

DOI :10.3880/j.issn.1006-7647.2009.06.004

考虑骨料形状时混凝土氯离子扩散系数预测的数值方法

彭国军,郑建军,周颖琼

(浙江工业大学建筑工程学院,浙江 杭州 310014)

摘要 分析骨料形状对混凝土氯离子扩散系数的影响,提出考虑骨料形状时混凝土氯离子扩散系数预测的数值方法。结合计算机模拟技术和蒙特卡洛数值积分算法,获得了八边形骨料混凝土界面面积百分数,通过与 2 组实验结果比较,证实了该预测方法的有效性。

关键词 混凝土;骨料形状;氯离子扩散系数;界面面积百分数;有限元方法

中图分类号 :TU528.01 **文献标识码** :A **文章编号** :1006-7647(2009)06-0013-04

A numerical method for predicting the chloride diffusion coefficient of concrete with aggregate shape//PENG Guo-jun , ZHENG Jian-jun , ZHOU Ying-qiong / School of Civil Engineering and Architecture , Zhejiang University of Technology , Hangzhou 310014 , China)

Abstract :The effect of aggregate shape on the chloride diffusion coefficient of concrete is analyzed. A numerical method for predicting the chloride diffusion coefficient of concrete with aggregate shape is presented. By combining the computer simulation technique with the Monte-Carlo numerical integration algorithm , the area fraction of interfacial transition zone in concrete with octagonal aggregate particles is obtained. By comparing with two sets of experimental results , the validity of the proposed numerical method is verified.

Key words :concrete ; aggregate shape ; diffusion coefficient of chloride ions ; percentage of interfacial area ; finite element method

目前,人们普遍认为钢筋锈蚀是导致氯盐环境中混凝土结构性能早期劣化的主要原因,表现为混凝土表面大量开裂和剥落。为了预测钢筋开始锈蚀的时间,国内外学者在混凝土氯离子扩散系数确定方面做了大量的实验和理论研究。在实验方面,Delagrave 等^[1]采用不同材料和实验程序做了 2 个系列的试验,发现骨料改变了水泥石微观结构和传输性能,混凝土氯离子扩散系数随着骨料含量的增大而减小;Yang 等^[2]利用电化学技术获得了混凝土氯离子扩散系数,并应用数学拟合近似求得界面氯离子扩散系数;Care^[3]利用非稳态扩散试验调查了骨料对砂浆氯离子扩散系数的影响,发现骨料的加入不仅引入界面,而且还改变了水泥石的孔结构。在理论分析方面,通常将混凝土模拟成随机排列的球形骨料,而且每个骨料周围均包裹一等厚度的界面层^[4];Garboczi 等^[5]给出了当骨料含量较低时混凝土氯离子扩散系数的解析解,但该解析解的精度随着骨料含量的增大而降低,Zheng 等^[6]基于三相复合圆模型,导出了混凝土氯离子扩散系数的解析解,并讨论了界面厚度、最大骨料直径、界面氯离子扩散系数

和骨料级配对混凝土氯离子扩散系数的影响。在以上理论分析中,均将骨料模拟成球形或圆形颗粒,与实际骨料形状存在一定差别,为此,本文将骨料模拟成八边形,分析骨料形状对混凝土氯离子扩散系数的影响。

1 八边形骨料构成和界面面积百分数计算

1.1 八边形骨料生成和分布

为了评价骨料形状对混凝土氯离子扩散系数的影响,笔者将骨料模拟成如图 1 所示的八边形,构造方法如下:首先画一个长轴为 d_b 、短轴为 d_a 的辅助椭圆,辅助椭圆与 x 轴和 y 轴分别相交于 w_1 和 w_2 ;再作一条平行于 w_1w_2 的辅助椭圆切线,该切线与过 w_1 点和 w_2 点的切线分别相交于 A_1 和 A_2 ;最后将线段 w_2A_2 、 A_2A_1 、 A_1w_1 经过 x 轴和 y 轴对称反射,即得到八边形骨料。骨料形状系数 k 用八边形骨料长轴 D_b 与短轴 D_a 的比值来表示,即

$$k = \frac{d_b}{d_a} \tag{1}$$

根据骨料级配、最小骨料直径、最大骨料直径、

基金项目:国家自然科学基金(50878196)、浙江省自然科学基金(Y107638)

作者简介:彭国军(1980—),男,浙江富阳人,讲师,硕士,从事混凝土基本理论与应用研究。E-mail:pgj2003@zjut.edu.cn

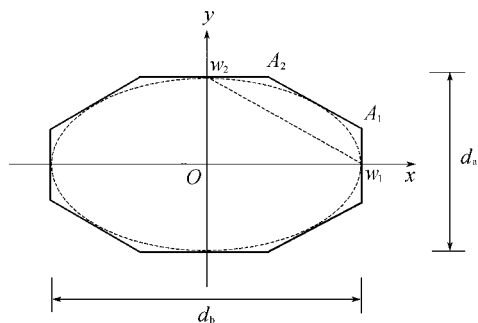


图1 八边形骨料的构成

骨料面积百分数和模拟区域的大小,可生成各种尺寸的骨料,并按尺寸从大到小依次排列^[7]。将骨料逐一分布到模拟区域中,在分布中,不仅每个骨料的中心坐标在模拟区域中服从均匀分布,而且骨料长轴与水平线之间的夹角在区间 $[0, 2\pi]$ 上也服从均匀分布,检查新分布的骨料是否与已经分布的骨料重叠,如果出现重叠,需要重新生成该骨料的坐标位置。为了消除模拟区域边界对骨料分布的影响,笔者引入周期性边界条件,即如果骨料与模拟区域边界相交,则将它反射到与模拟区域中心对称的对边界上。作为一个算例,考虑富勒级配骨料^[7],取边长为200 mm的正方形作为模拟区域,最小骨料直径 $d_{\min} = 2$ mm,最大骨料直径 $d_{\max} = 16$ mm,骨料面积百分数 $A_a = 75\%$ 、骨料形状系数 $k = 2$,模拟所得的骨料分布如图2所示。

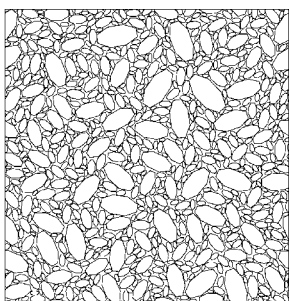


图2 骨料颗粒分布

1.2 八边形骨料界面面积百分数计算

现有的混凝土微观结构实验和理论分析表明,普通混凝土界面厚度 h 主要取决于水灰比和最大水泥颗粒直径,与骨料尺寸几乎无关^[2-3],因此,只要在每个骨料周围加上一厚度为 h 的界面层,就可以形成界面微观结构。由于骨料分布的随机性和相邻骨料界面重叠的复杂性,使得界面面积百分数的解析计算十分困难,为此,笔者采用蒙特卡洛数值积分方法,在模拟区域中分布 L 个服从均匀分布的随机点,计算落在界面内的随机点数 L_i ,则界面面积百分数 A_i 为

$$A_i = \frac{L_i}{L} \quad (2)$$

数值试验表明,当 $L = 1 \times 10^6$ 时,可以获得稳定的界面面积百分数。

为了验证本文数值方法的有效性,取 $k = 1$,这时八边形骨料与圆形骨料十分接近,而圆形骨料混凝土的界面面积百分数可以通过解析方法求解^[8]。取 $d_{\min} = 0.15$ mm, $d_{\max} = 16$ mm, $h = 0.03$ mm,分别考虑富勒级配(Fuller)和等体积级配(EVF)骨料^[7],计算所得界面面积百分数的数值解与解析解如图3所示。从图3可以看出,数值解与解析解吻合良好,对于富勒级配和等体积级配骨料,数值解与解析解之间的相关系数分别为0.9999和0.9997。

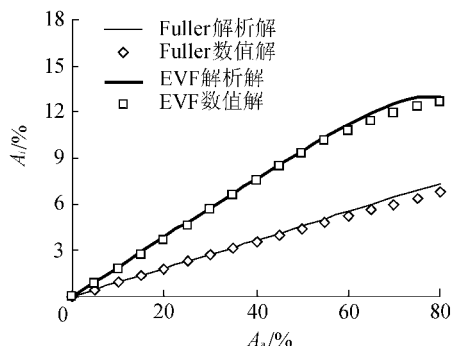


图3 数值结果与解析结果比较

2 八边形细胞单元的有限元分析

由于界面的存在,可以将混凝土看成是一种由骨料、界面和水泥石基体所组成的三相复合材料。在进行数值细观力学分析时,选用如图4所示的八边形细胞单元,对于给定的骨料面积百分数,根据上节所提出的数值方法确定界面面积百分数,则水泥石的界面面积百分数 A_m 为

$$A_m = 1 - A_a - A_i \quad (3)$$

有了 A_a 、 A_i 和 A_m ,就可以确定八边形细胞单元的相对尺寸。

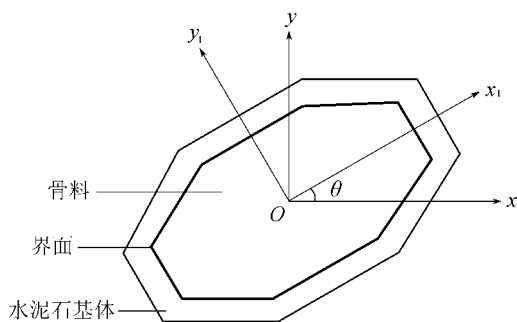


图4 八边形细胞单元

很显然,八边形细胞单元上的氯离子扩散属于正交各向异性问题,如果沿 x_1 方向的氯离子扩散系数为 D_1 ,沿 y_1 方向的氯离子扩散系数为 D_2 ,则当局部坐标与整体坐标成 θ 角时,利用坐标变换容易证明沿整体坐标 x 和 y 方向的氯离子扩散系数

$$\begin{bmatrix} D_x(\theta) & D_{xy}(\theta) \\ D_{yx}(\theta) & D_y(\theta) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \quad (4)$$

求解方程 4 得

$$\begin{cases} D_x(\theta) = D_1 \cos^2\theta + D_2 \sin^2\theta \\ D_y(\theta) = D_1 \sin^2\theta + D_2 \cos^2\theta \\ D_{xy}(\theta) = D_{yx}(\theta) = (D_1 - D_2) \cos\theta \sin\theta \end{cases} \quad (5)$$

对于实际的混凝土而言, θ 在区间 $[0, 2\pi]$ 上服从均匀分布, 所以, 混凝土氯离子扩散系数 D_{con} 就等于 $D_x(\theta)$ 或 $D_y(\theta)$ 的均值, 即

$$D_{con} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (D_1 \cos^2\theta + D_2 \sin^2\theta) d\theta = \frac{1}{2} (D_1 + D_2) \quad (6)$$

利用式 5 还可以证明, $D_{xy}(\theta)$ 和 $D_{yx}(\theta)$ 的均值均等于零, 表明混凝土各向同性。从式 6 可以看出, 只要求得八边形细胞单元 2 个主轴方向的氯离子扩散系数 D_1 和 D_2 , 即可得到混凝土氯离子扩散系数。

在计算 D_1 和 D_2 时, 先利用平面四边形单元对八边形细胞单元进行剖分, 然后在八边形细胞单元的边界上施加如下第一类线性形式的边界条件:

$$C(x_1, y_1) = x_1 + y_1 \quad (7)$$

式中: $C(x_1, y_1)$ 为氯离子浓度。根据上述边界条件, 通过有限元分析可求得八边形细胞单元区域中各点处在 x_1 和 y_1 方向的氯离子通量分别为 $J_x(x_1, y_1)$ 和 $J_y(x_1, y_1)$, 则 2 个方向平均氯离子通量为

$$\begin{cases} \bar{J}_1 = \frac{1}{S_0} \iint_{S_0} J_x(x_1, y_1) dx_1 dy_1 \\ \bar{J}_2 = \frac{1}{S_0} \iint_{S_0} J_y(x_1, y_1) dx_1 dy_1 \end{cases} \quad (8)$$

式中: S_0 为八边形细胞单元面积。由 Fick 第二定律可知 2 个主轴方向的氯离子扩散系数分别为

$$\begin{cases} D_1 = -\bar{J}_1 \\ D_2 = -\bar{J}_2 \end{cases} \quad (9)$$

3 实验验证和讨论

为了验证本文数值方法的有效性, 先选用 Yang 等^[2]的实验结果与数值解进行比较。在他们的实验中, 水灰比为 0.4, 水泥为美国材料实验协会所规定的 I 型水泥, 最大和最小骨料直径分别为 9.5 mm 和 0.15 mm, 骨料面积百分数分别为 0, 10%, 20%, 30% 和 40%。实验测得的混凝土氯离子扩散系数与骨料面积百分数之间的关系如图 5 所示。

在进行数值分析时, 需要确定界面厚度、

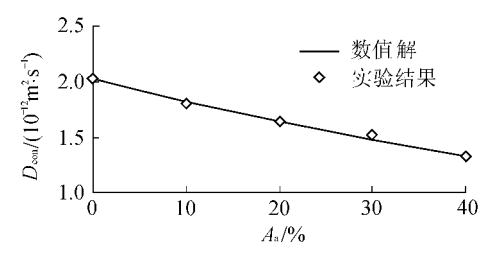


图 5 数值解与 Yang 的实验结果比较

骨料形状系数、水泥石基体和界面的氯离子扩散系数。界面厚度一般介于 0.01 ~ 0.05 mm 之间, 本文取其均值, 即 $h = 0.03 \text{ mm}$ 。文献 [9] 详细讨论了骨料形状系数, 并提供了 10 种典型骨料的形状参数、棱角性参数和表面纹理参数, 求得相应的八边形骨料形状系数 k 的均值为 2.07, 本文取 $k = 2.07$ 。相对于水泥石基体和界面来说, 骨料是不可渗透的, 因此, 骨料的氯离子扩散系数取为零。水泥石基体的氯离子扩散系数取骨料面积百分数为零时所测得的混凝土氯离子扩散系数, 即 $D_m = 2.030 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ 。目前直接测定界面的氯离子扩散系数还十分困难, 本文利用 $A_a = 40\%$ 时所测得的混凝土氯离子扩散系数进行数值反演, 求得界面的氯离子扩散系数 $D_i = 49.686 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ 。有了这些参数, 就可以应用本文提出的数值方法确定任意骨料面积百分数下混凝土氯离子扩散系数, 其结果如图 5 所示。从图 5 可以看出, 当骨料面积百分数 A_a 分别为 10%, 20% 和 30% 时, 本文数值解与实验结果之间的相对误差分别为 0.66%, 0.83% 和 2.93%。可见, 本文方法的有效性得到实验结果的初步证实。

为了进一步验证本文方法的有效性, 再选用 Care^[3]的砂浆实验结果进行比较。在他的实验中, 用同一种水泥浇铸 4 种不同的试件, 第 1 种是纯水泥石试件, 其余 3 种分别为砂浆试件 F、M 和 C。砂浆试件 F 和 C 的骨料面积百分数分别为 25% 和 50%, 而 M 的骨料面积百分数为 50%。砂浆试件 F 的最小和最大骨料直径分别为 0.315 mm 和 1 mm, 砂浆试件 M 的最小和最大骨料直径分别为 0.315 mm 和 2 mm, 砂浆试件 C 的最小和最大骨料直径分别为 2 mm 和 4 mm。所有试件的水灰比均为 0.45。根据纯水泥石试件的实测结果, 得到水泥石基体的氯离子扩散系数 $D_m = 5.65 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$ 。由于 3 种砂浆试件所用的水泥和水灰比相同, 因此, 它们的界面厚度和界面氯离子扩散系数也应该相同。取 $h = 0.03 \text{ mm}$, $k = 2.07$, 利用砂浆试件 M 在骨料面积百分数为 50% 时所测得的氯离子扩散系数进行数值反演, 求得界面的氯离子扩散系数 $D_i = 91.932 \times 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$, 再利用所求得的 D_i 值, 计算砂浆试件 F 和 C 的氯离子扩散系数, 其结果如图 6 所示。从图

6 可以看出,本文数值解与实验结果吻合良好。当骨料面积百分数为 25% 和 50% 时,对于砂浆试件 F,两者的相对误差分别为 5.6% 和 2.5%;对于砂浆试件 C,两者的相对误差分别为 6.1% 和 8.6%。可见,本文方法的有效性再一次得到实验证实。

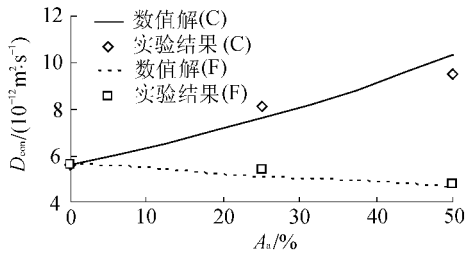


图 6 数值解与 Care 的实验结果比较

在本文数值方法的有效性得到实验验证后,有必要进一步量化影响混凝土氯离子扩散系数的各因素。考虑到 Zheng 等^[6]已经详细分析了界面厚度、最大骨料直径、界面氯离子扩散系数和骨料级配对混凝土氯离子扩散系数的影响,笔者着重考察骨料形状对混凝土氯离子扩散系数的影响。考虑 Yang 等^[2]实验中所用的骨料级配,取 $h = 0.03\text{ mm}$, $D_m = 2.030 \times 10^{-12}\text{ m}^2/\text{s}$, $D_i = 49.686 \times 10^{-12}\text{ m}^2/\text{s}$,骨料形状系数 k 分别取 1 2 和 3,计算结果如图 7 所示。从图 7 可以看出,对于给定的骨料面积百分数,混凝土氯离子扩散系数随着骨料形状系数的增大而减小,这可以解释如下:一方面,由于骨料是不可渗透的,在骨料面积百分数给定的情况下, k 值越大,氯离子的扩散路径越曲折;另一方面,在骨料级配、界面厚度和骨料面积百分数给定的情况下, k 值越大,界面面积百分数越小。这两方面的原因均导致混凝土氯离子扩散系数减小。从图 7 给出的数值结果可以进一步发现,当骨料形状系数从 1 增大到 3 时,骨料面积百分数为 20% 40% 60% 和 80% 时的混凝土氯离子扩散系数分别减小 12.9% 20.8% 23.7% 和 29.4%,因此,骨料形状对混凝土氯离子扩散系数的影响程度在 10% ~ 30% 之间。

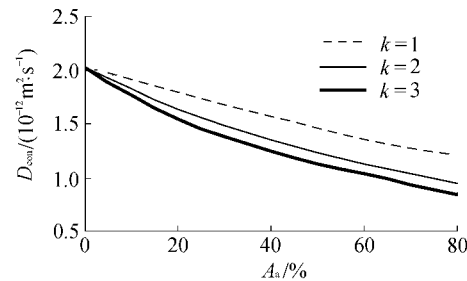


图 7 骨料形状对混凝土氯离子扩散系数的影响

4 结 论

a. 将混凝土细观结构模拟与蒙特卡洛数值积

分相结合,提出了八边形骨料界面面积百分数的计算方法。

b. 利用有限单元法提出了考虑骨料形状时混凝土氯离子扩散系数的数值预测方法。

c. 该数值预测方法的有效性得到了 2 组实验的证实。

d. 分析了骨料形状对混凝土氯离子扩散系数的影响,发现混凝土氯离子扩散系数随着骨料形状系数的增大而减小,其影响程度在 10% ~ 30% 之间。

参考文献:

[1] DELAGRAVE A ,BIGAS J P ,OLLIVIER J P ,et al. Influence of the interfacial zone on the chloride diffusivity of mortars [J]. Advanced Cement Based Materials ,1997 3 (3) :86-92.

[2] YANG Zhong-jia , SU Jin-jiang. Approximate migration coefficient of interfacial transition zone and the effect of the aggregate content on the migration coefficient of mortar [J]. Cement and Concrete Research 2002 32 (10) :1559-1565.

[3] CARE S. Influence of aggregate on chloride diffusion coefficient into mortar [J]. Cement and Concrete Research , 2003 33 (7) :1021-1028.

[4] GARBOCZI E J ,SCHWARTZ L M ,BENTZ D P. Modeling the influence of the interfacial zone on the DC electrical conductivity of mortar [J]. Advanced Cement Based Materials ,1995 2 (5) :169-181.

[5] GARBOCZI E J ,BENTZ D P. Analytical formulas for interfacial transition zone properties [J]. Advanced Cement Based Materials ,1997 3 (3) :99-108.

[6] ZHENG Jian-jun ,ZHOU Xin-zhu. Prediction of the chloride diffusion coefficient of concrete [J]. Materials and Structures , 2007 40 (7) :693-701.

[7] ZHENG Jian-jun , LI Chun-qing , ZHAO L Y. Aggregate distribution in concrete with wall effect [J]. Journal of Materials in Civil Engineering 2003 15 (5) :506-510.

[8] LU Bing-lin , TORQUATO S. Nearest-surface distribution functions for polydispersed particle systems [J]. Physical Review A ,1992 45 (8) :5530-5544.

[9] WANG Lin-bing , WANG Xing-ran ,MOHAMMAD L ,et al. Unified method to quantify aggregate shape angularity and texture using Fourier analysis [J]. Journal of Materials in Civil Engineering 2005 17 (5) :498-504.

(收稿日期 2009-03-26 编辑 张志琴)

