**文章编号:**1007-9629(2023)04-0383-06

# 粗骨料对混凝土氯离子扩散影响的模拟与试验

蔡栋兴1, 毕文彦2,\*, 管学茂1

(1.河南理工大学 材料科学与工程学院,河南 焦作 454003;2.河南理工大学 化学化工学院,河南 焦作 454003)

摘要:用数值模拟建立了三维随机骨料模型,分析了不同粗骨料形状、含量、粒径以及多粒径组合粗 骨料对混凝土氯离子扩散的影响,并结合快速氯离子迁移系数法进行了验证.结果表明:相同体积粗 骨料的形状特征参数越小,氯离子扩散受到的阻碍作用越明显;在一定浓度范围内,氯离子扩散系数 随着粗骨料含量的增加逐渐减小;当粗骨料体积分数确定时,氯离子扩散系数随着粗骨料粒径的增 加而减小;在相同体积分数下,氯离子扩散系数随着多粒径组合粗骨料粒径数的增加而增加. 关键词:氯离子扩散;数值模拟;粗骨料;快速氯离子迁移系数法

**中图分类号:**TU528.01 文献标志码:A **doi:**10.3969/j.issn.1007-9629.2023.04.007

## Simulation and Experiment of the Effect of Coarse Aggregate on Chloride Diffusion in Concrete

CAI Dongxing<sup>1</sup>, BI Wenyan<sup>2,\*</sup>, GUAN Xuemao<sup>1</sup>

School of Materials Science and Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454003, China;
 School of Chemistry and Chemical Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454003, China)

**Abstract:** A three-dimensional random aggregate model was established by numerical simulation to analyze the effects of different coarse aggregate shapes, contents, particle size and multiple particle size combinations on the chloride diffusion coefficient in concrete. The results were verified by the rapid chloride migration test. The results show that the smaller the shape parameter of the coarse aggregate in the same volume, the more signifacant the hindrance of chloride diffusion. Within a range of certain concentration, the chloride diffusion coefficient decreases gradually with increasing coarse aggregate content. The chloride diffusion coefficient decreases with the increasing of the coarse aggregate particle size for a certain volume fraction, and increases with the increasing of the number of particle sizes combined into coarse aggregates for the same volume fraction.

Key words: chloride diffusion; numerical simulation; coarse aggregate; rapid chloride migration test

由于钢筋锈蚀、冻融破坏以及侵蚀环境下的物 理-化学作用,导致混凝土结构耐久性破坏,其中氯离 子侵蚀造成的钢筋锈蚀是主要原因<sup>[1-3]</sup>.一些学者将混 凝土看作是由粗骨料、水泥砂浆和界面过渡区(ITZ) 3个部分组成的非均匀复合材料<sup>[4-5]</sup>,并对混凝土中氯 离子的扩散规律展开了研究.陈宣东等<sup>[6]</sup>研究了混凝 土内部氯离子浓度分布的影响因素.乔宏霞等<sup>[7]</sup>同时 考虑温度、孔隙率结合效应等多种影响因素,并结合 试验数据对氯离子传输过程进行模拟.周双喜等<sup>[8]</sup>、 李杰等<sup>[9]</sup>研究了不同骨料含量和ITZ体积对氯离子 在混凝土中扩散的影响.Yang等<sup>[10]</sup>发现氯离子在混 凝土中的传输过程有稀释效应、曲折效应和界面区效 应等,其中界面区效应促进氯离子在混凝土中的扩 散,而稀释效应和曲折效应阻碍氯离子的扩散.王元

收稿日期:2022-03-13;修订日期:2022-07-04

基金项目:国家自然科学基金资助项目(U1905216)

第一作者:蔡栋兴(1998—),男,河南开封人,河南理工大学硕士生. E-mail: caidongxing2022@163.com

通讯作者:毕文彦(1978—),女,河南南阳人,河南理工大学讲师,硕士生导师,博士.E-mail: biwenyan@hpu.edu.cn

战等<sup>[11]</sup>考虑了粗骨料体积分数和ITZ厚度等因素,并 对氯离子在混凝土中的扩散行为进行了模拟分析.

粗骨料形状对氯离子扩散有着重要影响,但目前对于粗骨料的形状和多粒径组合粗骨料对氯离子 扩散的影响研究较少.本文建立了三维随机骨料模型,通过试验研究和数值模拟相结合,从粗骨料的形状、含量、粒径以及多粒径组合粗骨料等方面,研究 了粗骨料对氯离子扩散的影响以及对应状态下混凝 土中氯离子的传输规律.

## 1 试验

### 1.1 原材料

水泥为P·O 42.5 普通硅酸盐水泥,其矿物组成 (质量分数,本文涉及的组成、比值等除特殊说明外 均为质量分数或质量比)见表1;细骨料为河砂;拌和 水为实验室自来水.为了更好地与数值模拟结果进 行对比,粗骨料采用形状规则的玻璃制品代替,玻璃 制品的形状有球体、立方体、长方体及圆柱体:球体 的直径 $D_s$ 为9.5、16.0、20.0、25.0、30.0、40.0 mm;立方 体的边长l为20 mm;长方体的长×宽×高为45 mm× 45 mm×4 mm;圆柱体的尺寸为 $\phi$ 50×4 mm.

表 1 水泥的矿物组成 Table 1 Mineral composition of cement

$C_3S$	$C_2S$	$C_3A$	$C_4AF$	Gypsum				
59.78	16.24	6.88	11.70	6.00				

按m(水泥):m(水):m(细骨料)=1.0:0.4:1.7 制备砂浆,取不同体积的砂浆与粗骨料混合制成混 凝土,其配合比见表2(表中  $\varphi_a$ 、n分别为粗骨料体积 分数、多粒径组合粗骨料的粒径数).所有粗骨料在混 凝土中均为水平放置,且其横截面与混凝土的上下 表面平行.为了研究粗骨料含量、形状、体积分数、粒 径以及多粒径组合粗骨料对氯离子扩散的影响,设 计了17组试件.

表 2 混凝土的配合比 Table 2 Mix proportions of concretes

				1	1				
Specimen —		Coarse aggregate composition			. ·	Coarse aggregate composition			
	Shape	n	$D_{\rm S}/{ m mm}$	$arphi_{ m a}/\sqrt[0]{ m 0}$	Specimen	Shape	n	$D_{\rm S}/{ m mm}$	$arphi_{ m a}/\sqrt[0]{_0}$
A0	Sphere	1	25.0	0	C1	Cube	1		25.00
A1	Sphere	1	25.0	2.00	C2	Rectangular	1		25.00
A2	Sphere	1	25.0	6.00	C3	Cylindrical	1		25.00
A3	Sphere	1	25.0	10.00	D1	Sphere	2	25.0	12.50
A4	Sphere	1	25.0	20.00	DI			20.0	12.50
A5	Sphere	1	25.0	25.00		Sphere	3	25.0	6.25
A6	Sphere	1	25.0	30.00	D2			20.0	6.25
Α7	Sphere	1	25.0	40.00				16.0	1.25
B1	Sphere	1	20.0	25.00		Sphere	4	25.0	6.25
B2	Sphere	1	30.0	25.00	D3			20.0	6.25
В3	Sphere	1	40.0	25.00				16.0	6.25
								9.5	6.25

## 1.2 试验方法

#### 1.2.1 快速氯离子迁移系数法(RCM)

根据 GB/T 50082—2009《普通混凝土长期性能 和耐久性能试验方法标准》,浇筑 $\phi$ 100×50 mm 的圆 柱体混凝土试件,标准养护24 h后拆模,养护至试验 龄期,RCM测试后将试件劈开.将2个试件的长方形 截面并排放置,方向向上,喷洒0.1 mol/L的AgNO<sub>3</sub> 溶液.根据显色区域深度,测得氯离子扩散深度 $X_d$ . RCM法得到的离子扩散系数 $D_{\text{RCM}}^{[12]}$ 为:

$$D_{\text{RCM}} = \frac{0.0239 \times (273 + T)L}{(U - 2)t} (X_{\text{d}} - 0.0238) \sqrt{\frac{(273 + T)LX_{\text{d}}}{U - 2}}$$
(1)

式中:T为阳极溶液初始温度和最终温度的平均 值,℃;L为混凝土试件的厚度,精确到0.1 mm;U为 施加的电压值,V;t为试验持续时间,h.

#### 1.2.2 数值模拟

氯离子在混凝土中的扩散<sup>[11]</sup>可用Fick第二定律 来表示,其三维形式的表达式为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x} + \frac{\partial^2 c}{\partial y} + \frac{\partial^2 c}{\partial z}\right) \tag{2}$$

式中:c为氯离子摩尔浓度;D为氯离子扩散系数;x、y 和z为三维空间的数轴.

研究氯离子在混凝土中的扩散时,主要是研究 氯离子的渗透深度,即z轴方向上的扩散,其边界条 件和初始条件可假定为:

$$c|_{z=0} = c_s \tag{3}$$

$$c_{z>0} = c_0 \tag{4}$$

$$c|_{z=\infty} = c_0 \tag{5}$$

式中:c<sub>0</sub>为初始混凝土结构中的氯离子浓度;c<sub>s</sub>为混 凝土表面的氯离子浓度.

对式(2)进行变换,得到:

$$c(h,t) = c_0 + (c_s + c_0) \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{h}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]$$
(6)

式中:c(h,t)为t时刻和h侵蚀深度氯离子的浓度;erf 为误差函数.

粗骨料对混凝土氯离子扩散有显著的影响,主要表现为:稀释效应和曲折效应,起到阻碍氯离子 扩散的作用;在粗骨料和砂浆之间存在ITZ,主要 表现为界面区效应,将提高氯离子的扩散速率<sup>[10]</sup>,因此可以将混凝土看作是由粗骨料、砂浆和ITZ组 成的三相非均匀复合材料<sup>[13]</sup>. 设置混凝土内部初始 氯离子浓度 $c_0$ =0 mol/L,粗骨料的氯离子扩散系数 为 0 m<sup>2</sup>/s,试验测得砂浆氯离子扩散系数 $D_{\text{RCM}}$ 为 2.4×10<sup>-11</sup>m<sup>2</sup>/s,ITZ的氯离子扩散系数 $D_{\text{ITZ}}$ 为砂浆 的 16 倍<sup>[14]</sup>,将 ITZ的厚度设定为 100  $\mu$ m<sup>[15]</sup>.

## 2 结果与分析

氯离子在混凝土中经过不同形状粗骨料的扩散 路径示意图见图1.由图1可见:氯离子在经过不同形 状的粗骨料时都是沿着骨料两侧扩散,球体表面光 滑,氯离子扩散更快,氯离子扩散系数更大;正方体、 长方体和圆柱体阻碍作用明显,氯离子扩散较慢.这 说明粗骨料的存在延长了氯离子的传输路径,发生 了明显的曲折效应,阻碍了氯离子在混凝土中的 扩散.





为了表征粗骨料的形状,将一些基本参数进行 组合,可以得到表示颗粒形状的特征参数:球形度S<sub>P</sub> 和形状因子 R.球形度<sup>[16]</sup>反映颗粒长、中、短3个轴尺 寸相近或等效的程度,形状因子是用来表征颗粒物 偏离球形的程度<sup>[17]</sup>.为更全面地表示粗骨料的形状特 征,综合考虑形状因子与球形度2个参数,引入了形 状特征参数 F. S<sub>P</sub>, R 、F 的计算式为:

$$S_{\rm P} = \sqrt[3]{\frac{SM}{L^2}} \tag{7}$$

$$R = \frac{4\pi A}{Q^2} \tag{8}$$

$$F = k_1 R + k_2 S_p \tag{9}$$

式中:L为外切长方体的最大尺寸长度;S为外切长 方体的最小尺寸长度;M为外切长方体的中间尺寸 长度;A为颗粒投影面积;Q为颗粒投影周长;k<sub>1</sub>、k<sub>2</sub>分 别为形状因子、球形度的系数.

对形状因子、球形度和形状特征参数分别与氯 离子扩散系数做相关性分析,得到相关度r为:

$$r = \frac{\sum (x - \overline{x})(y - \overline{y})}{\sqrt{\sum (x - \overline{x})^2 (y - \overline{y})^2}}$$
(10)

r的取值范围为[-1,1],且 |r| 越接近于1,表明 相关程度越高.

令  $k = k_1/k_2$ ,改变 k 值,得到相关度 r = k 值的关系,结果见图 2.由图 2 可见:当 k = 0.75 时,相关度达到最大值 0.978,说明混凝土的形状特征参数与氯离子扩散系数呈强相关.



混凝土氯离子扩散系数与球形度、形状因子、形状 特征参数之间的关系见图3.由图3可见,混凝土的氯离 子扩散系数随着粗骨料球形度和形状因子的增加整体



图 3 混凝土氯离子扩散系数与球形度、形状因子、形状特征参数之间的关系 Fig. 3 Relationship between chloride diffusion coefficient and  $S_P$ , R and F

均呈下降趋势.这是因为球形度和形状因子单个参数 不能准确地表征粗骨料的形状,如球体和正方体的球 形度都是1,但两者却是不同形状的粗骨料,而球体和 圆柱体的形状因子都为1,两者也是不同形状的粗骨 料.由图3还可见:不同形状的粗骨料对氯离子扩散系 数的影响不同;氯离子扩散系数试验结果与数值模拟 的变化趋势和数值对应性良好;随着粗骨料形状特征 参数的不断减小,混凝土氯离子扩散系数不断降低.

粗骨料体积分数、球体直径与混凝土氯离子扩 散系数的关系见图4.由图4可见:随着粗骨料体积分 数的增加,混凝土氯离子的扩散系数逐渐降低,此时 稀释效应占主导地位,氯离子在混凝土中传输的阻



图 4 粗骨料体积分数、球体直径与混凝土氯离子扩散系数的关系

Fig. 4 Relationship between  $\varphi_a$ ,  $D_s$  of coarse aggregate and chloride ion diffusion coefficient of concrete

碍作用增强;粗骨料球体直径由20mm增加到40mm时,混凝土氯离子扩散系数由水泥砂浆氯离子扩散 系数的86.7%降低至72.0%,可见随着粗骨料球体 直径的增大,曲折效应占主导地位,延长了氯离子传 输的路径,拉长了迁移时间,阻碍了氯离子在混凝土 中的扩散,导致了氯离子在混凝土中的扩散能力降低.

氯离子浓度随扩散深度的变化见图 5. 由图 5 可 见:氯离子浓度随着扩散深度的增大而逐渐减小;在 相同深度处,氯离子浓度随着粗骨料体积分数的增 加而逐渐减小.这是由于粗骨料具有阻断作用,阻碍 了氯离子在混凝土内部的运输,随着粗骨料体积分 数的增加,粗骨料的稀释效应占主导地位,抑制了氯 离子在混凝土中的扩散.





多粒径组合粗骨料的粒径数与氯离子扩散系数、ITZ体积的关系见图6.由图6可见,保持粗骨料的体积分数不变的情况下,随着组成粗骨料粒径数的增多,混凝土氯离子的扩散系数增加,同时ITZ体积逐渐增大,氯离子在混凝土中的扩散逐渐增强.这是由于较大粗骨料之间的孔隙容易被较小粗骨料所



图 6 多粒径组合粗骨料的粒径数与氯离子扩散系数、ITZ体积的关系

Fig. 6 Relationship between *n* and chloride diffusion coefficient and ITZ volume

占据,界面过渡区更易连接起来,加快了氯离子在混凝土中的迁移和传输.

## 3 结论

(1)随着粗骨料形状特征参数的减小,氯离子扩 散系数降低,粗骨料对氯离子在混凝土中扩散的阻碍作用与粗骨料形状呈强相关.

(2)随着球体粗骨料体积分数的增加,氯离子扩 散系数减小,此时稀释效应占主导地位,使氯离子在 混凝土中传输的阻碍作用增加.

(3)当粗骨料的体积分数为25.00%,其粒径 由20mm增加到40mm时,混凝土的氯离子扩散 系数由水泥砂浆氯离子扩散系数的86.7%降低到 72.0%,此时曲折效应占主导地位,粗骨料粒径的 增大阻碍了氯离子在混凝土中的传输;随着多粒径 组合粗骨料粒径数的增加,粗骨料对氯离子扩散的 促进作用增强.

(4)建立了三维随机粗骨料模型,数值模拟结果与试验结果的变化趋势和数值对应性良好,验证了通过数值模拟研究氯离子扩散的合理性.

## 参考文献:

- [1] 杨燕,谭康豪,覃英宏.混凝土内氯离子扩散影响因素的研究 综述[J]. 材料导报, 2021, 35(13):13109-13118.
   YANG Yan, TAN Kanghao, QIN Yinghong. Review of research on the influencing factors of chloride ion diffusion in concrete[J].
   Materials Reports, 2021, 35(13):13109-13118.(in Chinese)
- [2] 王胜年,曾俊杰,范志宏.基于长期暴露试验的海工高性能混凝土耐久性分析[J].土木工程学报,2021,54(10):82-89.
   WANG Shengnian, ZENG Junjie, FAN Zhihong. Analysis on durability of marine HPC based on long-term exposure experiment
   [J]. China Civil Engineering Journal, 2021, 54(10):82-89.(in Chinese)
- [3] 金伟良,赵羽习. 混凝土结构耐久性研究的回顾与展望[J]. 浙 江大学学报(工学版), 2002, 36(4):371-380, 403.
  JIN Weiliang, ZHAO Yuxi. State-of-the-art on durability of concrete structures [J]. Journal of Zhejiang University (Engineering Science), 2002, 36(4):371-380, 403.(in Chinese)
- [4] 王立成,王吉忠. 混凝土中氯离子扩散过程的细观数值模拟研究[J]. 建筑结构学报, 2008, 29(增刊1):192-196.
  WANG Licheng, WANG Jizhong. Mesoscopic simulation for chloride diffusion in concrete[J]. Journal of Building Structures, 2008, 29(Suppl 1):192-196.(in Chinese)
- [5] SHAFIKHANI M, CHIDIAC S E. A holistic model for cement paste and concrete chloride diffusion coefficient[J]. Cement and Concrete Research, 2020, 133:106049.
- [6] 陈宣东,刘光焰,虞爱平,等.基于二维混凝土随机细观模型氯 离子扩散数值模拟[J].材料科学与工程学报,2020,38(4):669-673.
   CHEN Xuandong, LIU Guangyan, YU Aiping, et al. Numerical

simulation of chloride diffusion based on 2D concrete random mesoscopic model [J]. Journal of Materials Science and Engineering, 2020, 38(4):669-673.(in Chinese)

- [7] 乔宏霞,乔国斌,路承功.混凝土中氯离子传输模拟及速率分析[J].华中科技大学学报(自然科学版),2022,50(2):19-25.
   QIAO Hongxia, QIAO Guobin, LU Chenggong. Simulation and velocity analysis of chloride ion transport in concrete [J]. Journal of Huazhong University of Science and Technology (Natural Science), 2022, 50(2):19-25. (in Chinese)
- [8] 周双喜,韩震,魏星,等.骨料含量和界面区体积对混凝土氯离 子扩散性能的影响[J].建筑材料学报,2018,21(3):351-357. ZHOU Shuangxi, HAN Zhen, WEI Xing, et al. Influence of aggregate contents and volume of interfacial transition zone on chloride ion diffusion properties of concrete[J]. Journal of Building Materials, 2018, 21(3):351-357.(in Chinese)
- [9] 李杰,孔祥习.混凝土氯离子扩散性能影响试验等效数值模拟
   [J].水利水电技术,2018,49(9):184-190.
   LI Jie, KONG Xiangxi. Equivalent numerical simulation on experiment of influence from diffusion performance of chloride ion in concrete[J]. Water Resources and Hydropower Engineering, 2018,49(9):184-190.(in Chinese)
- [10] YANG C C, SU J K. Approximate migration coefficient of interfacial transition zone and the effect of aggregate content on the migration coefficient of mortar [J]. Cement and Concrete Research, 2002, 32(10):1559-1565.
- [11] 王元战, 吕彦伟, 龙俞辰, 等. 粗骨料对混凝土界面过渡区氯 离子扩散性能影响[J]. 海洋工程, 2018, 36(2):73-82.
   WANG Yuanzhan, LÜ Yanwei, LONG Yuchen, et al. Effect

of coarse aggregate on chloride diffusion properties in the interfacial transition zone of concrete[J]. The Ocean Engineering, 2018, 36(2):73-82.(in Chinese)

- [12] 杨钱荣,朱蓓蓉.混凝土渗透性的测试方法及影响因素[J].低 温建筑技术,2003(5):7-10.
  YANG Qianrong, ZHU Beirong. Testing methods on the permeability and influence factors of permeability of concrete[J]. Low Temperature Architecture Technology, 2003(5):7-10.(in Chinese)
  [13] 田野,纪豪栋,田卒士,等.混凝土中氯盐传输的三维细观模
  - 型[J]. 建筑材料学报, 2020, 23(2):286-291. TIAN Ye, JI Haodong, TIAN Zushi, et al. 3D Mesoscopic model for chloride transport in concrete[J]. Journal of Building Materials, 2020, 23(2):286-291.(in Chinese)
- [14] YANG C C. Effect of the interfacial transition zone on the transport and the elastic properties of mortar [J]. Magazine of Concrete Research, 2003, 55(4):305-312.
- BASHEER L, KROPP J, CLELAND D J. Assessment of the durability of concrete from its permeation properties: A review[J].
   Construction and Building Materials, 2001, 15(2):93-103.
- [16] 汪超,张同生,谢晓庚,等.基于骨料球形度的透水混凝土配合比设计方法[J].建筑材料学报,2022,25(3):235-241.
  WANG Chao, ZHANG Tongsheng, XIE Xiaogeng, et al. Mix proportion design method of pervious concrete based on aggregate sphericity [J]. Journal of Building Materials, 2022, 25(3): 235-241.(in Chinese)
- [17] NAMBIAR E K K, RAMAMURTHY K. Air-void characterisation of foam concrete [J]. Cement and Concrete Research, 2007, 37(2):221-230.

#### (上接第360页)

2013. (in Chinese)

- [19] 马昆林,龙广成,谢友均,等.橡胶颗粒对自密实混凝土性能的影响[J].硅酸盐学报,2014,42(8):966-973.
  MA Kunlin, LONG Guangcheng, XIE Youjun, et al. Effect of rubber particles on properties of self-compacting concrete[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2014, 42(8):966-973. (in Chinese)
- [20] 陈俊豪.地铁沿线建筑物振动与二次噪声相干性及预测研究[D]. 成都:西南交通大学,2019.
   CHEN Junhao. Study on coherence and prediction of vibration and re-radiated noise in buildings caused by subway trains [D].
   Chengdu:Southwest Jiaotong University, 2019. (in Chinese)
- [21] 杨永斌.高速列车所引致之土壤振动分析[D].台北:台湾大学, 1996.

YANG Yongbin. Analysis on soil vibration induced by high-speed

railways[D]. Taibei: Taiwan University, 1996. (in Chinese)

- [22] 陈俊豪,柯文华,魏晓,等.地铁车内噪声特性试验研究[J].铁 道标准设计,2018,62(10):52-57.
  CHEN Junhao, KE Wenhua, WEI Xiao, et al. Experimental study on noise characteristics of metro cars[J]. Railway Standard Design, 2018, 62(10):52-57. (in Chinese)
- [23] 陈俊豪,柯文华,陈嵘,等.时速130km/h城际铁路振源特性 试验研究[J].铁道标准设计,2018,62(7):63-67.
  CHEN Junhao, KE Wenhua, CHEN Rong, et al. Experimental study on vibration source characteristics of 130km/hintercity railway
  [J]. Railway Standard Design, 2018, 62(7):63-67. (in Chinese)
- [24] 廖振鹏.工程波动理论导论[M].北京:科学出版社, 2002.
   LIAO Zhenpeng. Introduction to wave motion theories in engineering[M]. Beijing:Science Press, 2002. (in Chinese)

#### (上接第382页)

YU Xuanrui, LIU Huiping. Chloride ion diffusion in reinforced concrete structure based on Bayesian mechanical algorithm [J]. Journal of Building Materials, 2022, 25(12):1248-1254. (in Chinese) [11] 孙明权,杨世锋,田青青.胶凝砂砾石材料力学特性、耐久性及 坝型综述[J]. 人民黄河, 2016, 38(7):83-85, 99. SUN Mingquan, YANG Shifeng, TIAN Qingqing. Review on mechanical properties, durability and dam type of CSG material [J]. Yellow River, 2016, 38(7):83-85, 99. (in Chinese).