



DOI:10.12404/j.issn.1671-1815.2308222

引用格式:白希选,陆定洋,赵程,等.干湿循环下再生混凝土氯离子传输行为的微观模拟[J].科学技术与工程,2025,25(1):329-338.

Bai Xixuan, Lu Dingyang, Zhao Cheng, et al. Microscopic simulation of chloride ion transport behavior in recycled concrete under dry-wet cycles[J]. Science Technology and Engineering, 2025, 25(1): 329-338.

干湿循环下再生混凝土氯离子传输行为的 微观模拟

白希选¹, 陆定洋¹, 赵程^{1*}, 王桥²

(1. 武汉工程大学土木工程与建筑学院, 武汉 430074; 2. 武汉大学水利水电学院, 武汉 430072)

摘要 基于蒙特卡洛法,利用 Python 与 Abaqus 接口进行二次开发,生成区分天然粗骨料、新、旧界面过渡区(interfacial transition zone, ITZ)和新、旧砂浆的再生混凝土(recycled aggregate concrete, RAC)二维微观五相模型。提出改进的干湿循环下水分-氯离子耦合模型,并将该模型的计算结果与物理试验进行对比验证,结果吻合较好。将该模型应用于分析干湿循环周期、ITZ 渗透率、水胶比和天然骨料体积分数对氯离子传输性能的影响规律。结果表明,在干湿循环次数增加的情况下,RAC 中氯离子的扩散深度和浓度也会随之增加。当 ITZ 扩散系数与新砂浆扩散系数的比值增大时,氯离子的扩散区域中氯离子浓度增加明显,尤其是在扩散区的前端位置氯离子浓度增加最为显著。此外,不同水灰比的 RAC 材料与氯离子的传输能力之间存在正相关关系,高水灰比范围内氯离子传输性能变化较小。最后,再生骨料体积分数对 RAC 的抗氯离子渗透性能产生显著影响,这说明 ITZ 和新旧砂浆对氯离子的传输具有重要影响。

关键词 再生混凝土; 微观数值模型; 干湿循环; 水分; 氯离子; 传输过程

中图分类号 TU528; **文献标志码** A

Microscopic Simulation of Chloride Ion Transport Behavior in Recycled Concrete under Dry-Wet Cycles

BAI Xi-xuan¹, LU Ding-yang¹, ZHAO Cheng^{1*}, WANG Qiao²

(1. School of Civil Engineering and Architecture, Wuhan Institute of Technology, Wuhan 430074, China;

2. School of Water Resources and Hydropower Engineering, Wuhan University, Wuhan 430072, China)

[Abstract] Based on Monte Carlo method, Python and Abaqus interface were used for secondary development, and an interfacial transition zone was generated to distinguish between natural coarse aggregates and new and old interfacial transition zone(ITZ) and recycled aggregate concrete (RAC) 2D meso-five phase model of new and old mortar. An improved moisture-chloride ion coupling model under dry-wet cycles was proposed, and the computational results of this model were compared and validated against physical experiments, with good agreement. This model was then applied to analyze the effects of dry-wet cycle periods, ITZ permeability, water-cement ratio, and natural aggregate volume fraction on chloride ion transport properties. The numerical results show that as the number of dry-wet cycles increases, the diffusion depth and concentration of chloride ions in RAC also increases. When the ratio of ITZ diffusion coefficient to the new mortar diffusion coefficient increases, the chloride ion concentration in the diffusion region increases significantly, especially at the front end of the diffusion zone. In addition, there is a positive correlation between RAC materials with different water-cement ratios and chloride ion transport capacity, with little variation in chloride ion transport performance within the high water-cement ratio range. Finally, the volume fraction of recycled aggregates has a significant impact on the chloride ion permeability of RAC, indicating that the ITZ and new and old mortar have an important influence on the transport of chloride ions.

[Keywords] RAC; microscopic numerical model; dry-wet cycles; moisture; chloride ion; transmission process

收稿日期: 2023-10-23 修订日期: 2024-07-19

基金项目: 湖北省教育厅科学研究计划(Q20221514); 武汉重点研发计划(2022022202015022, 2023020402010593); 武汉市知识创新专项曙光计划(2023020201020436); 武汉工程大学研究生教育创新基金(CX2022204)

第一作者: 白希选(1986—),男,汉族,河南濮阳人,博士,副教授。研究方向:再生混凝土。E-mail:baixx87@163.com。

***通信作者:** 赵程(1991—),男,汉族,湖北荆州人,博士,讲师。研究方向:混凝土结构耐久性,大体积混凝土温度控制,水泥基材料固碳与固废循环利用。E-mail:zc2021@wit.edu.cn。

再生混凝土是一种环保建筑材料,其制备过程中使用了再生骨料,即从废弃混凝土中回收的碎石或砂石,以替代部分或全部传统的天然骨料,这种材料的使用有助于减少建筑废弃物的排放,降低资源消耗,对环境友好,因此在可持续建筑领域受到广泛关注^[1-2],然而,再生混凝土在实际使用中面临一些问题,其中之一是氯离子侵蚀问题。氯离子是混凝土结构材料中的一种常见侵蚀物质,当氯离子渗入混凝土中,它们可以引发钢筋锈蚀,从而损害混凝土的耐久性和结构强度^[3]。再生混凝土中由于再生骨料的使用,存在一些细观尺度的特性,如界面过渡区(interfacial transition zone, ITZ)、旧砂浆区的形成和再生骨料与新骨料之间的不均匀性,这些特性会对氯离子的扩散和侵蚀产生重要影响^[2]。

目前,已有大量学者开展了再生混凝土氯离子传输性能方面的研究, Mahmood 等^[4]研究了海洋环境下氯离子扩散系数 D 和再生混凝土表面氯离子浓度 C 对氯离子侵入再生混凝土的影响。王祥等^[5]和 Hu 等^[6]在研究中考考虑氯离子在再生混凝土中的运输,但是均忽视了水分在再生混凝土湿润和干燥阶段的差异。Ying 等^[7]和胡志等^[8]建立了再生混凝土五相细观模型,研究了骨料级配、替代率、界面过渡区厚度等细观参数对氯离子扩散的影响。Xiao 等^[9]提出了再生粗骨料(recycled aggregate concrete, RCA)对 RAC 氯离子扩散的影响模型,该模型通过有限元方法研究骨料形状、边界条件,以及细观参数对氯离子传输的影响。然而,在当前研究中,再生粗骨料常被假设为理想化的圆形骨料,与实际中的 RAC 细观多边形骨料差异较大,且研究中常常偏重于单一因素的影响,对干湿条件与再生骨料各相之间的作用缺乏全面研究。

鉴于此,为模拟再生粗骨料的实际形状以及真实的干湿循环条件,现建立再生混凝土多相细观数值模型,研究干湿循环作用下再生粗骨料混凝土中氯离子传输机制。基于蒙特卡洛法,结合骨料富勒级配曲线,首先生成具有更高投放率的再生骨料混凝土五相模型(新、旧砂浆;新、旧 ITZ;天然骨料)。然后,将水-氯离子耦合模型引入再生骨料混凝土的五相模型中进行细观尺度分析,并结合试验数据验证所提出的数值模型的可靠性。最后,探讨干湿循环周期、ITZ 与新砂浆扩散系数比值、水灰比、体积分数对干湿循环下 RAC 氯离子传输性能的影响,可在一定程度上为实际工程中混凝土耐久性的设计提供指导。

1 再生骨料混凝土细观模型生成

再生混凝土是复杂的多孔材料,具有不均匀

性,细观层面上由新、砂浆基质,天然骨料,再生骨料和新、旧 ITZ 组成的五相复合材料。利用 Python 语言建立再生骨料混凝土五相细观模型,满足实际骨料形状以及骨料粒径级配曲线的要求。相较于目前常见的 RAC 五相细观模型^[10],所提模型基于 Cramer 法则优化了骨料碰撞判定,增加了再生粗骨料取代率功能,提高了再生骨料投放率,可以在短时间内生成更高体积分数的再生混凝土模型。细观模型生成的具体步骤如下。

步骤 1 生成 RAC 和骨料外框。利用 Python 语言建立 $100\text{ mm} \times 100\text{ mm}$ 二维 RAC 试块截面,截面面积用 A 表示,方便后续设置骨料体积分数和取代率中调用。基于蒙特卡洛法,随机生成一级配圆形骨料(粒径范围 $5 \sim 20\text{ mm}$),在圆形骨料圆周上随机选取若干个顶点作为内接多边形顶点。设置命令流存储顶点坐标,方便后续步骤调用。此步骤可模拟实际的多边形骨料顶点,通过式(1)控制点与点之间的距离,保证骨料圆心在截面内部。

$$L_{\min} = 2R \sin \left[\frac{\pi}{2(n-1)} \right] \quad (1)$$

式(1)中: R 为多边形骨料之间的平均距离; n 为骨料晶格点数。

步骤 2 生成所需各粒径骨料体积分数。利用 Walavan 公式^[10]将富勒的三维级配曲线转换为二维级配曲线以满足富勒级配曲线要求,对于某一粒径区间骨料,生成 k 个骨料,每个骨料的 n 个顶点记录为 A_1, A_2, \dots, A_n ,则骨料体积分数表达式为

$$A_i = \sum_{j=1}^k S_j / A = \sum_{j=1}^k \left(1/A \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & \cdots & 1 \\ x_2 & y_2 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_i & y_i & \cdots & 1 \end{vmatrix} \right) \quad (2)$$

式中: S_i 为第 i 个骨料面积($i=1, 2, \dots, n$); A 为 RAC 截面面积; x_i 和 y_i 为存储的骨料顶点坐标。

步骤 3 判断骨料之间不重叠。将骨料从大到小的顺序投入矩形 RAC 框架中,基于第一步生成的圆形骨料通过圆心距离大于相邻圆半径之和即 $L_{ij} > R_i + R_j$ 进行初步判定,再检查多边形任一顶点是否贯穿另一多边形,用 Cramer 法则求出交点坐标进行二次判定,程序里面保留不相交的骨料模型,此步骤可以提高骨料投放率。

步骤 4 设置循环语句,随机选取骨料拓展为再生骨料,为了优化运算效率,根据储存的骨料信息采用向内拓展生成新、旧 ITZ 和旧砂浆区域,以满足设置的取代率要求时,循环结束。生成的 RAC 五相结构示意图如图 1 所示。

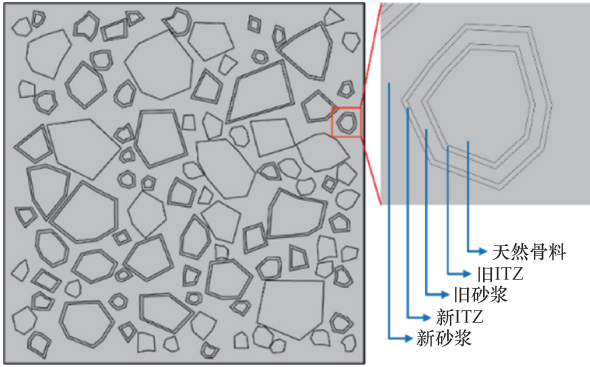


图1 RAC五相结构示意图

Fig. 1 Five-phase structure schematic diagram of RAC

2 再生骨料混凝土微观模型生成

2.1 水分传输方程

水分是氯离子在多孔材料中扩散的主要驱动力,扩展的达西定律通常用于描述多空材料中的毛细吸水过程,该过程通常不考虑水的气相。结合水分质量守恒定律和 Fick 第二定律得水在多孔介质中的一维运输过程表示为

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} \right] \quad (3)$$

式(3)中: θ 为相对含水量; x 和 t 分别为渗透深度和时间; $D(\theta)$ 为水力扩散系数, m^2/s ;干燥和湿润过程中,水力扩散系数差异较大,针对湿润和干燥阶段, $D(\theta)$ 应分别给出^[11-13]。

干燥阶段:

$$D(\theta) = D_d \left[\delta + \frac{1 - \delta}{1 + \left(\frac{1 - \theta}{1 - \theta_c} \right)^{n1}} \right] e^{\frac{U}{R_0} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right)} \quad (4)$$

湿润阶段:

$$D(\theta) = D_m e^{n2\theta} e^{\frac{U}{R_0} \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right)} \quad (5)$$

式中: D_d 和 D_m 分别为混凝土完全干燥和完全湿润下的水力扩散系数; δ 为在极低相对湿度下水力扩散系数与 D_m 的比值; θ_c 为扩散系数等于 $D_m/2$ 时的混凝土水饱和度; U 为分子活化能, J/mol ; R_0 为气体常数, $R_0 = 8.314 \text{ J/mol}$; T 为温度, K ; T_{ref} 为参考温度。

2.2 氯离子传输方程

在非饱和混凝土中,氯离子的传输是一个复杂的过程,可分为4个部分:离子的扩散传输、对流传输、离子之间的相互作用和离子的化学活性^[14]。在没有电场的非饱和混凝土中,氯离子的转移主要考虑了浓度梯度引起的扩散和水分传输引起的对流。此外,氯离子在传输过程中会与水化产物发生固化作用,部分氯离子会附着在混凝土表层形成物理吸附,另外一部分氯离子与水化产物反应发生化学结

合。由于浓度扩散只能发生在孔隙液体中,孔隙中的水饱和度在非饱和混凝土的氯离子传输模型中起着重要作用^[15]。考虑到水饱和度对氯离子迁移的影响,假设非饱和混凝土中的氯离子扩散系数与水饱和度呈指数关系,氯离子的扩散通量 J_d 可表示为

$$J_d = -D_{Cl} \theta^r \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6)$$

式(6)中: D_{Cl} 为饱和混凝土中修正的氯离子扩散系数, m^2/s ,针对不同相,分别给出对应的氯离子扩散系数,见第4节; r 为水饱和度的影响指数; θ^r 为扩散物质占据的体积比例; C 为孔隙溶液中的氯离子浓度, kg/m^3 。氯离子通过水分传输的对流通量 J_c 可以表示为

$$J_c = -D_{Cl} \frac{\partial \theta}{\partial x} C \quad (7)$$

氯离子进入非饱和混凝土的控制方程由对流和扩散效应相组合,根据质量守恒可以表示为

$$J_{Cl} = J_{diff} + J_{conv} \quad (8)$$

式(8)中: J_{diff} 为扩散通量,由浓度梯度引起的氯离子扩散部分; J_{conv} 为对流通量,由于流体流动(如水流或空气流动)引起的氯离子迁移。因此,氯离子进入非饱和混凝土的质量平衡,由对流和扩散的组合控制,可以表示为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_{Cl} \theta^r \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial x} C \right] \quad (9)$$

2.3 综合因素下氯离子扩散系数

氯离子在非饱和混凝土中的扩散速率受到许多参数的严重影响,如孔隙率、环境因素(温度和相对湿度)和使用条件(荷载工况和应力状态)。对于承受荷载和碳化作用的非饱和混凝土,扩散系数 D_{Cl} 可以使用以下多因素方法进行估算^[16]。

$$D_{Cl} = D f(t) f(T) f(RH) f(d) f(C) f(R) \quad (10)$$

式(10)中: D 为氯离子的参考扩散系数,其余项分别表示 D 对混凝土龄期、温度、内部相对湿度、混凝土劣化、静电相互作用和氯离子结合能力的依赖性。由于氯离子在杀警区和ITZ区之间扩散系数差异很大^[10],故RAC各相扩散系数应分别设置,具现有研究,旧砂浆旧黏结砂浆氯离子扩散系数是新砂浆的0.2~5倍^[17],ITZ氯离子扩散系数和砂浆氯离子扩散系数比在1.3~16.2倍的范围内变化^[18]。天然骨料与其他4相相比较为致密,渗透系数小,因此在数值分析中假设天然骨料相的氯离子扩散系数为0。根据Zheng等^[19]提出的新砂浆离子扩散系数 D_{cp} 计算公式,表达式为

$$D_{cp} = \frac{2\varphi_p^{2.75} D_p}{\varphi_p^{2.75} (3 - \varphi_p) + n (1 - \varphi_p)^{2.75}} \quad (11)$$

式(1)中: D_p 为氯离子在孔隙溶液中的扩散系数, $D_p = 1.07 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$; n 为无量纲常数,取14.44^[19]; φ_p 为水泥砂浆孔隙率。

$$\varphi_p = \frac{W/B - 0.17\alpha}{W/B + 0.32} \quad (12)$$

式(12)中: W/B 为水灰比; α 为水泥水化程度,与RAC中水化反应物 C_3S 、 C_2S 、 C_2A 、 C_4AF 含量有关。

$$\alpha = \sum \alpha_i(t) \frac{\omega_i}{\sum \omega_i} \quad (13)$$

式(13)中: $\alpha_i(t)$ 为水化反应物的水化程度; ω_i 为水化反应物 i 的质量。通过回归分析得到简化公式为

$$\alpha = 0.716t_1^{0.0901} e^{-\frac{0.103\alpha_1^{0.0719}}{W/B}} \quad (14)$$

式(14)中: t_1 为水泥固化时间。

随着水泥水化时间的推移,RAC孔隙率逐渐降低,从而限制氯离子的扩散,故RAC龄期对混凝土的扩散系数的影响^[20]可表示为

$$f(t) = \left(\frac{t_{\text{ref}}}{t}\right)^m \quad (15)$$

式(15)中: t_{ref} 为参考龄期,为28 d; m 为时间衰减指数。

温度对RAC中氯离子扩散系数的影响可以用 Arrhenius 定律描述为

$$f(T) = e^{\frac{U}{R} \left(\frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T}\right)} \quad (16)$$

混凝土中内部相对湿度对氯离子扩散的影响^[21]可以表示为

$$f(\text{RH}) = \left[1 + \frac{(1 - \text{RH})^4}{(1 - \text{RH}_c)^4}\right]^{-1} \quad (17)$$

式(17)中: RH_c 为扩散系数在其最大值和最小值之间下降一半时的临界湿度, $\text{RH}_c = 75\%$ 。混凝土的内部相对湿度(RH)也是空间和时间的函数。要将 θ 转换为RH,转换方法^[22]如下。

$$\text{RH} = \frac{h - \sqrt{[h^2 - 4(1 - C_E)]}}{2k_1(1 - C_E)} \quad (18)$$

$$h = 2 + \left(\frac{V_m}{W_{20}\theta} - 1\right)C_E \quad (19)$$

式中: W_{20} 为当混凝土在20℃饱和时,水含量相对于水泥浆的质量分数; C_E 为能量参数; k_1 为常数; V_m 为每单位质量水泥浆中水分子的单层质量,在此次模拟中, $W_{20} = 0.274$, $C_E = 18.478$, $k_1 = 0.7013$, $V_m = 0.0614$ 。

RAC成型后,由于温度、收缩和蠕变等外部因素的影响,内部会出现初始缺陷。在养护和长期使用过程中可能会出现微裂缝。导致氯离子在RAC中的传输加速,因此必须考虑初始缺陷对氯离子在RAC中传输的影响。混凝土的开裂效应与混凝土的

水灰比(W/B)密切相关^[23],可表示为

$$f(d) = \begin{cases} \frac{1}{3} \left[1000 \left(\frac{W}{B}\right)^2 - 1050 \left(\frac{W}{B}\right) + 287 \right], & W/B \leq 0.5 \\ 4.0, & W/B > 0.5 \end{cases} \quad (20)$$

溶液中离子引起的静电场的限制^[24],可表示为

$$f(C) = 1 - k_i C^\gamma \quad (21)$$

式(21)中: k_i 和 γ 为两个常数, $k_i = 8.333$, $\gamma = 0.5$ 。

部分氯离子与水化产物反应生成弗里德尔盐,或者在传输过程中吸附在水化硅酸钙表面或封闭在C—S—H层之间^[24-25]。因此,氯离子的结合能力^[26]可表示为

$$\begin{cases} f(R) = \frac{1}{1 + R} \\ R = \begin{cases} \frac{\alpha_1}{(1 + \beta_1 C)^2}, & C \leq 1.7333 \text{ kg/m}^3 \\ \alpha_2 \beta_2 C^{\beta_2 - 1}, & C > 1.7333 \text{ kg/m}^3 \end{cases} \end{cases} \quad (22)$$

式(22)中: R 为评估混凝土氯离子结合能力; α_1 、 β_1 、 α_2 、 β_2 为等温吸附曲线参数,取 $\alpha_1 = 3$ 、 $\beta_1 = 0.9$ 、 $\alpha_2 = 5.7$ 、 $\beta_2 = 0.53$ 。

3 数值方法求解与验证

3.1 参数确定

相同厚度的情况下,不同再生骨料周围的界面过渡区厚度具有很大的离散性。如果界面过渡区取值过小,对计算机的能力要求过高(网格划分困难),故细观模拟时界面过渡区的尺寸一般比电镜扫描得到的尺寸大一些,通常取为50~500 μm ^[26],界面过渡区取100 μm ,旧砂浆厚度取300 μm 。 D_p 为试验中测得的氯化钠在孔隙溶液中的扩散系数。整理得模拟中主要计算参数如表1所示。

表1 耦合模型计算参数

Table 1 Coupled model calculation parameters		
参数	参数值	含义
$t_{\text{ref}}^{[27]}$	28 d	参考养护时间
$T_{\text{ref}}^{[27]}$	273.15 K	参考温度
W/B	0.4	水灰比
N	14	干湿循环次数
C_s	0.5	边界氯化钠溶液浓度
D_p	$1.07 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	氯化钠在孔隙溶液中的扩散系数
m	0.2	时间衰减指数
$\theta_m^{[28]}$	0.95	湿润过程边界水饱和度
$\theta_d^{[28]}$	0.7	干燥过程边界水饱和度
θ_0	0.7	RAC初始饱和度
C_{R0}	0	RAC初始氯离子浓度

3.2 初始和边界条件

由于干燥和湿润条件交替进行,且干燥和湿润过程中氯离子的扩散不会停止,故在模拟过程中采用瞬态求解,每一个干燥过程的氯离子浓度初始值和饱和度等继承上一个湿润阶段的终值。模拟包含 14 个干湿循环过程,对应物理试验中 14 d 的干湿循环作用。由于混凝土表面的饱和度可以很快与环境达到平衡,故不考虑边界干湿变化的时间^[29],因此采用式(23)~式(25)表示各干湿循环过程中初始值以及边界条件。

(1) 初始阶段($t = 0$)。

$$\begin{cases} \theta(x, t = 0) = \theta_{d,0}, C_f(x, t = 0) = C_{f,d,0} \\ \theta_b(x = 0, t) = \theta_0, C_{fb}(x = 0, t) = C_s \end{cases} \quad (23)$$

(2) 第 i 个湿润阶段($i \leq t < i + 0.25$)。

$$\begin{cases} \theta_{m,i}(x, t) = \theta_{d,i-1}, C_{f,m,i}(x, t) = C_{f,d,i-1} \\ \theta_b(x = 0, t) = \theta_m, C_{fb}(x = 0, t) = C_s \end{cases} \quad (24)$$

(3) 干燥阶段($i + 0.25 \leq t < i + 1$)。

$$\begin{cases} \theta_{d,i}(x, t) = \theta_{m,i}, C_{f,d,i}(x, t) = C_{f,m,i} \\ \theta_b(x = 0, t) = \theta_d, C_{fb}(x = 0, t) = C_s \end{cases} \quad (25)$$

式中: i 与时间对应; t 为时间; d ; $\theta_{m,i}$ 、 $\theta_{d,i}$ 分别为 t 时刻对应的第 i 个湿润、干燥阶段 RAC 内部水饱和度初始值; $C_{f,m,i}$ 、 $C_{f,d,i}$ 分别为 t 时刻对应的第 i 个湿润、干燥阶段 RAC 内部氯离子浓度初始值; θ_b 和 C_{fb} 分别为 t 时刻边界水饱和度以及边界氯离子浓度。模拟中新、旧 ITZ 扩散系数以及旧砂浆扩散系数分别取为新砂浆的 2.5 倍、10 倍。天然骨料相不可渗透,渗透系数为 $0 \text{ m}^2/\text{s}$ ^[10]。

3.3 模型验证

通过模拟鲍玖文等^[29]的干湿循环作用下氯离子侵蚀试验,对所提出的数值模型进行可靠性与合理性验证。试验中选用 0%、30%、50%、100% 4 种再生骨料取代率试块,截面尺寸为 $100 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$,水灰比统一取为 0.4,室温条件下养护 24 h 拆模,并置于 $(20 \pm 2)^\circ\text{C}$ 、相对湿度 $\geq 95\%$ 的养护室中养护 28 d。氯盐侵蚀试验通过在试验箱内采用质量分数为 5% 的 NaCl 溶液。干湿循环制度以湿润 6 h 和干燥 18 h 为一个循环周期,即干湿比为 3:1。干湿循环作用 14 d 后对试件侵蚀面进行磨粉取样,根据规范^[27]进行自由氯离子含量测定。最后将试验数据与模拟数据进行了比较。

如第 2 节所示,生成了 4 种取代率的模型(0%、30%、50%、100%),RAC 骨料体积分数取为 60%,新旧 ITZ 厚度取 $100 \mu\text{m}$,旧砂浆厚度取 $300 \mu\text{m}$ 。使用 COMSOL Multiphysics 软件将 RAC 模型划分为自由三角形网格,如图 2 所示,最高可达到 12.18 万

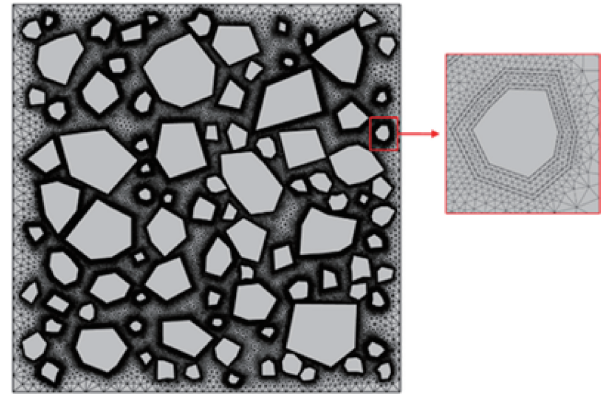


图 2 RAC 自由三角形网格划分

Fig. 2 RAC free triangular mesh partition

个网格单元。

由于鲍玖文等^[29]对侵蚀面进行磨粉取样,先以每 1 mm 厚度切片研磨至 10 mm,再以 2 mm 为厚度切片研磨至 40 mm,然后测定氯离子含量。然而,骨料在再生混凝土中的随机分布会导致相同侵蚀深度下氯离子浓度略有差异,故参照试磨深度计算了模型沿侵蚀边界处 3 个随机位置的氯离子浓度分布(Line-1、Line-2、Line-3)。4 种取代率模型分别表示为 R_0 (0%)、 R_{30} (30%)、 R_{50} (50%)、 R_{100} (100%)。干湿循环作用下氯离子扩散过程数值分析模拟结果与试验数据对比如图 3 所示。可以明显看出,模型计算结果与试验所得的结果吻合较好,证明了所提出模型的可靠性。此外,通过将图 3 中 4 个不同取代率 RAC 的比较,可以明显看出,RCA 取代率不但促进了氯离子扩散,还增加了混凝土表面对流区氯离子浓度(从 0.5 增加到了 0.65)。

4 计算结果及讨论

主要研究干湿循环次数、界面过渡区(ITZ)扩散系数、水灰比、骨料体积分数等因素的影响。这些因素可能对再生混凝土中氯离子扩散产生一定的影响。

4.1 干湿循环周期对氯离子扩散的影响

不同干湿循环周期下,循环周期数 N 对水分及氯离子在 RAC 中侵入的深度及各位置处的浓度有重要影响,由于干燥过程水分传输方向改变并以一定速度通过 RAC 与大气接触而向外界蒸发,导致边界处氯离子析出,聚集在 RAC 表层,从而使氯离子浓度升高产生峰值现象。

为了更好地了解不同干湿循环周期下 RAC 中氯离子扩散的过程,针对水灰比 0.4, RCA 取代率为 50%,进行 6 个循环次数($N = 7, 14, 21, 28, 35, 42$)的 RAC 试样进行了一系列数值模拟,其余参数见表 1。图 4 表示不同干湿循环周期下不同取代率的再

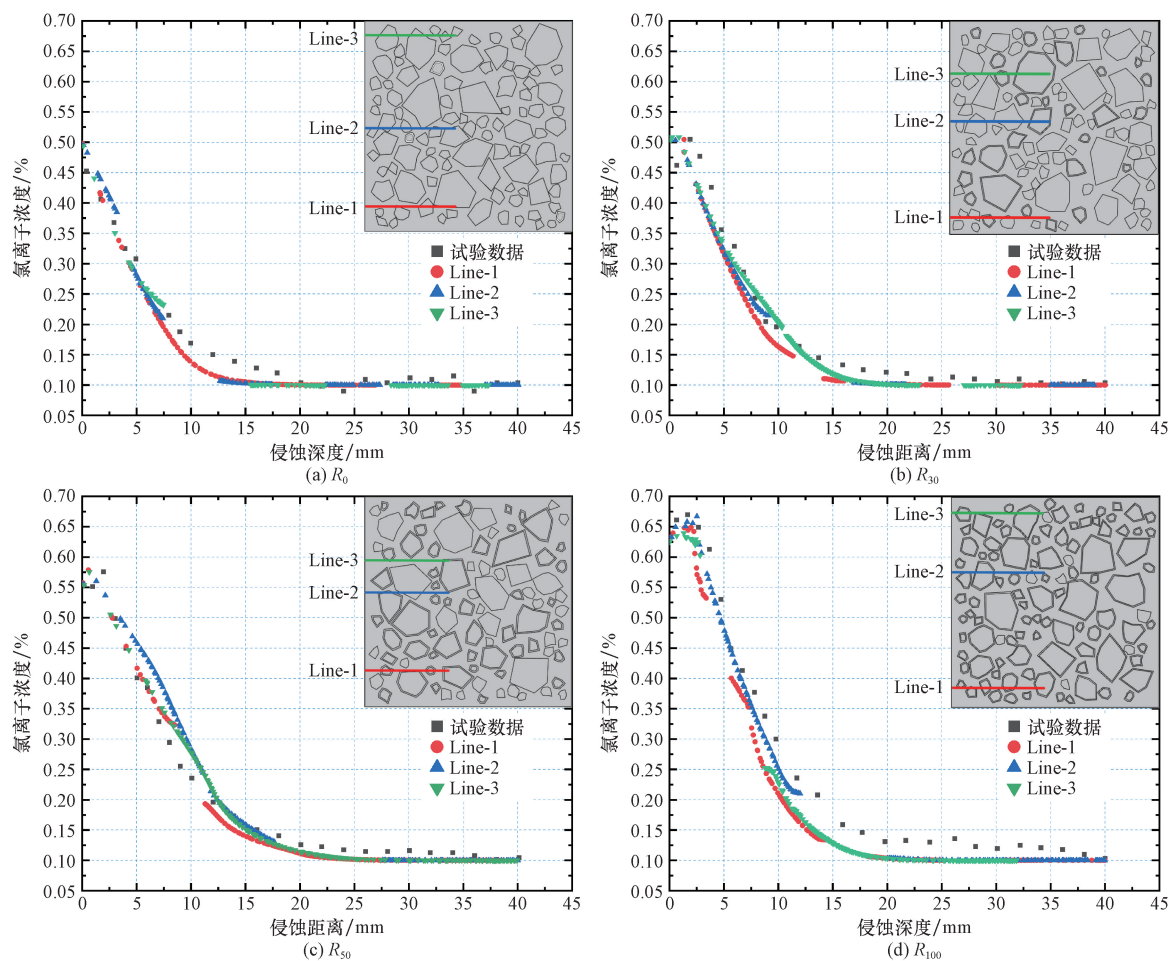


图3 干湿循环作用下氯离子扩散过程数值分析模拟结果与试验数据对比
Fig. 3 The numerical analysis simulation results of chloride ion diffusion under dry-wet cycling conditions compared with experimental data

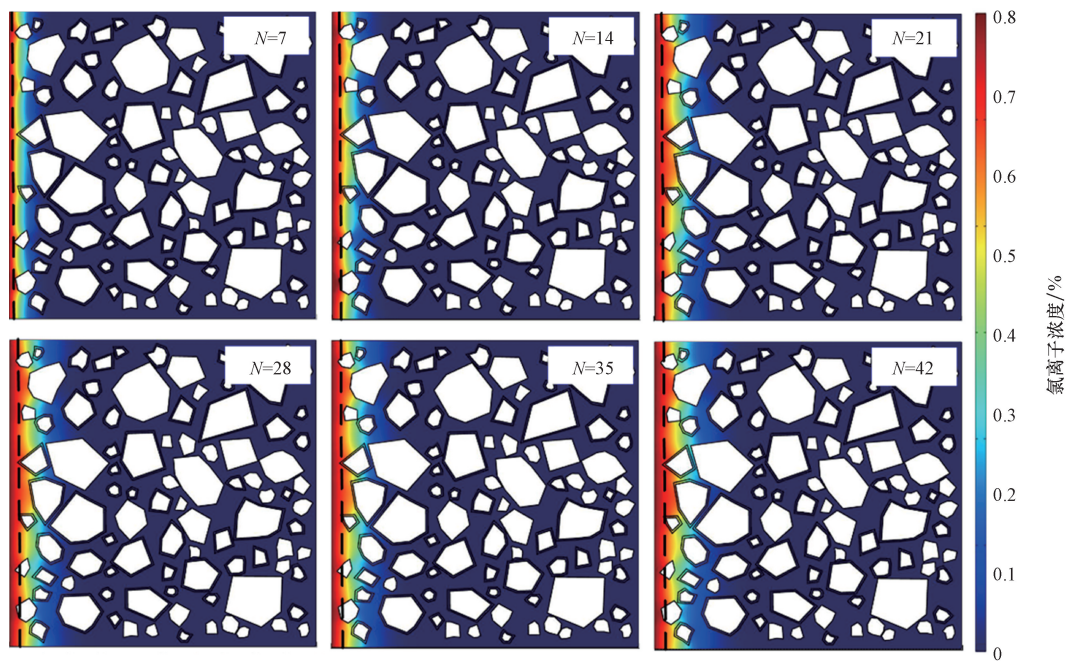


图4 不同干湿循环周期下再生混凝土中氯离子浓度分布
Fig. 4 Chloride ion concentration distribution in recycled concrete under different dry-wet cycling periods

生混凝土中氯离子浓度分布。当干湿循环周期增加时,氯离子扩散深度以及边界处氯离子浓度显著升高。沿侵蚀截面的散点图如图5所示,对流作用引起RAC表层4 mm左右的氯离子浓度出现峰值现象,而在深度10 mm左右氯离子浓度趋于稳定;而在再生混凝土内部主要发生扩散作用,同时随着干湿循环周期的增大,氯离子峰值浓度和最大扩散深度也进一步增大。这主要是由于材料表面随着水分传输的变化,孔隙溶液中的氯离子也会不断迁移,干燥次数越长,混凝土表层水分含量越小,而氯离子的扩散往往滞后于水分传输,故水分蒸发,氯离子聚集在再生混凝土表层,导致表层氯离子峰值增大,而湿润过程中,位于表层的高浓度氯离子进一步侵蚀,导致处于扩散区的氯离子浓度也相应提高。

4.2 ITZ 渗透率对氯离子扩散的影响

由于再生混凝土具有复杂的非均质性,氯离子在不同相中的传输能力也各有差异。相关研究表明,ITZ扩散系数与水灰比、制备工艺以及养护条件等因素相关^[10]。ITZ由于壁效应^[30],水泥水化反应不充分,会造成高孔隙率的同时影响氯离子扩散系数,从而导致RAC相对于普通混凝土耐久性更差。干湿循环会导致氯离子在再生混凝土中的扩散过程发生变化。在干燥期间,氯离子扩散速率可能会加快,因为孔隙率的增大使得氯离子更容易通过。而在湿润期间,水分的填充作用可能会减缓氯离子的扩散速率。因此,针对不同的ITZ中氯离子扩散系数,研究干湿循环下氯离子浓度的分布,对再生混凝土耐久性的评估非常重要。

根据现有研究,旧砂浆的渗透率可取为新砂浆的2.5倍,ITZ扩散系数(D_{ITZ})是新砂浆(D_{cp})的1.3~

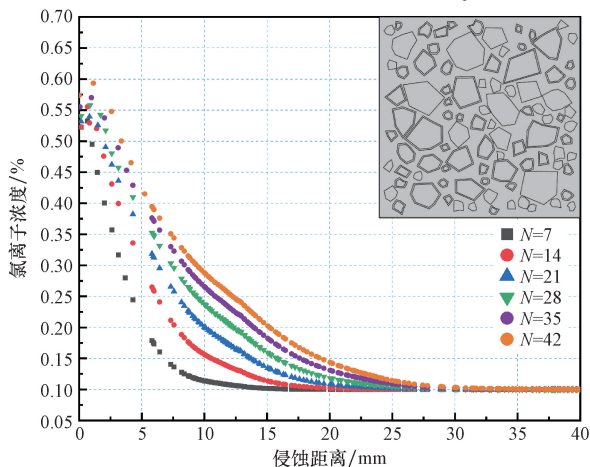


图5 不同干湿循环下侵蚀截面氯离子浓度

Fig. 5 Chloride ion concentration in erosion cross-sections under different dry-wet cycles

16.2 倍的范围内变化^[18]。天然骨料较为致密,渗透系数非常小,假设天然骨料渗透系数为 $0 \text{ m}^2/\text{s}$,采用相同干湿循环次数的5类 D_{ITZ}/D_{cp} ,分别为1、2、8、12和16。骨料体积分数50%,取代率50%,相关参数见3.2节,干湿循环14次。取模型四处截线观察氯离子浓度变化。

图6为干湿循环作用下不同ITZ相对扩散系数的再生混凝土中氯离子浓度-深度曲线。由图可知,随着 D_{ITZ}/D_{cp} 的增加,混凝土中氯离子的浓度和侵蚀深度明显增加,距离边界12.5 mm处浓度增加最明显,故 D_{ITZ} 增大可以促进氯离子的扩散,而随着干湿循环次数的增加,侵蚀深度也进一步增大。当 D_{ITZ}/D_{cp} 每增大一倍时,距边界12.5 mm处氯离子浓度增加值,但增速递减。

4.3 水灰比对氯离子扩散的影响

水灰比是再生混凝土性能的一个重要参数,对再生混凝土中氯离子的扩散有显著影响。水灰比越大,水泥基质和ITZ中孔隙率也越大,水分通过较多的连通孔进入再生混凝土内部,同理氯离子可以通过孔隙渗透进入再生混凝土内部,使得再生混凝土内水的饱和度上升,氯离子含量增加,进一步导致再生混凝土劣化。根据Liu等^[31]的模拟中选用的三类水灰比(0.25、0.4、0.55)分析RAC中不同水灰比对氯离子传输的影响,其余参数选用见3.2节。取3处截线(Line-1、Line-2、Line-3)计算的氯离子浓度如图7所示。

从图7可以明显看出,具有相同干湿循环周期的RAC中,扩散区在相同深度位置,氯离子含量随着水灰比的增加而增大,而位于对流区的氯离子含量变化不明显,这是由于对流区内骨料体积分数较高,扩散区小,相对较高孔隙率的ITZ对氯离子传输的影响小,此时水灰比主要影响新砂浆基质中的孔隙率^[32]。在扩散区前端(5~15 mm)处,具有低水灰比的再生混凝土中氯离子浓度变化最明显,即随着水灰比增加,相同深度下RAC中氯离子含量的差异较小。造成此类现象的原因是当水灰比增加到0.4以上时,RAC都具有相对较高的毛细孔隙度以及孔隙连通性,因此,RAC中氯离子的扩散不会受到很大的影响。

4.4 再生粗骨料体积分数对氯离子扩散的影响

RAC中骨料体积分数对氯离子传输有重要影响,骨料体积分数是指混凝土中骨料(如砂、石子等)的体积与总体积之比,体积分数的变化会直接影响到RAC性能。在干湿循环条件下,ITZ和旧砂浆区为氯离子的传输提供了更多通道,本节参考金^[10]的模拟方案,通过6类骨料体积分数 $V(0\%、$

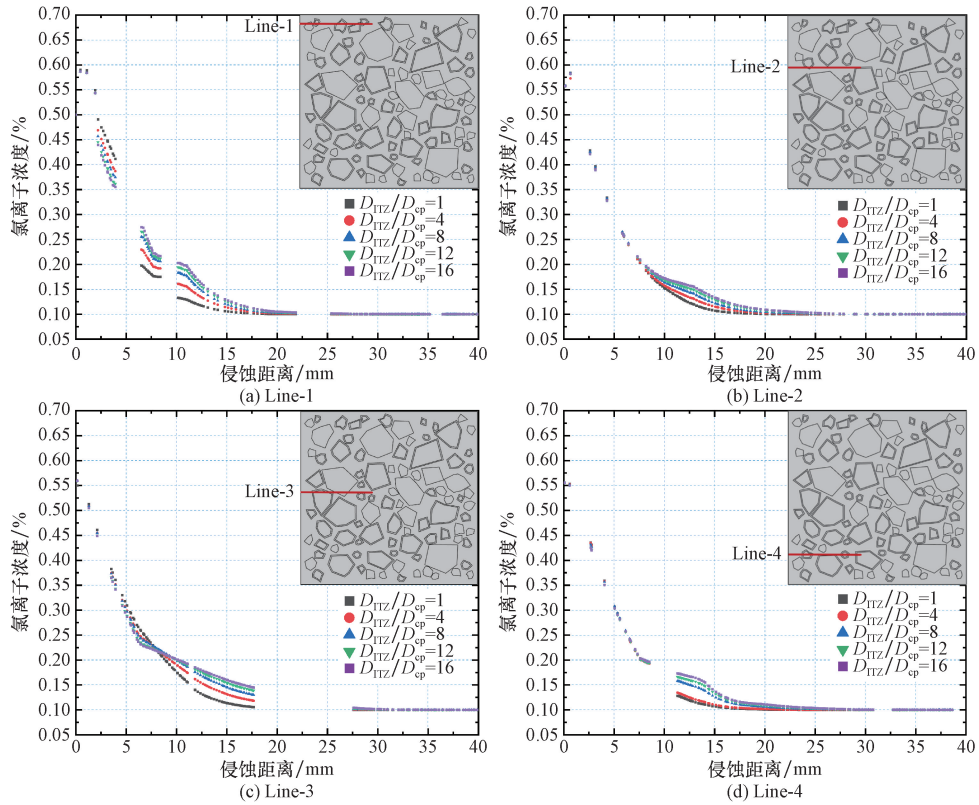


图6 干湿循环作用下不同 ITZ 渗透率的再生混凝土中氯离子浓度-深度曲线

Fig. 6 Chloride ion concentration-depth profile in regenerated concrete with different ITZ relative diffusion coefficients under wet-dry cycling conditions

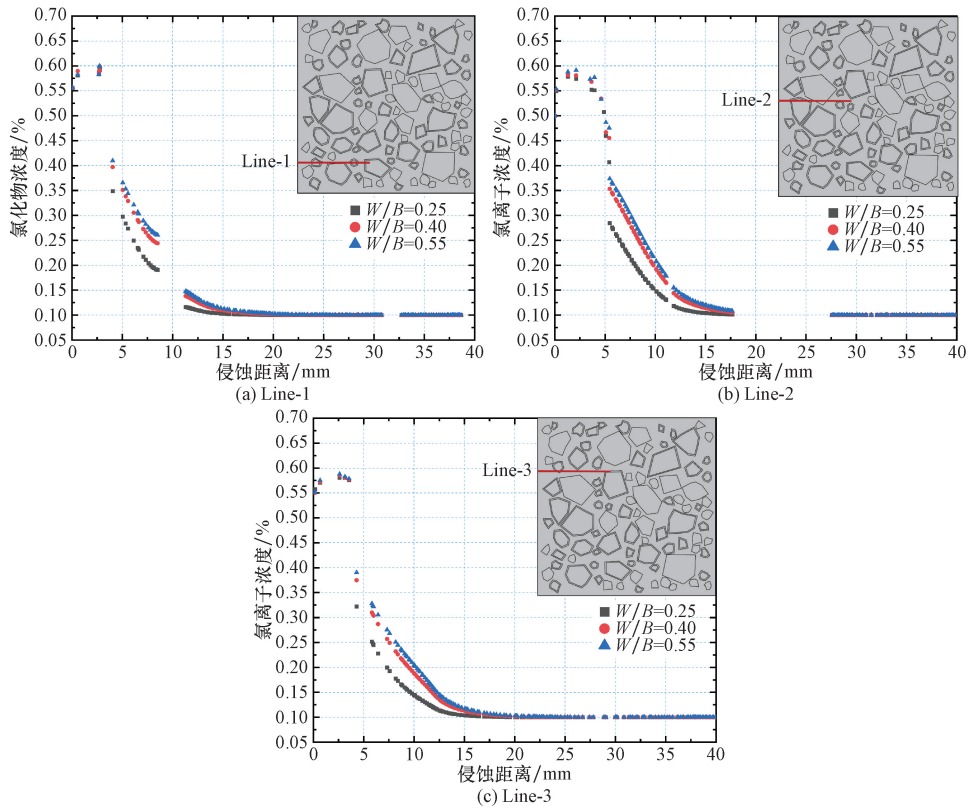


图7 干湿循环作用下不同水灰比的再生混凝土中氯离子浓度-深度曲线

Fig. 7 Chloride ion concentration-depth curve in regenerated concrete with different water-cement ratios under wet-dry cycling

10%、20%、30%、40%、50%)全取代模型(再生骨料取代率100%)研究骨料体积分数对干湿循环下氯离子传输的影响,其余参数见3.2节。再生粗骨料体积分数对RAC中氯离子传输的影响如图8所示。

可以看出,再生粗骨料体积分数的增加会加快氯离子的渗透,导致氯离子扩散深度显著增高,扩散深度依次增加4.5%、8.0%、11.0%、17.5%、

22.4%。这是由于再生骨料外附着着渗透性很强的ITZ区域和旧砂浆。虽然骨料体积分数的增加会减少RAC中水泥砂浆含量,从而降低RAC孔隙度,较低的孔隙度会减少氯离子渗透的通道,但是,更高的骨料体积分数会增大新旧ITZ和旧砂浆的面积,而ITZ和旧砂浆区存在微观裂缝,随着骨料体积分数的增加,这些裂缝提供了在干湿循环下更多的氯离子传输途径,进一步造成氯离子的腐蚀。

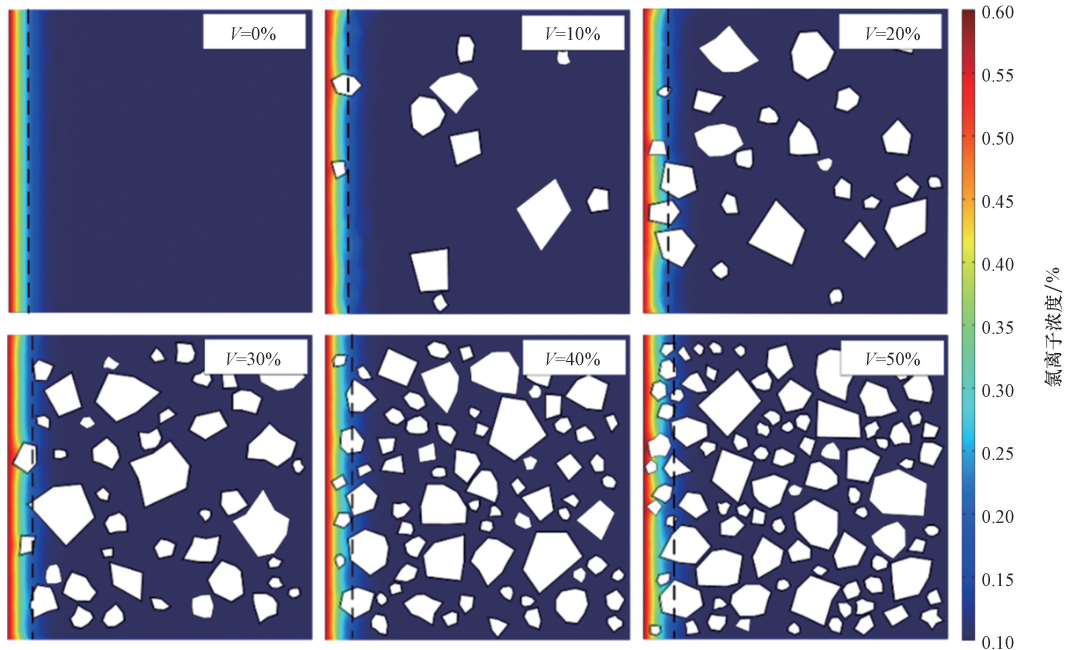


图8 干湿循环作用下不同再生骨料体积分数的再生混凝土中氯离子浓度分布
Fig. 8 Chloride ion concentration distribution in recycled concrete with different volume fractions of recycled aggregates under dry-wet cycling action

5 结论

利用Cramer法则对交点坐标进行二次判定,向内扩建建模,从而提升了RAC细观随机凸多边形生成速度、增大了投放率。将RAC模型数值结果与试验结果对比,均与试验结果吻合较好,证明该RAC数值模型能有效预测干湿循环下RAC中氯离子的传输行为。通过模拟得出结论如下。

(1)干湿循环次数的增加,会提高氯离子对流区峰值点,42次循环内峰值位于扩散边界4 mm处,扩散深度也同样增加。

(2)相同干湿循环次数下,扩散区前端氯离子浓度随着RAC中 D_{ITZ}/D_{cp} 比值的增大而增加,对流区由于骨料含量较低导致该现象不明显。混凝土中氯离子的浓度和侵蚀深度明显增加,距离边界12.5 mm处影响最明显。

(3)氯离子含量随着水灰比的增加而增大,当水灰比从0.4增大到0.5时,ITZ对氯离子传输的

影响小,在扩散区前端(5~15 mm)处低水灰比RAC氯离子浓度变化最明显。

(4)再生粗骨料体积分数的增加会加快氯离子的渗透,进一步致使氯离子扩散深度显著增高。体积分数从0%到50%,依次增大10%。扩散深度依次增加4.5%、8.0%、11.0%、17.5%、22.4%。

参 考 文 献

- [1] Da Costa A, Fenaux M, Fernández J, et al. Modelling of chloride penetration into non-saturated concrete: case study application for real marine offshore structures[J]. Construction and Building Materials, 2013, 43: 217-224.
- [2] 海然, 李丹丹, 惠存, 等. 流动性高强再生混凝土工作性和力学性能试验研究[J]. 科学技术与工程, 2018, 18(19): 256-260. Hai Ran, Li Dandan, Hui Cun, et al. Experimental study on workability and mechanical performance of liquid high strength recycled concrete [J]. Science Technology and Engineering, 2018, 18(19): 256-260.
- [3] 牛建刚, 边钰, 谢承斌. 再生混凝土与锈蚀钢筋界面粘结性能[J]. 科学技术与工程, 2020, 20(19): 7845-7851.

- Niu Jiangang, Bian Yu, Xie Chengbin. Interfacial bond properties between recycled concrete and corroded steel bar [J]. *Science Technology and Engineering*, 2020, 20(19): 7845-7851.
- [4] Mahmood W, Ayub T. Mechanical properties and corrosion resistance of recycled aggregate concrete exposed to accelerated and natural marine environment [J]. *Journal of Building Engineering*, 2023, 66: 105867.
- [5] 王祥, 范宏, 苗润阳, 等. 基于混凝土真实三维模型的氯离子传输微观数值模拟 [J]. *科学技术与工程*, 2023, 23(7): 2993-3000.
Wang Xiang, Fan Hong, Miao Runyang, et al. Numerical simulation of chloride ion transport in fine scale based on realistic 3D model of concrete [J]. *Science Technology and Engineering*, 2023, 23(7): 2993-3000.
- [6] Hu Z, Mao L, Xia J, et al. Five-phase modelling for effective diffusion coefficient of chlorides in recycled concrete [J]. *Magazine of Concrete Research*, 2018, 70(11): 583-594.
- [7] Ying J, Xiao J, Shen L, et al. Five-phase composite sphere model for chloride diffusivity prediction of recycled aggregate concrete [J]. *Magazine of Concrete Research*, 2013, 65(9): 573-588.
- [8] 胡志, 毛丽璇, 刘清风. 再生骨料混凝土抗氯离子侵蚀的多相数值研究 [J]. *硅酸盐通报*, 2020, 39(8): 2425-2432.
Hu Zhi, Mao Lixuan, Liu Qingfeng. Multi-phase numerical analysis of chloride resistance of recycled aggregate concrete [J]. *Bulletin of the Chinese Ceramic Society*, 2020, 39(8): 2425-2432.
- [9] Xiao J, Ying J, Shen L, et al. FEM simulation of chloride diffusion in modeled recycled aggregate concrete [J]. *Construction and Building Materials*, 2012, 29: 12-23.
- [10] 金立兵, 余化龙, 王振清, 等. 再生混凝土抗氯离子渗透的五相微观数值模拟 [J]. *郑州大学学报(工学版)*, 2022, 43(1): 83-89.
Jin Libing, Yu Hualong, Wang Zhenping, et al. Five-phase mesoscopic numerical simulation of chloride permeation resistance in recycled aggregate concrete [J]. *Journal of Zhengzhou University (Engineering Science)*, 2022, 43(1): 83-89.
- [11] Bažant Z P, Najjar L J. Nonlinear water diffusion in nonsaturated concrete [J]. *Matériaux et Construction*, 1972, 5: 3-20.
- [12] Wong S F, Wee T H, Swaddiwudhipong S, et al. Study of water movement in concrete [J]. *Magazine of Concrete Research*, 2001, 53(3): 205-220.
- [13] Lin G, Liu Y H. Modeling chloride penetration into concrete under drying-wetting cycles [J]. *Wuhan Polytechnic University*, 2009, 28(3): 68-71.
- [14] Achour M, Amiri O, Bignonnet F, et al. Influence of carbonation on ionic transport in unsaturated concrete: evolution of porosity and prediction of service life [J]. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 2019, 23(5): 593-608.
- [15] 延永东. 氯离子在损伤及开裂混凝土内的运输机理及作用效应 [D]. 杭州: 浙江大学, 2011.
Yan Yongdong. Transportation of chloride ions in damaged and cracked concrete and its action [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2011.
- [16] Chen D, Feng Y, Shen J, et al. Experimental and simulation study on chloride diffusion in unsaturated concrete under the coupled effect of carbonation and loading [J]. *Structures*, 2022, 43: 1356-1368.
- [17] Ying J, Xiao J, Shen L, et al. Five-phase composite sphere model for chloride diffusivity prediction of recycled aggregate concrete [J]. *Magazine of Concrete Research*, 2013, 65(9): 573-588.
- [18] Pivonka P, Hellmich C, Smith D. Microscopic effects on chloride diffusivity of cement pastes: a scale-transition analysis [J]. *Cement and Concrete Research*, 2004, 34(12): 2251-2260.
- [19] Zheng J, Zhou X. Analytical solution for the chloride diffusivity of hardened cement paste [J]. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 2008, 20(5): 384-391.
- [20] Fraj A B, Bonnet S, Khelidj A. New approach for coupled chloride/moisture transport in non-saturated concrete with and without slag [J]. *Construction and Building Materials*, 2012, 35: 761-771.
- [21] Zhang Q, Gu X, Zhang W, et al. Model on capillary pressure-saturation relationship for concrete [J]. *Journal of Tong Ji University*, 2012, 40(12): 1753-1759.
- [22] Wei J, Gui Z H, Wang Y L. Modeling on predicting steel corrosion rate in concrete [J]. *Journal of Wuhan University of Technology*, 2005, 27(6): 45-47.
- [23] Yuan Q, Shi C, De Schutter G, et al. Chloride binding of cement-based materials subjected to external chloride environment: a review [J]. *Construction and Building Materials*, 2009, 23(1): 1-13.
- [24] Martín-Pérez B, Zibara H, Hooton R D, et al. A study of the effect of chloride binding on service life predictions [J]. *Cement and Concrete Research*, 2000, 30(8): 1215-1223.
- [25] Luping T, Nilsson L O. Chloride binding capacity and binding isotherms of OPC pastes and mortars [J]. *Cement and Concrete Research*, 1993, 23(2): 247-253.
- [26] Elsharief A, Cohen M D, Olek J. Influence of aggregate size, water cement ratio and age on the microstructure of the interfacial transition zone [J]. *Cement and Concrete Research*, 2003, 33(11): 1837-1849.
- [27] 中华人民共和国交通运输部. 水运工程混凝土试验检测技术规范: JTS/T 236—2019 [S]. 北京: 人民交通出版社, 2019.
Ministry of Transport of the People's Republic of China. Technical specification for concrete test and testing in water transport engineering: JTS/T 236—2019 [S]. Beijing: People's Communications Press, 2019.
- [28] Mainguy M, Coussy O, Baroghel-Bouny V. Role of air pressure in drying of weakly permeable materials [J]. *Journal of Engineering Mechanics*, 2001, 127(6): 582-592.
- [29] 鲍玖文, 王云伟, 牟新宇, 等. 持压荷载与干湿循环作用下再生混凝土氯盐侵蚀行为 [J]. *复合材料学报*, 2023, 40(2): 1015-1024.
Bao Jiuwen, Wang Yunwei, Mou Xinyu, et al. Chloride ingress behavior of recycled aggregate concrete subjected to sustained compressive loading and drying-wetting cycles [J]. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 2023, 40(2): 1015-1024.
- [30] Cao T N, Zhang L J, Sun G W, et al. Simulation of chloride ion transport in concrete under the coupled effects of a bending load and drying-wetting cycles [J]. *Construction and Building Materials*, 2020, 241: 118045.
- [31] Liu Z, Wang Y, Wang J, et al. Experiment and simulation of chloride ion transport and binding in concrete under the coupling of diffusion and convection [J]. *Journal of Building Engineering*, 2022, 45: 103610.
- [32] 刘晶, 陈宣东, 虞爱平, 等. 再生混凝土氯离子扩散多相微观数值模拟 [J]. *中国腐蚀与防护学报*, 2023, 43(5): 1111-1118.
Liu Jing, Chen Xuandong, Yu Aiping, et al. Multi-phase mesoscopic numerical simulation of chloride ion diffusion in recycled aggregate concrete [J]. *Journal of Chinese Society for Corrosion and Protection*, 2023, 43(5): 1111-1118.