} \approx 0.4053 \quad (9)$$

如图 3b 所示,如果在基材内随机分散 n 个球柱形微胶囊,则每个单元体出现球柱形微胶囊的概率为:

$$p_5 = \frac{n}{N^3} \quad (10)$$

从而,随机平面状裂缝遇到单个球柱形微胶囊的概率为:

$$p_6 = \frac{\langle w \rangle}{L} \cdot \frac{n}{N^3} \quad (11)$$

与球形微胶囊的情形类似,每次随机平面状裂缝遇到单个球柱形微胶囊的事件具有独立性。因此,图 3b 中随机出现的平面状裂缝遇到 m 个球柱形微胶囊的概率事件符合伯努利试验的定义。于是,平面状裂缝正好与 m 个球柱形微胶囊相遇的概率 $P_1(m)$ 为:

$$P_1(m) = \frac{N^3!}{(N^3 - m)!m!} (p_6)^m (1 - p_6)^{N^3 - m} = \frac{N^3!}{(N^3 - m)!m!} \left(\frac{\langle w \rangle}{L} \cdot \frac{n}{N^3} \right)^m \left(1 - \frac{\langle w \rangle}{L} \cdot \frac{n}{N^3} \right)^{N^3 - m}, m < N^3 \quad (12)$$

式(6)和式(12)分别解析地表达了在微胶囊自修复水泥基材料蜂巢式设计策略下平面状裂缝遇到球形微胶囊和球柱形微胶囊的相遇概率。在单元体数量(即基体体量) N^3 和微胶囊数量(即掺量) m 的给定条件下,平面状裂缝遇到微胶囊的相遇概率主要取决于单元体的尺寸 L ,胶囊的尺寸和形状参数(即球形胶囊的直径 D ,球柱形胶囊的长度 l 和半球半径 r)。需要指出的是,除了球形和球柱形微胶囊之外,微胶囊均匀分布策略以及平面状裂缝遇到微胶囊的相遇概率模型的建模过程同样适用其他形状微胶囊。

2 蒙特卡罗模拟验证

蒙特卡罗模拟通常用于开发相应的计算机算法程序,以分析模型参数的随机行为。根据大数定律,如果数值模拟次数足够多,模拟结果有望收敛到理想值。此种情况下,蒙特卡罗方法(大量模拟)模拟的结果将是一个提供了每种可能结果的概率分布信息。因此,如果对不同形状的微胶囊与裂缝相遇的各种情况进行模拟和分析,就有可能确定微胶囊自

修复水泥复合材料在多种不同条件下的特性。针对基体中随机产生的平面状裂纹,本节将模拟和统计裂缝与微胶囊相遇的次数,以验证 1.3 节提出理论概率的结果。具体来说,目的是验证胶囊的掺量、尺寸等参数对随机平面状裂缝与球形/球柱形微胶囊相交概率的准确性和可靠性。为此,将针对理论模型[即式(6)和式(12)]的计算结果,采用蒙特卡罗模拟法模拟随机出现的平面状裂纹遇到随机分散微胶囊的概率。

2.1 算法描述

以水泥基体中出现的平面状裂纹为例,验证所提出理论模型计算结果的准确性,具体数值算法流程如图 7 所示。首先定义微胶囊和基体的相关几何参数,然后生成采样区域(包括球形、球柱形微胶囊的掺量和尺寸,以及平面状裂纹的几何信息),重构微胶囊-裂缝模型,如图 3 所示。最后,执行判断以确定微胶囊是否与平面状裂缝相遇,并统计和记录相关数据。基本假定为: 1) n ($n < N^3$) 微胶囊随机分布在 N^3 个单元体内; 2) 微胶囊的中心与单元体的中心重合; 3) 球柱形微胶囊的取向是随机的。

从图 7 可知,在 1 次执行中,如果 1 个平面状裂缝正好遇到 m 个微胶囊,则 $K(m) = 1$, 否则为 0。若程序执行 K 次,则平面状裂缝遇到 m 个微胶囊的次数为 $K(m)$,则模拟中平面状裂缝正好遇到 m 个微胶囊的相遇概率定义为式(13)。

$$P_2(m) = \lim_{K \rightarrow \infty} \frac{K(m)}{K} \quad (13)$$

式中: $K(m)$ 表示执行次数 K 次后平面状裂缝正好遇到 m 个微胶囊的次数。

2.2 结果与讨论

1) 球形微胶囊情形

取 $K=1000$ 来计算模拟的相遇概率,式(6)得出的理论概率值 $P(m)$ 可由计算机编程模拟独立获得的结果进行比较验证。表 1 列出了 $N^3 = 512$ 、 $L = 1$ 和 $m = 15$ 时,球形微胶囊模型的理论相遇概率值。球形微胶囊模型中,选择参数 $N = 8$ 、 $D/L = 0.3$ 和 $n = 410$,如表 2 所示。

如图 8 所示,橙色条柱表示平面状裂缝每次遇到的胶囊数量为 m 个且程序执行 K 次后的 $K(m)$ 值,曲线表示给定变量值(表 2 的参数值)的理论值。模拟值在 $m = 14$ 时达到最大值。当 $m = 15$ 时,理论值达到最大值。因此,根据式(13)计算出的模拟概率值 $P_2(14) = 0.1160$,根据式(6)计算出理论值 $P(15) = 0.1163$ 。图 8 表明球形微胶囊自修复模型中

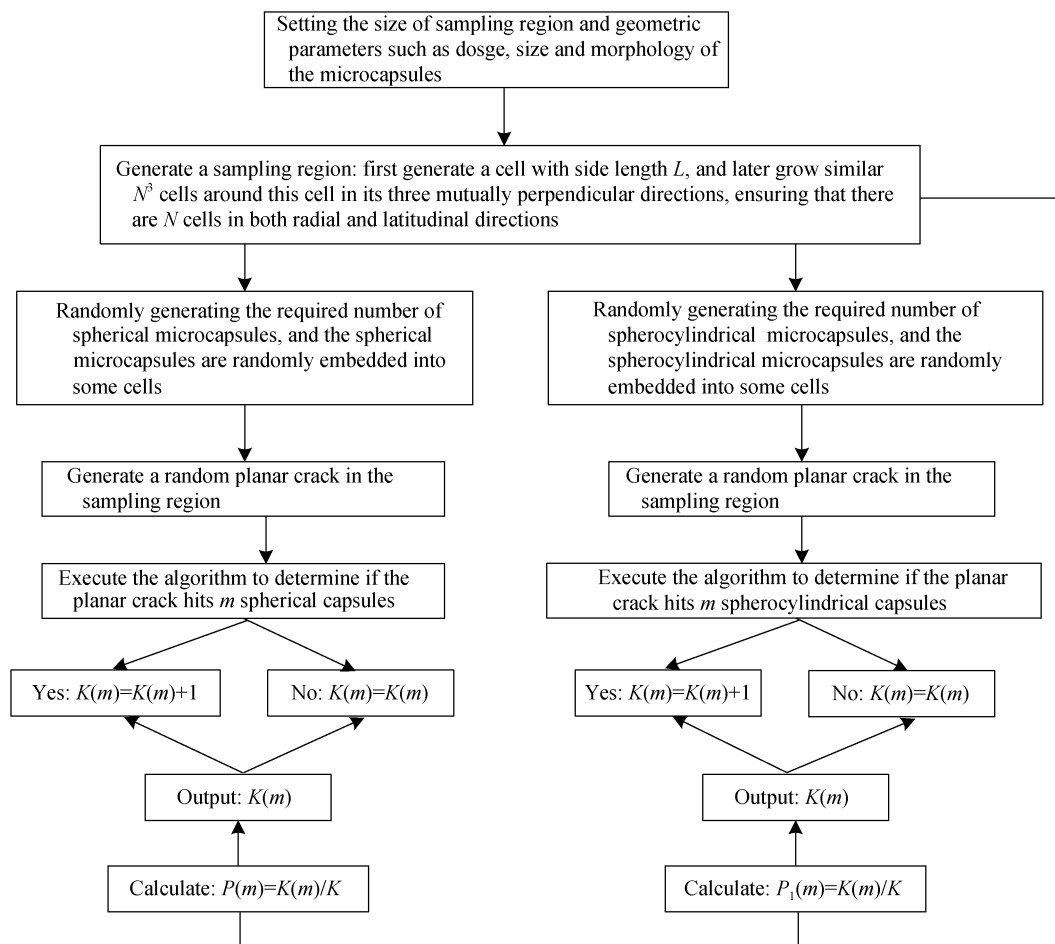


图 7 模拟算法流程图

Fig. 7 Simulation algorithm flowchart

表 1 球形微胶囊情形下理论相遇概率值($N^3=512, L=1, m=15$)Table 1 Theoretical probability table for the spherical model with $N^3=512, L=1, m=15$

n	$P(m)$				
	$D=0.1$	$D=0.3$	$D=0.5$	$D=0.7$	$D=0.9$
512	0.000 9	0.058 8	0.000 0	0.000 0	0.000 0
450	0.000 3	0.101 2	0.000 3	0.000 0	0.000 0
400	0.000 1	0.117 0	0.003 5	0.000 0	0.000 0
350	0.000 0	0.099 4	0.020 4	0.000 0	0.000 0
300	0.000 0	0.058 0	0.067 2	0.001 5	0.000 0
250	0.000 0	0.020 8	0.115 1	0.020 4	0.000 3
200	0.000 0	0.003 8	0.087 0	0.090 8	0.014 9

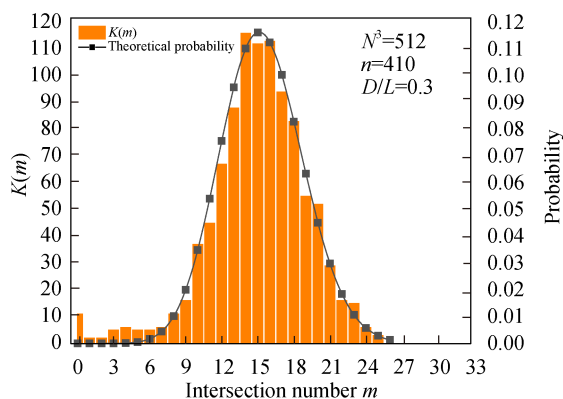
n is the number of spherical microcapsules; D is the diameter of a microcapsule; $P(m)$ is the probability of a planar crack intersecting exactly m spherical microcapsules; N^3 is the number of cubic cells; L is the edge length of a cubic cell; m is the number of spherical microcapsules intersected by a planar crack.

表 2 球形微胶囊自修复模型材料的几何参数

Table 2 Geometric parameters of spherical microencapsulated self-healing model materials

N^3	L	D	n	m	$P(m)$
512	1	0.1	410	15	0.0001
		0.3	410		0.1163
		0.5	410		0.0022
		0.7	410		0.0000
		0.9	410		0.0000

裂缝遇到特定数目的理论概率值与模拟值之间一致性较好。



$K(m)$ is the number of times for a planar crack intersecting exactly m microcapsules after K executions.

图 8 球形微囊自修复模型中相遇概率的模拟结果与理论值
Fig. 8 Comparison of simulation results with theoretical values for the intersection probability of the spherical microcapsule model

在图 9 中, 垂直虚线代表模拟结果, 表示经过 1000 次模拟后球形微胶囊相交的平均次数。同时,

曲线表示在给定的 N^3 、 n 和 D/L 条件下, 裂缝与 m 个球形微胶囊相遇的理论概率。可以看出, 所有曲线都有 1 个峰值点, 而二项分布图中的峰值更接近概率论的期望值。对结果的比较分析表明, 垂直虚线与曲线峰值点的结果接近。因此, 理论模型的准确性可以得到很好的验证。如图 9a 所示, 随着球形微胶囊粒径的增大, 微胶囊与裂纹的相遇数 m 也随之增大。从图 9b 可以看出, 掺入的微胶囊数量也呈现此种趋势。式(6)量化地表达了掺入球形微胶囊的数量和尺寸对相遇概率的影响。

如果给定球形微胶囊掺量、平面状裂缝需要固定数量的球形微胶囊破裂且释放修复剂才能修复, 则可利用相遇概率来确定胶囊的最佳尺寸。表 2 列出了自修复模型系统中球形微胶囊的几何参数且计算了随机出现的裂缝遇到 15 个球形微胶囊的理论概率值。由表 2 可知, 当球形微胶囊的直径为 0.3 时, 理论概率值达到最大值。这与图 9a 中红色曲线的趋势一致, 即当遇到胶囊数量为 14~16 个时, 最大概率值出现在 $D/L = 0.3$ 的概率曲线上。在这种情

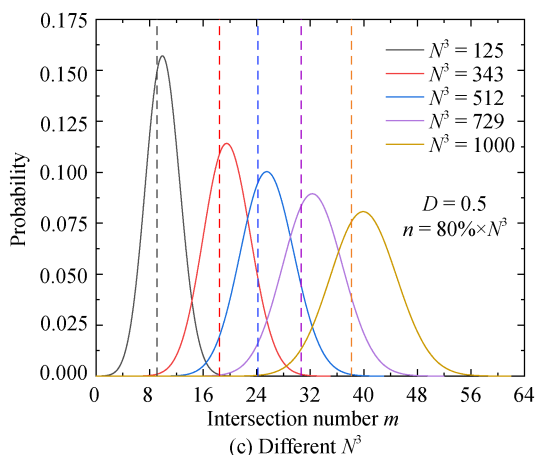
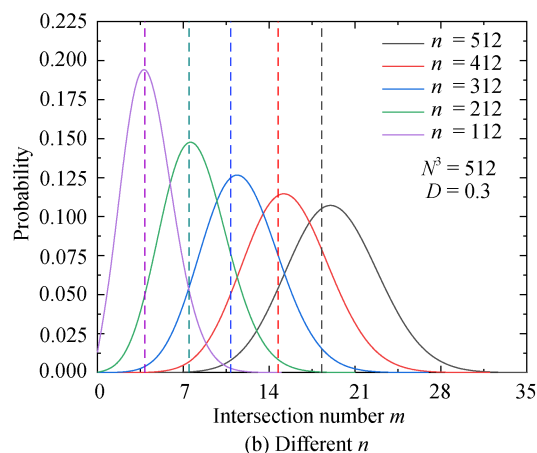
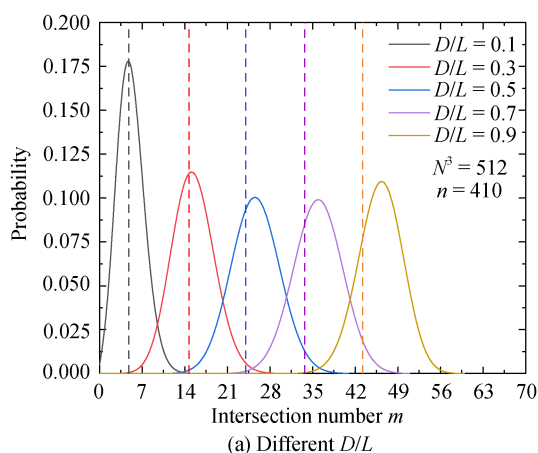


图 9 球形微胶囊的平均相遇数量(垂直虚线)与理论结果比较

Fig. 9 Comparison of the average number of intersections (vertical lines) of spherical microcapsules derived from simulations with the theoretical formula results

况下, 首选直径为 0.3 的球形微胶囊。同样, 如果已知要掺入固定大小的球形微胶囊, 且平面状裂纹修复需要固定数量的微胶囊, 则可利用最大概率值来确定掺入微胶囊的适当掺量, 如图 9b 所示。此外, 如图 9c 所示, 随着试样体积 $(NL)^3$ 的增加, 微胶囊破裂的次数也会增加, 但最大相遇概率会降低。

2) 球柱形微胶囊情形

设置执行 $K=1000$ 次来计算模拟相遇概率值, 并验证式(12)的理论概率值 $P_1(m)$ 。表 3 列出了 $N^3=512$ 、 $L=1$ 和 $m=15$ 时平面状裂纹遇到球柱形微胶囊的理论概率值。表 4 列出了球柱形微胶囊的几何参数。

表 3 平面状裂纹遇到球柱形微囊的理论概率值($N^3=512, L=1, m=15$)

Table 3 Theoretical probability table for the spherocylindrical model with $N^3=512, L=1, m=15$

n	$P_1(m)$				
	$l=0.117\ 6$	$l=0.353\ 2$	$l=0.588\ 7$	$l=0.501\ 5$	$l=0.166\ 8$
	$r=0.032\ 2$	$r=0.096\ 6$	$r=0.161\ 0$	$r=0.259\ 6$	$r=0.411\ 9$
512	0.0026	0.0239	0	0	0
450	0.0008	0.0640	0	0	0
400	0.0002	0.1020	0.0004	0	0
350	0.0001	0.1166	0.0047	0	0
300	0	0.0895	0.0299	0.0008	0
250	0	0.0414	0.0904	0.0143	0.0004
200	0	0.0096	0.1120	0.0803	0.0167

n is the number of spherical microcapsules; l is the column length of a spherocylindrical microcapsule; r is the radius of a spherocylindrical microcapsule; $P_1(m)$ is the probability of a planar crack intersecting exactly m spherocylindrical microcapsules; N^3 is the number of cubic cells; L is the edge length of a cubic cell; m is the number of spherocylindrical microcapsules intersected by a planar crack.

表 4 球柱形微胶囊自修复模型材料的几何参数

Table 4 Geometric parameters of spherocylindrical microencapsulated self-healing model materials

N^3	L	$l+2r$	n	m	$P_1(m)$
512	1	0.1176+2×0.0322	410	17	0.000 00
		0.3533+2×0.0966	410		0.112 00
		0.5888+2×0.1610	410		0.001 20
		0.5015+2×0.2597	410		0.000 00
		0.1668+2×0.4119	410		0.000 00

在球柱形微胶囊自修复模型中设置参数 $N=8$ 、 $l=0.353\ 3$ 、 $d=0.193\ 2$ 和 $n=410$ 。如图 10 所示, 当 $m=16$ 时, 模拟值达到最大值。而理论值在 $m=17$ 时达到最大值。因此, 根据式(13)计算出的模拟概率 $P_2(16)=0.108\ 0$, 理论概率值 $P_1(17)=0.112\ 0$ 。图 10 显示了球柱形微胶囊自修复模型中裂缝遇到特定数目的理论概率值与模拟值之间一致性较好。

如图 11 所示, 垂直虚线代表迭代 1000 次后平面状裂缝遇到球柱形微胶囊的平均数量的数模拟值。曲线表示在给定 N 、 n 和 $l+2r$ 的条件下, 裂缝与 m 个球柱形微胶囊相遇的理论概率。比较分析显示, 垂直虚线与曲线的峰值点非常接近, 此为理论模型的准确性提供了很高的可信度。图 11a 说明随着球柱形微胶囊粒径的增大, 平面状裂纹遇到微胶囊的数量 m 数也随之增加; 当相遇概率达到最高值时, 数值 m 达到最大值。图 11b 表明微胶

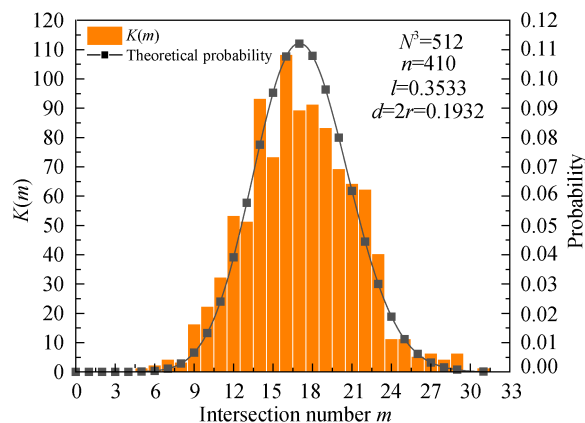


图 10 球柱形微胶囊模型相遇概率的模拟结果与理论值的比较

Fig. 10 Comparison of simulation results with theoretical values for the intersection probability of the spherocylindrical microcapsule model

囊掺入量也遵循这一趋势。式(12)量化地表达了掺入球柱形微胶囊的大小和用量对裂缝遇到微胶囊的

概率的影响。

如表 1 和表 3 所示, 2 种不同形状微胶囊自修复模型中掺入的微胶囊具有相同体积分数(即数量)。表 4 列出了自修复模型系统中球柱形微胶囊的几何参数。特别地, 表 4 计算出了随机出现的裂缝正好遇到 17 个球柱形微胶囊的理论概率。从表 4 中可到, 当球柱形胶囊的长度为 $0.3533+2\times 0.0966$ 时, 理论概率值达到最大值。而由图 11a 可观察到, 最大概率值出现在 $l=0.3533$ 、 $r=0.0966$ 且横坐标数值在 16 和 18 之间的概率曲线(红色曲线)。在确定胶囊掺量的前提下, 为了提高掺入胶囊的破裂概率, 自修复材料设计中建议采用胶囊长度为 $0.3533+2\times 0.0966$ 的球柱形微胶囊。同样, 对于给定尺寸的

球柱形微胶囊, 如果平面状裂缝需要固定数量的球柱形微胶囊才能修复, 则可以利用相遇概率来确定基体掺入的球柱形微胶囊的具体掺量, 如图 11b 所示。此外, 如图 11c 所示, 随着取样体积 $(N\times L)^3$ 的增加, 微囊破裂的数量也会增加, 但最大相交概率却会下降。

从表 1 和表 3 可知, 对于不同形状和相同掺量的微胶囊自修复系统, 当最大理论相遇概率值大致相等时, 平面状裂缝遇到球形微胶囊数目为 15, 而平面状裂缝遇到球柱形微胶囊数目为 17。因此, 当掺入相同掺量的微胶囊时, 上述比较说明从胶囊破裂数目角度来看随机出现的平面状裂缝遇到的球柱形微胶囊数量要多于球形微胶囊数量。

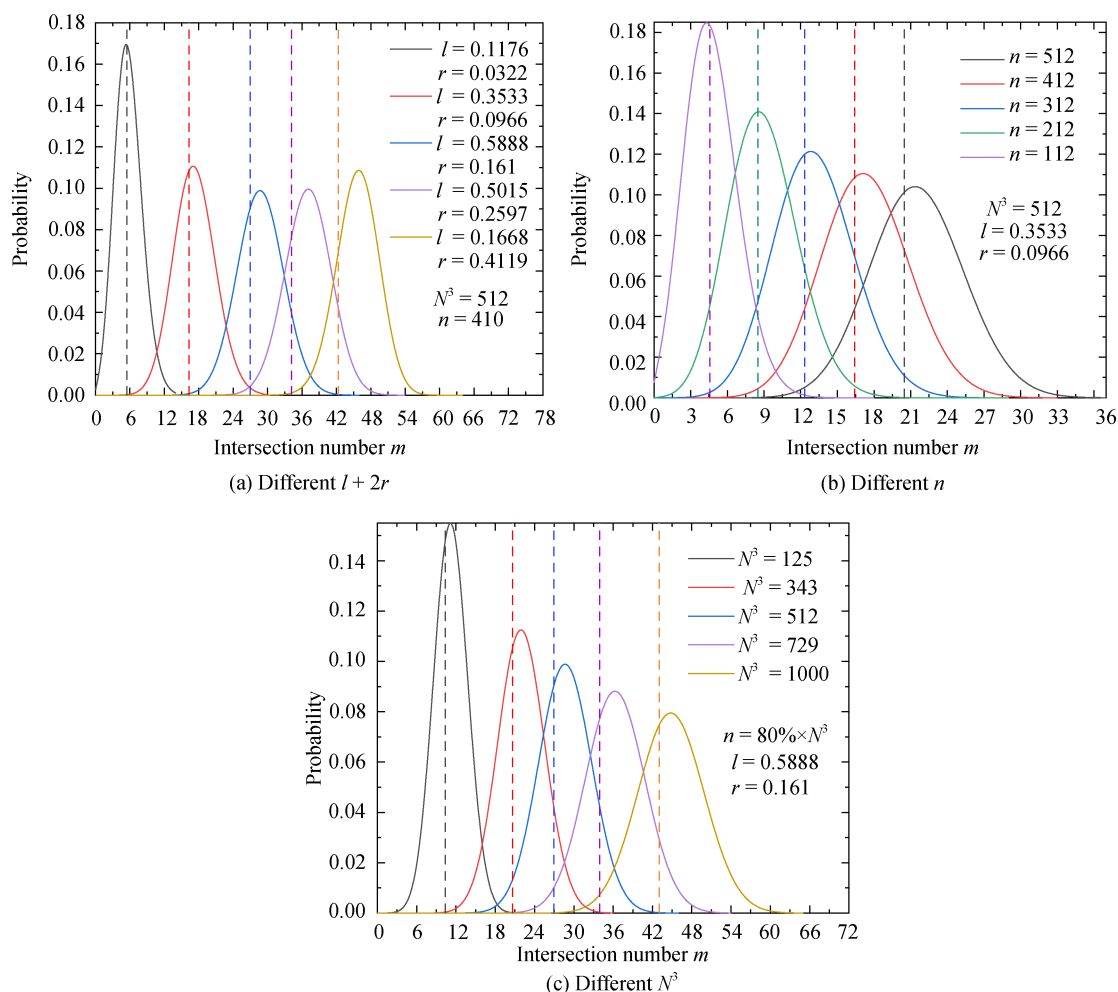


图 11 平面状裂缝遇到球柱形微胶囊的理论相遇概率和具体数量

Fig. 11 Theoretical hitting probability and specific number of a planar crack intersecting spherocylindrical microcapsules

在图 12 中横轴表示在 $l=0.3533$ 和 $r=0.0966$ 时掺入球柱形微胶囊的体积分数, 分别取 3% 和 6%, 纵坐标的 A、B 和 C 是裂缝遇到胶囊的数目 m 。在 B 点和 C 点, $P_1(m)=0.11$, 而在 A 点, $P_1(m)=0.04$ 。

换句话说, 当给定球柱形微胶囊的尺寸为 $0.3533+2\times 0.0966$ 的条件下, 尽管 B 点($n=200$)和 C 点($n=410$)掺入的球柱形微胶囊的体积分数不同, 但 B 点和 C 点处平面状裂缝遇到胶囊的概率是相同的, 均为

0.11。同时,从A点还可以看出,相遇概率越低,与裂缝相交的球柱形胶囊数量就越少。所以,如果能明确单个平面状裂纹被修复所需的微胶囊数量 m ,就可以根据相遇概率来决定需要掺入微胶囊的掺量。

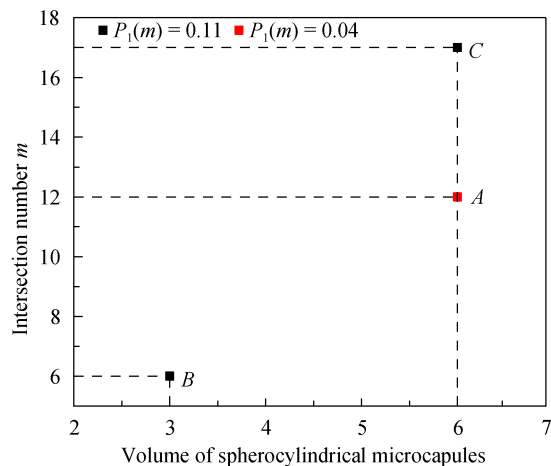


图 12 确定球柱形微胶囊的掺量

Fig. 12 Determination of the amount of spherocylindrical microcapsules to be embedded

图 13 比较了当取最大理论概率时计算得到裂缝遇到球形(或球柱形)微胶囊数量与模拟结果。可见,模拟值与理论值之间存在高度吻合。此表明,平面状裂纹遇到与随机分散在胶囊基自修复复合材料中的球形(或球柱形)微胶囊的几何概率模型是准确的。其次,当在球形或球柱形自修复复合材料模型中掺入相同体积分数的微胶囊时,由图 13 可见,球柱形微胶囊模型中随机出现的平面裂缝处遇

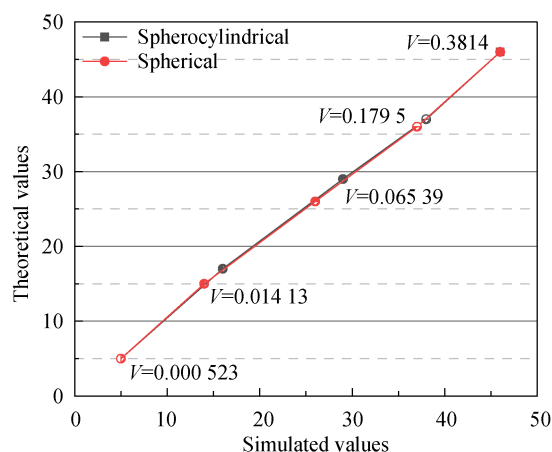


图 13 掺量相同情况下,比较平面状裂纹遇到球形或球柱形微胶囊的数量

Fig. 13 Comparison of the intersection number m for the spherical or spherocylindrical microcapsule model at the same volume fraction

到的微胶囊数量要稍多于球形微胶囊模型。例如,当掺入微胶囊的体积分数为 0.065 39 时,与裂缝相交的球形微胶囊约有 26 个,而球柱形微胶囊约有 29 个。其原因在于,与球形微胶囊相比,平面状裂纹遇到球柱形微胶囊的概率更高一些。

3 结论

为解决微胶囊在水泥基材料内聚集及分布不均匀的问题,设计了一种蜂窝状的基体材料结构以内置微胶囊。该蜂窝状几何结构由若干小单元体随机组合而成,部分小单元内随机分散着胶囊,此设计模型能够满足微胶囊分布的分散性和随机性特征的要求。建立了计算平面状裂纹遇到不同形状微胶囊时的几何概率模型,利用蒙特卡罗数值模拟验证了理论模型的计算结果的准确性,有助于指导设计人员优选微胶囊的形状、尺寸及掺量以获得最优修复效果,实现微胶囊自修复水泥材料的虚拟设计。此外,采用 3D 打印技术可能是实现自修复水泥基材料中微胶囊均匀分布设计策略的可行途径。主要结论如下:

- 1) 平面状裂纹遇到随机分散微胶囊的概率模型近似服从二项式概率分布。
- 2) 基于所建立的理论模型,若已知单个裂纹被修复所需的微胶囊数量,可根据相遇概率计算需要掺入微胶囊的掺量。
- 3) 相同掺量情况下,与球形微胶囊相比,平面状裂纹遇到球柱形微胶囊的概率更高。即球柱形胶囊具有更高的修复潜力。

参考文献:

- [1] DANISH A, MOSABERPANAH M, USAMA SALIM M. Past and present techniques of self-healing in cementitious materials: A critical review on efficiency of implemented treatments[J]. J Mater Res Technol, 2020, 9(3): 6883–6899.
- [2] LITINA C, AL-TABBAA A. First generation microcapsule-based self-healing cementitious construction repair materials[J]. Constr Build Mater, 2020, 255: 119389.
- [3] WHITE S R, SOTTOS N R, GEUBELLE P H, et al. Autonomic healing of polymer composites[J]. Nature, 2001, 409(6822): 794–797.
- [4] VAN TITTELBOOM K, DE BELIE N, DE MUYNCK W, et al. Use of bacteria to repair cracks in concrete[J]. Cem Concr Res, 2010, 40(1): 157–166.
- [5] SISOMPHON K, COPUROGLU O, KOENDERS E A B. Effect of exposure conditions on self healing behavior of strain hardening cementitious composites incorporating various cementitious materials[J]. Constr Build Mater, 2013, 42: 217–224.
- [6] KOSARLI M, BEKAS D G, TSIRKA K, et al. Microcapsule-based

- self-healing materials: Healing efficiency and toughness reduction vs. capsule size[J]. *Compos Part B Eng*, 2019, 171: 78–86.
- [7] ZHU D Y, RONG M Z, ZHANG M Q. Self-healing polymeric materials based on microencapsulated healing agents: From design to preparation[J]. *Prog Polym Sci*, 2015, 49: 175–220.
- [8] FANG G H, LIU Y Q, QIN S F, et al. Visualized tracing of crack self-healing features in cement/microcapsule system with X-ray microcomputed tomography[J]. *Constr Build Mater*, 2018, 179: 336–347.
- [9] ZHANG H, QI C J, CHEN W, et al. A novel method of self-healing cement paste by using gel microparticles encapsulating phosphate[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 279: 122439.
- [10] DU W, YU J Y, GU Y, et al. Preparation and application of microcapsules containing toluene-di-isocyanate for self-healing of concrete[J]. *Constr Build Mater*, 2019, 202: 762–769.
- [11] LV Z, LI S P, CHEN H S. Analytical model for effects of capsule shape on the healing efficiency in self-healing materials[J]. *PLoS One*, 2017, 12(11): e0187299.
- [12] MOOKHOEK S D, FISCHER H R, VAN DER ZWAAG S. A numerical study into the effects of elongated capsules on the healing efficiency of liquid-based systems[J]. *Comput Mater Sci*, 2009, 47(2): 506–511.
- [13] BON S A F, MOOKHOEK S D, COLVER P J, et al. Route to stable non-spherical emulsion droplets[J]. *Eur Polym J*, 2007, 43(11): 4839–4842.
- [14] GHOSH S K. *Self-Healing Materials: Fundamentals, Design Strategies, and Applications* [M]. Hoboken: John Wiley & Sons, 2008.
- [15] VAN DER ZWAAG S, VAN DIJK N H, JONKERS H M, et al. Self-healing behaviour in man-made engineering materials: Bioinspired but taking into account their intrinsic character[J]. *Philos Trans A Math Phys Eng Sci*, 2009, 367(1894): 1689–1704.
- [16] KANELLOPOULOS A, GIANNAROS P, AL-TABBAA A. The effect of varying volume fraction of microcapsules on fresh, mechanical and self-healing properties of mortars[J]. *Constr Build Mater*, 2016, 122: 577–593.
- [17] XUE C H, LI W G, LI J C, et al. Numerical investigation on interface crack initiation and propagation behaviour of self-healing cementitious materials[J]. *Cem Concr Res*, 2019, 122: 1–16.
- [18] SIDIQ A, SETUNGE S, GRAVINA R J, et al. Self-repairing cement mortars with microcapsules: A microstructural evaluation approach[J]. *Constr Build Mater*, 2020, 232: 117239.
- [19] KATOUEIZADEH E, ZEBARJAD S M, JANGHORBAN K. A practical analytic model for predicting the performance of an encapsulated polymer composite[J]. *Appl Math Model*, 2020, 78: 418–432.
- [20] LV Z, CHEN H S. Analytical models for determining the dosage of capsules embedded in self-healing materials[J]. *Comput Mater Sci*, 2013, 68: 81–89.
- [21] PAPAIOANNOU S, HEIN A, AMENTA M, et al. Simulation and experimental studies of self-healing capacity in cement mortars incorporating cement-based capsules[J]. *Cem Concr Compos*, 2023, 136: 104859.
- [22] LV Z, CHEN H S. A probabilistic method for determining the volume fraction of pre-embedded capsules in self-healing materials[J]. *Smart Mater Struct*, 2014, 23(11): 115009.
- [23] LV Z, YAO J B, CUI G J, et al. Geometrical probability of a capsule hitting irregular crack networks: Application to capsule-based self-healing materials[J]. *Appl Math Model*, 2022, 101: 406–419.
- [24] LV Z, CHEN H S, YUAN H F. Analytical solution on dosage of self-healing agents in cementitious materials: Long capsule model[J]. *J Intell Mater Syst Struct*, 2014, 25(1): 47–57.
- [25] GUO S, CHIDIAC S E. Probability characteristics of a crack hitting spherical healing agent particles: Application to a self-healing cementitious system[J]. *Materials*, 2022, 15(20): 7355.
- [26] ZHANG W, ZHENG Q F, ASHOUR A, et al. Self-healing cement concrete composites for resilient infrastructures: A review[J]. *Compos Part B Eng*, 2020, 189: 107892.
- [27] HERMAWAN H, RIORDAN C, VAN DER SICHEL S, et al. Mix design optimisation of self-sealing concrete containing microcapsules with polyurethane shell and water repellent cargo[J]. *Dev Built Environ*, 2024, 18: 100448.
- [28] MILLA J, HASSAN M M, RUPNOW T. Evaluation of self-healing concrete with microencapsulated calcium nitrate [J]. *J Mater Civ Eng*, 2017, 19(12): 0002072.
- [29] SHAO L J, FENG P, LIU Q, et al. A review on performance improvement and multi-functionalization of cement composites using capsules[J]. *Constr Build Mater*, 2023, 409: 133977.
- [30] LV Z, SHI M Y, YUAN J, et al. A probability characteristic of crack intersecting with embedded microcapsules in capsule-based self-healing materials[J]. *Sci Eng Compos Mater*, 2023, 30(1): 20220207.
- [31] PAN X Y, GENCTURK B. Optimized self-healing in concrete using engineered aggregates[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 309: 124965.
- [32] BRANDT A M. *Cement-Based Composites: Materials, Mechanical Properties, and Performance* [M]. New York: Taylor & Francis, 2009.
- [33] LIU B, ZHANG J L, KE J L, et al. Trigger of self-healing process induced by EC encapsulated mineralization bacterium and healing efficiency in cement paste specimens[C]//5th International Conference on Self-Healing Materials, Durham, , United Kingdom, 2015: 1–4.
- [34] MOHONEE V K, GOH K L, MISHNAEVSKY L, et al. Capsule based self-healing composites: New insights on mechanical behaviour based on finite element analysis[J]. *Comput Mater Sci*, 2021, 192: 110203.
- [35] 史梦言. 基于微胶囊-裂缝相遇概率的自修复水泥基材料修复效率研究 [D]. 马鞍山: 安徽工业大学, 2024.
- SHI Mengyan. Research on the healing efficiency of self-healing cementitious materials from the viewpoint of microcapsules-crack intersection probability[D]. Maanshan: Anhui University of Technology, 2024.
- [36] RULE J D, SOTTOS N R, WHITE S R. Effect of microcapsule size on the performance of self-healing polymers[J]. *Polymer*, 2007, 48(12): 3520–3529.
- [37] HILLOULIN B, VAN TITTELBOOM K, GRUYAERT E, et al. Design of polymeric capsules for self-healing concrete[J]. *Cem Concr Compos*, 2015, 55: 298–307.
- [38] MENDENHALL W, BEAVER R J, BEAVER B M. *Introduction to Probability and Statistics* [M]. Belmont: Duxbury, 2006.
- [39] FANG X R, PAN Z C, CHEN A R. Analytical models to estimate efficiency of capsule-based self-healing cementitious materials considering effect of capsule shell thickness[J]. *Constr Build Mater*, 2021, 274: 121999.

A Design Strategy for Uniform Distribution of Microcapsules and Calculation of Healing Efficiency in Self-Healing Cementitious Materials

LYU Zhong¹, SONG Xianglong¹, LIANG Ke¹, YUAN Jing¹, SHI Mengyan¹, CHEN Huisu²

(1. College of Civil Engineering and Architecture, Anhui University of Technology, Ma'anshan 243032, Anhui, China;

2. School of Materials Science and Engineering, Southeast University, State Key Laboratory of Engineering Materials for Major Infrastructure, Jiangsu Key Laboratory of Construction Materials, Nanjing 211189, China)

Extended Abstract

Introduction The distribution characteristics of microcapsules incorporated into matrix can influence the quantity of microcapsules required for embedding in the cementitious matrix, thereby determining the self-healing efficiency. Self-healing systems are essentially passive systems that autonomously initiate the healing process when cracks occur. The efficacy of such systems necessitates both adequate distribution and sufficient bonding of the capsules with the matrix. The recent preparation of microcapsules in self-healing composites presents significant challenges in achieving optimal self-healing effects. One of the key obstacles is the aggregation and uneven distribution of capsules within the matrix, which can significantly impair the healing efficiency of microcapsule self-healing cementitious materials. This nonuniform distribution diminishes the effectiveness of the capsules and adversely affects properties like early mechanical strength. Furthermore, the uneven distribution of capsules in the matrix will lead to the reduction of the number of capsules encountered by cracks. It is therefore essential to ensure the uniform distribution of capsules within the matrix in order to maximise the probability of microcapsule rupture and self-healing capacity.

Methods In order to avoid agglomeration of microcapsules, a uniformed distribution model for microcapsules inspired by the structural form of a honeybee's hive is designed in self-healing cementitious materials and some embedded microcapsules are dispersed within the honeycomb. This honeycomb model ensures the uniform distribution of microcapsules inside the matrix and prevent the aggregation of microcapsules, thereby achieving a design strategy for the uniform distribution of microcapsules in self-healing cementitious materials.

The probabilistic characteristics of a planar crack that appears inside a composite matrix and intersects with embedded microcapsules is investigated from the viewpoint of geometrical probability. The probability of a randomly occurring planar crack in the matrix when it encounters a spherical or spherocylindrical microcapsule is derived, and an intersection probability formula is obtained. Furthermore, the influences of capsule dimensions and quantities on the intersection probability is examined in capsule-based self-healing composites. In addition, comparative analysis is conducted on microencapsulated composite matrix models with varying shapes. Finally, the results of the theoretical model are validated using Monte Carlo simulation.

Results and discussion The honeycomb-like composite structure is a three-dimensional structure composed of several small cubes (cells), with a certain number of spherical or spherocylindrical microcapsules randomly dispersed within the small cubes, ensuring the uniform distribution of the capsules and avoiding the aggregation of microcapsules. When a random planar crack appears within the composite, the crack will meet some microcapsules and causes the ones to rupture releasing a healing agent to heal the crack, which is necessary for self-healing to work. Three-dimensional probabilistic analytical models are developed for the spherical microcapsules and spherocylindrical microcapsules in order to represent the intersection of a planar crack with randomly dispersed microcapsules, respectively.

The findings indicate that uniformly dispersed microcapsules can increase the probability of capsule rupture and improve the self-healing efficiency. The developed three-dimensional geometric probability model of a planar crack intersecting with randomly distributed microcapsules in the matrix cells is close to a binomial probability distribution. The use of spherocylindrical microcapsules can increase the healing potential of the same volume fraction of spherical microcapsules if the microcapsules are correctly oriented. The theoretical probability values are verified by comparison with the results obtained independently by computer programming simulations.

Conclusions The proposed theoretical formulas quantitatively express the effect of the size and dosage of different-shaped microcapsules within the matrix on the probability of a planar crack hitting microcapsules and to predict the number of microcapsules that are most likely to intersect. If the volume fraction (or size) of microcapsules is given and a planar crack requires a fixed number of microcapsules to heal, the maximum intersection probability can be calculated from the theoretical equation to determine the optimum size (or volume fraction) of microcapsules to be mixed within the model. The results of this research will help to provide a theoretical basis for the quantitative design of self-healing materials based on microcapsules of different shapes. Furthermore, employing 3D printing technology could be a feasible approach to realize the design strategy for the uniform distribution of microcapsules within self-healing cementitious materials.

Keywords self-healing; microcapsule aggregation; healing efficiency; cementitious material; Monte Carlo simulation