文章编号:1007-9629(2025)12-1180-10

水泥浆-骨料界面过渡区微观特征的数值研究

高 轩[1], 刘清风[1,2,*]

(1.上海交通大学 海洋工程国家重点实验室,上海 200240;
2.华南理工大学 亚热带建筑与城市科学全国重点实验室,广东 广州 510640)

摘要:综合考虑边壁效应造成的水泥颗粒非均匀分布与局部水灰比差异,基于体视学原理、连续切片方法和水泥水化理论,建立了ITZ的数值模型并且通过第三方数据进行了验证,最后采用该模型对水灰比、水泥粒径分布和骨料表面粗糙性进行了参数化分析。结果表明:相较于水泥浆基质,ITZ内水泥的水化程度较高,但水化产物的体积明显减少;水灰比越大,ITZ的厚度和孔隙率越高;细小的水泥颗粒可以填充大颗粒的间隙,进而减小ITZ的厚度和孔隙率;粗糙的骨料表面可以增强边壁效应,增加ITZ的厚度和孔隙率。

关键词:ITZ;边壁效应;厚度;孔隙率;影响因素
中图分类号:TU528.01 **文献标志码:**A **doi:**10.3969/j.issn.1007-9629.2025.12.002

Numerical Study on Microscopic Characteristics of Interfacial Transition Zone between Cement Paste and Aggregate

GAO Xuan[1], *LIU Qingfeng*[1,2,*]

(1. State Key Laboratory of Ocean Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China; 2. State Key Laboratory of Subtropical Building and Urban Science, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

Abstract: A numerical model of ITZ was developed based on the corpuscular nature, the continuous slicing method and the cement hydration theory and was verified by third-party experimental data. The effects of the non-uniform distribution of cement particles and local differences in water-to-cement ratios due to the wall effect were comprehensively taken into account. Based on the proposed model, the water-to-cement ratios, cement particle size distribution, and aggregate surface roughness were analyzed. The results show that, though the hydration degree of the cement in ITZ is high, its hydration product is significantly lower than that of the cement paste matrix. The larger the water-to-cement ratio is, the higher the thickness and porosity of ITZ are. Finer cement particles can fill the gaps between the large particles, thus reducing the ITZ thickness and porosity. Rough aggregate surfaces, on the other hand, can enhance the wall effect and increase the thickness and porosity of ITZ.

Key words: ITZ; wall effect; thickness; porosity; influence factor

在细观尺度上,混凝土可以看作一种由水泥浆体、骨料和水泥浆-骨料界面过渡区(ITZ)组成的多相异质材料[1-3]。其中,影响混凝土性能的一个关键组分便是位于水泥浆体和骨料之间的ITZ[4]。ITZ的厚度通常在10~50 μm之间,其物质组成与水泥浆体类似,但拥有较高的孔隙率、更少的未水化水泥和水

收稿日期:2023-08-08; 修订日期:2023-08-30
基金项目:国家优秀青年科学基金资助项目(52222805);国家自然科学基金资助项目(52478264);重庆市杰出青年科学基金资助项目(cstb2024nscq-jqX0007)
第一作者:高 轩(2000—),男,山西吕梁人,上海交通大学硕士生。E-mail: xuangao2022@sjtu.edu.cn
通讯作者:刘清风(1986—),男,辽宁大连人,上海交通大学教授,博士生导师,博士。E-mail: liuqf@sjtu.edu.cn

化产物[5-7]。由于孔隙率较高，ITZ易成为裂纹生长和离子侵蚀的捷径[8]。因此，ITZ常被视为混凝土中的“薄弱环节”[9-10]，对混凝土的力学性能和耐久性能有着不利的影响[11-17]。

ITZ的多孔特性与其微观演化过程有关。在众多从微观特征角度解释ITZ形成的理论中，边壁效应被认为是ITZ形成的主要原因[18]。一般而言，边壁效应是指颗粒在界面周围的分布受到限制而产生的特殊堆积状态[19]。在混凝土中，骨料的边壁效应导致其附近的水泥较少，使得水化产物的含量和孔隙率呈现梯度分布，因而形成了孔隙率较高的ITZ[20]。

目前，已有多种方法被用来模拟边壁效应，以研究ITZ的微观特征。Garboczi等[21]采用背散射电镜技术分析了ITZ的微结构，发现边壁效应是ITZ的主要成因，且ITZ的厚度与水泥的中值粒径相当。Shi等[22]研究了不同骨料ITZ的微观特征，发现带有锈斑骨料的ITZ比不带锈斑骨料的ITZ厚15～20 μm。Liu等[23]研究发现，将再生混凝土骨料浸泡在水泥-硅灰浆液中可以减少ITZ的厚度和孔隙率。但Zhu等[24]认为截面分析的试验方法可能高估了ITZ的厚度，进而会高估ITZ的体积分数和混凝土的扩散系数。

除试验手段外，国内外学者近年来也开始采用数值方法来研究ITZ的微观特征。Peng等[25]使用离散元方法量化了ITZ孔隙率梯度，研究表明ITZ对混凝土裂缝演化的影响不容忽视。Sharma等[26]使用μic平台模拟边壁效应，发现ITZ的厚度更多地取决于水泥的平均粒径。Gao等[27]研究了局部ITZ的异质特性，发现ITZ厚度与水泥中值粒径相当。Zheng等[28]开发了一个骨料间水泥颗粒的分布模拟算法，并提出了ITZ的厚度与水灰比、水泥最大粒径之间的函数关系。Liu等[29]研究发现，ITZ的厚度与水灰比无关。由此可见，尽管上述方法都考虑了边壁效应对水泥颗粒分布的影响，但对于ITZ微观特征的影响因素尚存争议。同时，这些数值方法不可避免的忽略了一些原材料的特性，如骨料表面的粗糙性。

鉴于目前原材料特性与配比对ITZ微观特征的影响尚未明确，而试验手段可能会高估ITZ的厚度，且耗时长，成本高。因此，本文基于边壁效应对水泥颗粒分布的扰动，建立了一个数值模型以探讨ITZ微观特征的影响因素。通过颗粒随机投放、连续切片处理和水泥水化模拟，模型重构了水泥浆体的微结构，进而得到了ITZ的微观特征。模型的可靠性通过第三方数据得到了验证。本文所提出的模型考虑了边壁效应与水灰比、水泥粒径分布、骨料表面粗糙性多个因素的共同作用，可以为预测ITZ的微观特征和混凝土性能提供一个新的思路。

1　ITZ数值模型的建立

ITZ数值模型的构建思路如下：首先，通过水泥颗粒的随机生成和投放，得到其粒径与位置坐标；随后，基于体视学原理和连续切片方法，获取局部水泥的体积分数与水灰比；最后，根据水泥水化反应机制，计算水化体系中各相的体积分数，并划分ITZ的边界。

1.1　颗粒系统生成与定位

关于水泥颗粒系统的生成与定位，目前已有许多成熟的算法。本文假设水泥颗粒是随机分布于水中的不重叠的球形颗粒，其粒径(D)分布(PSD)满足Rosin-Rammler函数(式(1))[30-31]。水泥颗粒的粒径由$f_N(D)$函数(式(2))决定，其数量由代表性体积单元(RVE)内水泥的体积分数(V_c)控制。

$$F_V(D)=1-\exp\left(-bD^n\right) \tag{1}$$

式中：$F_V(D)$为累计体积分布函数；b和n为粒径分布参数。

$f_N(D)$为$F_V(D)$函数转换得到的基于颗粒数量的概率密度函数[32-33]：

$$f_N(D)=\frac{D^{n-4}\exp\left(-bD^n\right)}{\int_{D\min}^{D\max}x^{n-4}\exp\left(-bx^n\right)\mathrm{d}x} \tag{2}$$

式中：D_{max}和D_{min}分别为水泥颗粒的最大、最小粒径，μm。

水泥的体积分数可由式(3)确定。

$$V_c=\frac{1}{1+\rho_c/\rho_w\cdot m_{w/c}} \tag{3}$$

式中：ρ_c和ρ_w为水泥颗粒和水的密度，g/cm^3；$m_{w/c}$为水泥浆体的水灰比。

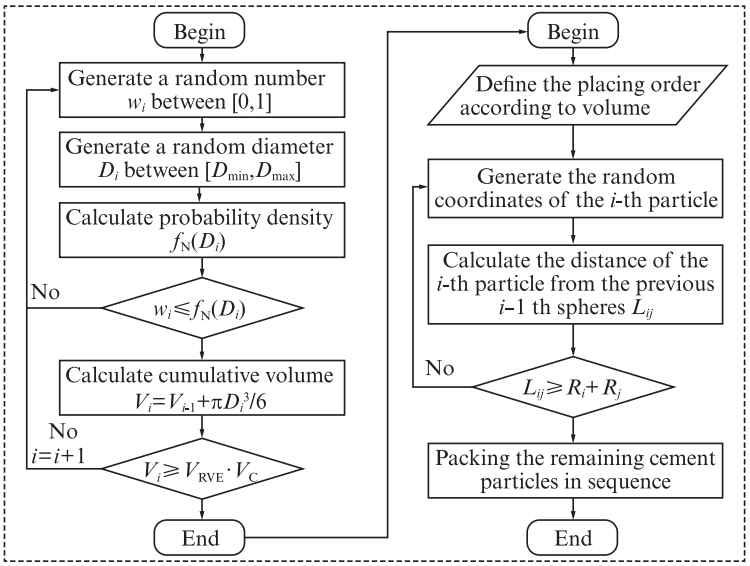
数值模型的RVE是边长为150 μm的正方体，水泥颗粒的粒径、数量和位置按图1所示流程确定[9]。图中：L为2个颗粒的间距，R为2个颗粒的半径。

1.2　边壁效应模拟与微观特征提取

在已有的众多颗粒投放模型中，广泛采用周期性边界条件以忽略边壁效应[30,34-35]。然而，边壁效应是ITZ的主要成因。因此，本模型采用了封闭的边界条件以模拟边壁效应(见式(4))。

$$\begin{cases}x_i\in\left[D_i/2,\ 150-D_i/2\right]\\ y_i\in\left[-D_i/2,\ 150+D_i/2\right]\\ z_i\in\left[D_i/2,\ 150-D_i/2\right]\end{cases} \tag{4}$$

式中：$[x_i, y_i, z_i]$为第i个水泥颗粒球心的位置；D_i为第i个水泥颗粒的粒径。



(a) Generating cement particles (b) Packing cement particles

图1 水泥颗粒的生成和投放过程

Fig. 1 Generating and packaging of cement particles

为避免多个方向上的边壁效应互相影响并确保计算效率,在X和Z方向设置了封闭边界条件,在Y方向设置了开放边界条件。这会使RVE内的水泥体积小于全部水泥的体积,无法达到预设的水灰比。通过设置系数s来控制水泥的体积分数可以弥补这一缺陷,即:

$$V_c'=sV_c \tag{5}$$

式中:V_c'为水泥的预设体积分数;s为系数,通过多次测试得到。

此外,现有的数值模型大多设置了光滑的边界条件,忽略了骨料表面的粗糙性,这不利于ITZ微观特征的准确评估[36]。本文构建了光滑表面、凸起表面和凹陷表面(见图2(a))来研究骨料表面粗糙性的影响,粗糙形貌是通过随机生成凸起或凹陷的圆柱体来具现的。水泥颗粒在投放时除了要满足颗粒间互相不重叠的条件外,还需与骨料的粗糙形貌进行几何碰撞检测来确保满足几何相容或相离条件,进而实现对骨料凹陷处容纳水泥颗粒和骨料凸起处排斥水泥颗粒的模拟[37]。关于圆柱体与球体的几何碰撞检测,当前已有诸多成熟的算法,这里不再赘述。

骨料表面的粗糙性可用最大峰高、最大峰径和粗糙度(R_a)3个指标来衡量,如图2(b)所示。最大峰高的取值范围为10~40 μm,最大峰径设为固定值20 μm[38]。粗糙度的定义见式(6)。需要注意的是,由于目前对各类型骨料表面粗糙形貌几何特征的参数化提取缺乏系统研究,本节假设用于构建粗糙形貌的圆柱体的高度是满足0 μm至最大峰高间均匀分布的随机变量。本研究采用的3个粗糙性指标数值可由试验指标转换确定[37]。

$$R_a=\frac{A_{circle}}{A_{all}} \tag{6}$$

式中:A_{circle}为圆柱的底面积;A_{all}为骨料界面的面积。

边壁效应使水泥颗粒的空间分布不均匀,导致骨料附近的水泥含量显著减少。水泥颗粒的不均匀分布可用其体积分数$V_c(x)$来刻画(x为水泥浆体至骨料表面的距离)[34]。所提模型基于体视学原理,采用连续切片方法来提取水泥颗粒分布的微观特征[32]。通过对RVE切片,可以得到水泥的面积分数$S_c(x)$:

$$S_c(x)=\frac{\sum_i S_{xi}}{A_x} \tag{7}$$

式中:S_{xi}为每个水泥颗粒在$X=x$平面处的截面积;A_x为RVE在$X=x$平面处的截面积。

根据体视学原理,$S_c(x)$可以代表RVE中切片空间内的$V_c(x)$[39]。

$$V_c(x)\approx\frac{\sum_i S_{xi}\cdot d}{A_x\cdot d}=S_c(x) \tag{8}$$

式中:d为切片间的间距,取d=0.1 μm。

由于水泥颗粒的不均匀分布,$S_c(x)$会有一定的波动。为提高结果的统计可靠性,进行了多次计算,以得到$S_c(x)$的标准差$\sigma(x)$和变异系数$C_V(x)$[40]。

研究表明水灰比对水泥浆体的水化程度、孔隙率等特性有显著影响[41]。在距骨料表面距离为x的切片处,局部水灰比$m_{w/c,x}$为:

$$m_{w/c,x}=\frac{(1-V_c(x))\cdot\rho_w}{V_c(x)\cdot\rho_c}\approx\frac{(1-S_c(x))\cdot\rho_w}{S_c(x)\cdot\rho_c} \tag{9}$$

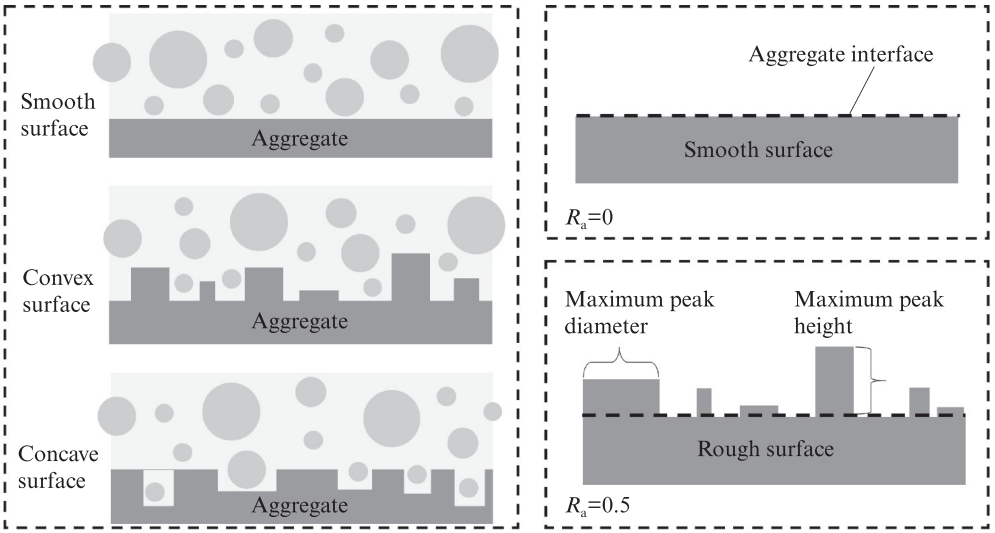


图2　粗糙骨料表面的构建（二维示意图）

Fig. 2　Construction of a rough aggregate surface (2D schematic)

1.3　水泥水化及产物计算

水泥浆体的微观特征与其水化程度和水化产物相关。为量化水化反应过程，模型采用了Powers水化模型[42-43]。水泥水化程度（ξ）按下式确定：

$$\xi(t_e)=\xi_u \exp\left[-\left(\frac{\tau}{t_e}\right)^{\beta}\right] \tag{10}$$

式中：τ和β为水化曲线的形状系数，按式（11）计算；ξ_u为由水灰比确定的最终水化程度；t_e为等效温度为20 ℃的水化时间[43]。

$$\begin{cases}\tau=66.78\chi_{C_3A}^{-0.154}\cdot\chi_{C_3S}^{-0.401}\cdot\chi_{SO_3}^{-0.758}\cdot B^{-0.804}\\ \beta=181.4\chi_{C_3A}^{0.146}\cdot\chi_{C_3S}^{0.227}\cdot\chi_{SO_3}^{0.558}\cdot B^{-0.535}\end{cases} \tag{11}$$

式中：χ_{C_3A}、χ_{C_3S}、χ_{SO_3}分别为水泥中铝酸三钙（C_3A）、硅酸三钙（C_3S）、SO_3的含量；B为水泥颗粒的Blaine比表面积，m^2/kg。

模型采用每个切片处的局部水灰比$m_{w/c,x}$，并基于Tong等[42]建立的水化模型，分别计算各切片水化产物和孔隙的体积分数[44]。

未水化水泥的体积分数（f_{uh}）：

$$f_{uh}(x,t_e)=\frac{1-\xi(x,t_e)}{1+\rho_c\cdot m_{w/c,x}} \tag{12}$$

水化产物的体积分数（f_h）：

$$f_h(x,t_e)=\frac{k_h\xi(x,t_e)}{1+\rho_c\cdot m_{w/c,x}} \tag{13}$$

式中：k_h为单位水泥水化时，水化产物的体积膨胀系数，k_h=2.13[42]。

低密度水化硅酸钙（C-S-H）的体积分数（f_{ldcsh}）：

$$f_{ldcsh}(x,t_e)=(1-\eta)f_h(x,t_e)\times\left(1+\frac{1-M_r}{M_r}\frac{1-\omega_{ldcsh}}{1-\omega_{hdcsh}}\right)^{-1} \tag{14}$$

式中：η为水化晶体在固体水化产物中的占比；M_r为低密度C-S-H与高密度C-S-H的质量比；ω_{ldcsh}和ω_{hdcsh}分别为单位体积低密度C-S-H凝胶与高密度C-S-H凝胶的孔隙率，可取ω_{ldcsh}=0.37，ω_{hdcsh}=0.24[37]。

高密度C-S-H的体积分数（f_{hdcsh}）：

$$f_{hdcsh}(x,t_e)=(1-\eta)f_h(x,t_e)-f_{ldcsh}(x,t_e) \tag{15}$$

水化晶体相的体积分数（f_{ch}）：

$$f_{ch}(x,t_e)=\eta\frac{k_h\xi(x,t_e)}{1+\rho_c\cdot m_{w/c,x}} \tag{16}$$

毛细孔的体积分数（f_{cp}）：

$$f_{cp}(x,t_e)=\frac{\rho_c\cdot m_{w/c,x}+(1-k_h)\xi(x,t_e)}{1+\rho_c\cdot m_{w/c,x}} \tag{17}$$

水泥浆体的时变孔隙率是其重要的微结构特征[45-46]。现有大多数研究都是以孔隙率的梯度分布来描述ITZ的微结构特点，并划分ITZ的边界[36]。本节定义ITZ为靠近骨料表面的区域，其范围涵盖孔隙率曲线斜率小于-0.25%的部分，其余部分被称为水泥浆基质。骨料表面至ITZ边界的距离即为ITZ的厚度（T_{ITZ}）。需要注意的是，不同的边界划分方法可能会导致ITZ的厚度存在差异。而通过水泥浆体的孔隙率分布曲线，可对ITZ和水泥浆基质的孔隙率进行均质化处理[47]，确保不同边界划分方法造成的差异不会影响到混凝土的参数化建模。

水泥浆体的孔隙率（φ）按式（18）计算。

$$\varphi(x,t_e)=\varphi_{cp}(x,t_e)+\varphi_{ldcsh}(x,t_e)+\varphi_{hdcsh}(x,t_e) \quad (18)$$

式中：$\varphi_{cp}(x,t_e)$、$\varphi_{ldcsh}(x,t_e)$、$\varphi_{hdcsh}(x,t_e)$分别为毛细孔隙率、低密度C-S-H和高密度C-S-H凝胶的孔隙率，按式(19)计算。

$$\begin{cases}\varphi_{cp}(x,t_e)=f_{cp}(x,t_e)\\ \varphi_{ldcsh}(x,t_e)=f_{ldcsh}(x,t_e)\cdot\omega_{ldcsh}\\ \varphi_{hdcsh}(x,t_e)=f_{hdcsh}(x,t_e)\cdot\omega_{hdcsh}\end{cases} \quad (19)$$

2 数值模型的验证与讨论

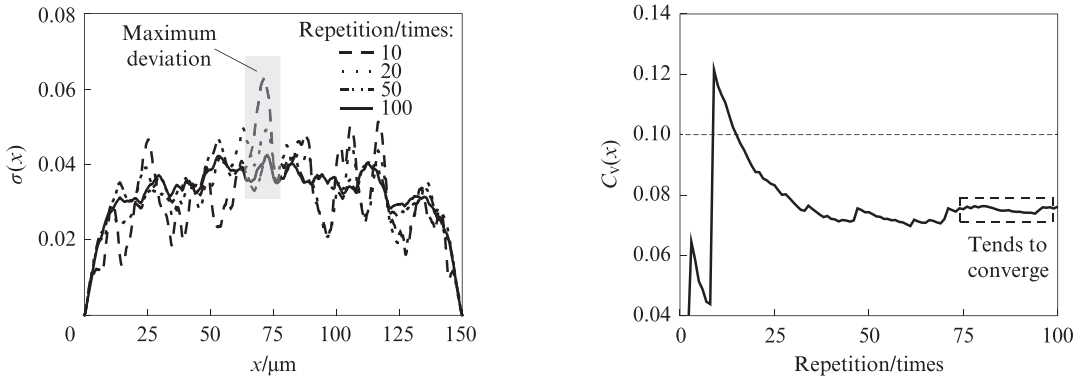
所建立ITZ数值模型的可靠性通过LÜ等[3]的试验数据进行了验证。根据其试验条件，水泥的最大和最小粒径分别设置为D_{max}=100.0 μm，D_{min}=2.5 μm。粒径分布参数b和n分别取为0.033 9和1.364 7。水泥颗粒密度ρ_c=3.11 g/cm^3，Blaine比表面积为380 m^2/kg，水灰比为0.35。凸起骨料表面的最大峰高和最大峰径分别为15 μm和20 μm，粗糙度为0.2[38]。重复计算100次并得到了$S_c(x)$的标准差$\sigma(x)$和变异系数$C_V(x)$，结果如图3所示。

由图3(a)可知，随着重复次数的增加，$\sigma(x)$逐渐稳定，且$\sigma(x)$的最大值在x=71 μm附近。

为确定模型的误差收敛情况，计算了x=71 μm处的C_V值随重复次数的变化，如图3(b)所示。由图3(b)可知，重复次数接近100时，C_V值已趋于收敛，继续增加重复次数会延长计算时间，因此每个模型需至少计算100次以平衡稳定性和计算效率。

将模型所得结果与LÜ等[3]的试验数据以及Abyaneh等[48]提出的幂函数拟合曲线进行了对比，如图4(a)所示。由图4(a)可知，试验数据与模型结果基本一致，均呈幂律下降趋势。根据**1.3**介绍的ITZ边界划分和厚度确定方法，模型所得ITZ厚度为21.85 μm，而试验结果为22.20 μm，这一差异来源于边界划分精度的不同。试验方法以条带处的孔隙率拐点为ITZ边界，条带的厚度约为4.44 μm。而在数值模型中，切片间距仅为0.10 μm，边界划分更加精准。

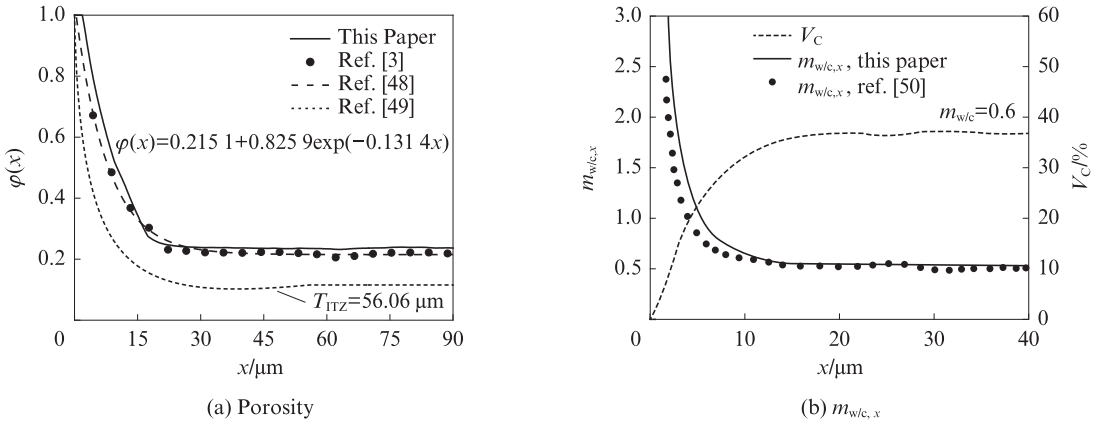
图4(a)也显示了数值模型和Jiang等[49]提出的经典经验公式的对比：模型结果比经验公式更契合试验数据。在该案例背景下，经验公式得到的水泥浆基质孔隙率偏低，ITZ厚度也有一定偏差。这是因为



(a) $\sigma(x)$ (b) $C_V(x)$

图3 $S_c(x)$的标准差和变异系数

Fig. 3 Standard deviation and coefficient of variation of $S_c(x)$



(a) Porosity (b) $m_{w/c,x}$

图4 数值模型对比验证

Fig. 4 Comparative validation of simulation results

凝胶孔的孔径较小，对混凝土性能的影响较低，因而经验公式更关注毛细孔隙率。所提模型在该公式的基础上，通过引入水泥水化反应机制，更精准地体现了水化进程和水化产物分布。以初始局部水灰比为参照，图4(b)显示了模型结果与Sun等[50]研究结果的对比，两者表现出良好的一致性，这进一步证实了数值模型的可靠性。同时图4(b)也表明，ITZ内局部的水灰比较大，这有利于水泥的水化。然而，受边壁效应的影响，水泥的体积分数也呈梯度分布，距骨料表面越近，水泥越少，这导致了ITZ的低水化产物含量和多孔性特点。

Abyaneh等[48]报道的拟合公式如下：

$$\varphi(x)=a_1+a_2\exp(-a_3x) \tag{20}$$

图5显示了LÜ等[3]的案例中x方向(考虑边壁效应)和y方向(不考虑边壁效应)孔隙率的数值结果。由图5可见：不考虑边壁效应时，孔隙率为稳定值；考虑边壁效应时，两侧孔隙率呈梯度下降，中间的孔隙率稳定值更低，这归因于更多水泥集中在这一区域以补偿两侧的低水泥含量。因此，考虑边壁效应对水泥颗粒的扰动，有助于深入理解ITZ形成的原因以及获取ITZ的微观特征，进而为混凝土的各尺度建模提供精确依据。

由此可见，边壁效应对水泥浆体的微观特征和混凝土的宏观性能有两方面影响：形成ITZ和降低水泥浆基质的孔隙率。以该案例为例，因边壁效应形成的ITZ内平均孔隙率是水泥浆基质处的2.28倍。采用广义有效介质理论[51-52]计算得出，ITZ的Cl^-扩散系数可达水泥浆基质的27.03倍，这符合ITZ会加速Cl^-侵蚀的一贯认知。另一方面，边壁效应使得水泥浆基质处的孔隙率降低了14.82%，这有利于混凝土抵抗裂缝生长和有害离子侵蚀，但这在以往的研究中很少被考虑。因此，所建立的模型通过重构水泥浆体的微结构，可以更精确地获取其特性，进而为定量分析混凝土的宏观性能提供了依据。

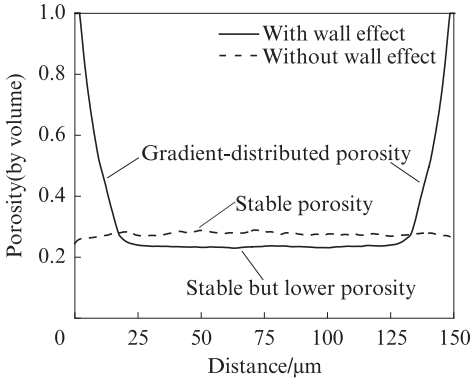


图5　有无边壁效应的孔隙率对比

Fig. 5　Porosity comparison with and without wall effect

3　参数化结果分析

本模型考虑了边壁效应和原材料特性与配比等因素，前文也证实了这些因素的重要性。为阐明其作用机理，接下来将逐一探讨水灰比、水泥粒径分布和骨料表面粗糙性对ITZ微观特征的影响。出于后续试验验证的需要，这里以ASTM-I型水泥作为数值模型的输入，水泥参数来自文献[43]。

3.1　水灰比的影响

水灰比可能会影响ITZ的微结构发展，进而影响其微观特征。为探究水灰比对ITZ厚度和孔隙率的影响，本节分别设置其为0.2、0.3、0.4、0.5、0.6。图6显示了不同水灰比下ITZ和水泥浆基质内各相的平均体积分数，水化时间为28 d。图中，CP为毛细孔相，CH为水化晶体相，LD C-S-H为低密度C-S-H凝胶，HD C-S-H为高密度C-S-H凝胶，UC为未水化水泥。由图6可见：随着水灰比的增大，ITZ和水泥浆基质的毛细孔不断增多，未水化水泥逐渐减少；ITZ和水泥浆基质中的水化晶体相与水灰比呈正相关，这归因于高水灰比下水泥可以充分水化；在各水灰比下，ITZ的厚度依次为18.75、20.35、22.32、23.97、27.21 μm，孔隙率依次为37.50%、43.97%、50.27%、56.21%、61.14%(孔隙率指ITZ内的总孔隙率)；由于水分更多集中在骨料附近，ITZ的微观特征对水灰比的变化较为敏感，因而ITZ的厚度和孔隙率随水灰比增大而增大，这一变化趋势也与Zheng等[9]和Ma等[20]的结论一致。

3.2　水泥粒径分布的影响

为了从形成角度揭示粒径分布对ITZ微观特征的影响机理，本节采用控制变量法探究了粒径分布参数D_{min}、D_{max}、b和n对ITZ厚度与孔隙率的影响。各参数取值和结果如图7所示[19,31,53]。

由图7(a)可知，D_{min}对ITZ微观特征的影响较小。由于受大粒径水泥颗粒边壁效应的影响，小粒径水泥颗粒更易存在于空旷处，而非大颗粒之间。因此小颗粒的填充效应非常有限，即ITZ的微观特征对D_{min}的变化不敏感。当减小D_{max}时，大颗粒对小颗粒的边壁效应也减少，因此小颗粒更易填充，从而降低了ITZ的厚度。

图7(b)显示了b和n对ITZ厚度的影响。以邓超[53]报道的粒径分布为参照(中值粒径约为16.75 μm)，Stroeven等[31]采用的水泥略微偏粗(中值粒径约为19.65 μm)，因此ITZ的厚度略高。而田卒

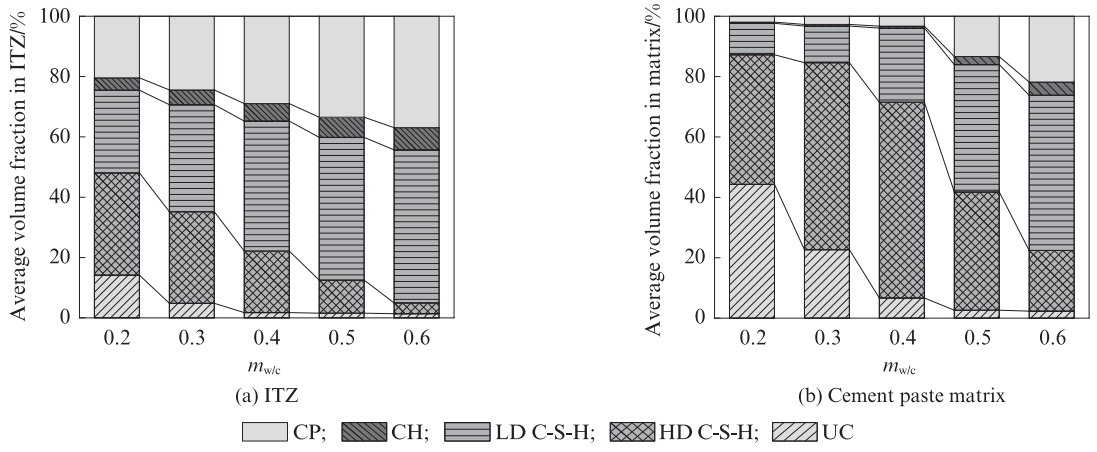


图6 不同$m_{w/c}$下ITZ和水泥浆基质内各相的体积分数

Fig. 6 Volume fraction of phases in ITZ and cement paste matrix at different $m_{w/c}$

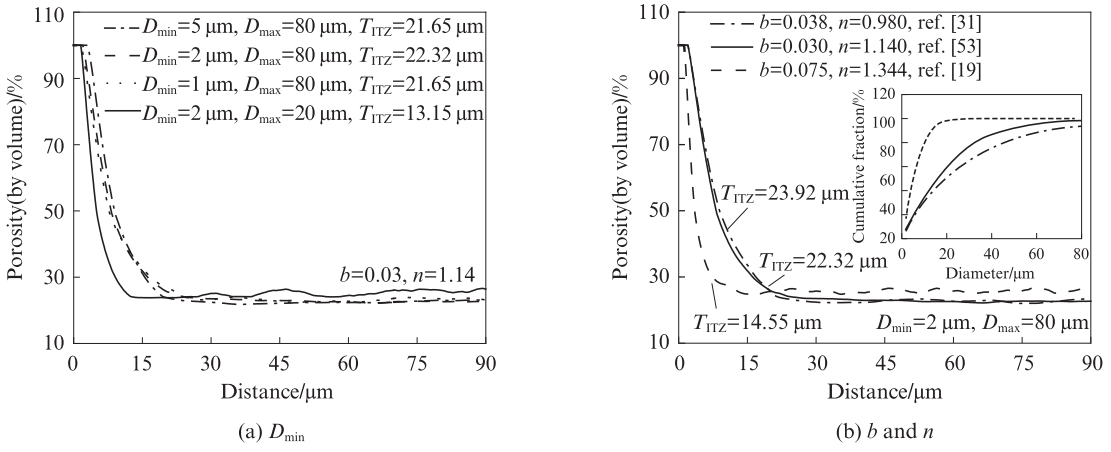


图7 粒径参数对孔隙率分布曲线的影响

Fig. 7 Effect of particle size parameters on porosity distribution curves

士[19]采用的水泥粒径非常细小,其中值粒径约为6.25 μm,因而水泥颗粒的堆积更加密实,从而减小了ITZ的厚度。

3.3 骨料表面粗糙性的影响

骨料表面粗糙性也可能会影响ITZ的形成及其微观特征。同时,骨料表面粗糙性和水泥颗粒尺寸对ITZ微观特征的影响也存在一定的耦合效应,即骨料的凹陷处可容纳较小的颗粒,而大颗粒更易存在于远离骨料表面处。本节所讨论内容考虑了两者的耦合效应,但对于不同的粗糙骨料表面,选择了相同的粒径分布参数以凸出骨料表面粗糙性对ITZ微观特征的影响。图8显示了光滑表面和粗糙度为0.5的凹陷表面、凸起表面的孔隙率曲线。由图8可见:

(1)凹陷表面与光滑表面的孔隙率曲线基本重合,且ITZ厚度的差异也较小。这是因为即使骨料凹陷处可以容纳水泥颗粒,但边壁效应依旧使得水泥颗粒不易靠近骨料表面。

(2)凸起表面的孔隙率曲线明显右移,ITZ的厚度增加至37.05 μm。这归因于骨料表面的凸起阻碍了水泥颗粒在ITZ内的分布,使得骨料实际等效表面向水泥浆基质靠近,最后体现为ITZ厚度的增加。

由于凹陷表面对ITZ微观特征的影响较小,因此本节主要聚焦于凸起表面。图9展示了凸起表面的粗糙度与最大峰高对ITZ厚度和孔隙率的影响。由图9可见:

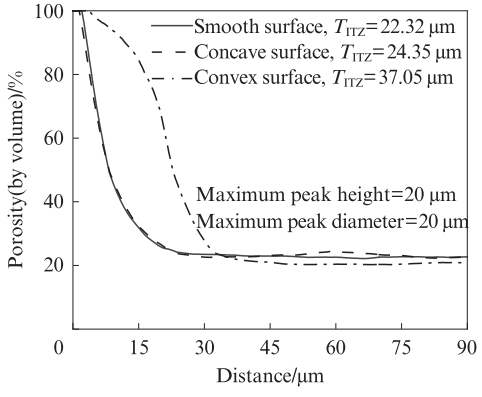


图8 考虑粗糙度的孔隙率数值模型

Fig. 8 Numerical model of porosity considering roughness

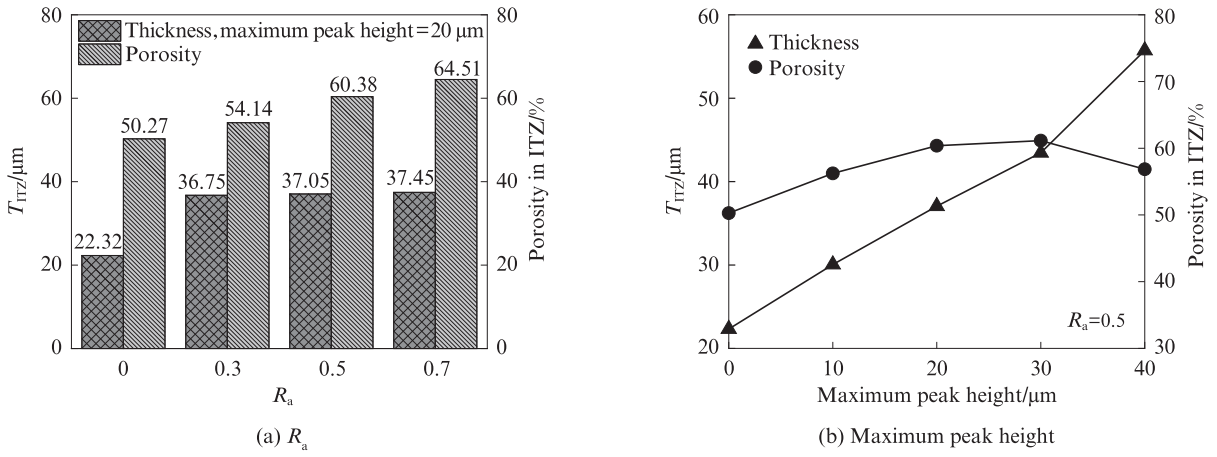


图9　粗糙度和最大峰高对ITZ微观特征的影响

Fig. 9　Effects of roughness and maximum peak height on the microscopic characteristics of ITZ

(1)随着粗糙度的增加，ITZ的厚度和孔隙率不断提高。ITZ厚度的提升量在粗糙度为0.3时最为明显，此后基本不再增加。这意味着较小的粗糙度便对ITZ的厚度有显著的影响。

(2)随着最大峰高的增加，ITZ的厚度也呈上升趋势。由此可见，骨料表面粗糙性对ITZ微观特征的影响是不容忽视的。骨料表面粗糙性可通过改变水泥颗粒的空间分布来干扰边壁效应，进而影响到ITZ的微观特征乃至混凝土的宏观性能。

4　结论

(1)综合考虑边壁效应造成的水泥颗粒非均匀分布与局部水灰比差异，本文建立了一个经过第三方试验验证的水泥浆-骨料界面过渡区(ITZ)数值模型。利用该模型可对不同参数条件下的ITZ厚度和孔隙率进行可靠地预测。

(2)边壁效应导致ITZ内局部水灰比更高，这有利于水泥水化。但由于ITZ内的水泥含量较低，因而形成了梯度分布的孔隙率特点，距骨料表面越近，孔隙率越高。边壁效应可在致使ITZ形成和降低水泥浆基质孔隙率两个层面影响混凝土的宏观性能。

(3)水灰比越大，ITZ的厚度和孔隙率越高。粒径分布参数中的最小粒径对ITZ厚度和孔隙率的影响较小，这归因于大颗粒边壁效应的影响使得小颗粒不易填充。而降低最大粒径、参数b和n可以缓解大颗粒的边壁效应，使水泥颗粒的堆积更加密实，进而有效减小ITZ的厚度。

(4)骨料表面的凹陷对ITZ微观特征的影响较小，而骨料表面的凸起会扰乱水泥颗粒的空间分布，强化边壁效应，因此大幅增加了ITZ的厚度与孔隙率，需要得到关注。增大凸起骨料表面的粗糙度和最大峰高也会增加ITZ的厚度与孔隙率。

参考文献：

[1] HUANG Q H, LI C Z, SONG X B. Spatial distribution characteristics of ellipsoidal coarse aggregates in concrete considering wall effect[J]. Construction and Building Materials, 2022, 327:126922.

[2] 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. Modelling of chloride transport in concrete by considering the multi-scale heterogeneous characteristics[J]. Journal of Building Materials, 2023, 26(10): 1062-1071. (in Chinese)

[3] LÜ K, SHE W, CHANG H L, et al. Effect of fine aggregate size on the overlapping of interfacial transition zone (ITZ) in mortars[J]. Construction and Building Materials, 2020, 248: 118559.

[4] 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 and Infrastructure Engineering, 2025, 40(9):1129-1149.

[5] LYU K, GARBOCZI E J, SHE W, et al. The effect of rough vs. smooth aggregate surfaces on the characteristics of the interfacial transition zone[J]. Cement and Concrete Composites, 2019, 99:49-61.

[6] 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]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2017, 41: 976-993.

[7] 董华，钱春香. 骨料尺寸对微区泌水及界面区结构特征的影响[J]. 建筑材料学报，2008，11(3)：334-338.
DONG Hua, QIANG Chunxiang. Influence of aggregate size on micro-bleeding and microstructure of interfacial transition zone[J]. Journal of Building Materials, 2008, 11(3):334-338. (in Chinese)

[8] TONG L Y, ŠAVIJA B, ZHANG M Z, et al. Chloride penetration in concrete under varying humidity and temperature changes: A numerical study[J]. Construction and Building

Materials, 2025, 458: 138380.

[9] ZHENG J J, LI C Q, ZHOU X Z. Characterization of microstructure of interfacial transition zone in concrete[J]. ACI Materials Journal, 2005, 102(4):265-271.

[10] PENG Z S, XIONG Q X, ZHOU X M, et al. A porosity-based mechanics model for studying crack evolution from ITZ to mortar matrix in concrete[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2025, 444: 118085.

[11] LIU Q F, FENG G L, XIA J, et al. Ionic transport features in concrete composites containing various shaped aggregates: A numerical study[J]. Composite Structures, 2018, 183:371-380.

[12] 李林洁, 刘清风. 冻融循环下混凝土内部结冰及氯离子传输规律的数值研究[J]. 硅酸盐学报, 2022, 50(8):2245-2256.
LI Linjie, LIU Qingfeng. Numerical analysis on freezing rate and chloride transport in concrete subjected to freeze-thaw cycles[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2022, 50(8):2245-2256. (in Chinese)

[13] 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. 3-D concrete mesoscopic modelling and numerical study on the influence of aggregate morphology on chloride diffusion[J]. Materials Reports, 2023, 37(24):167-173. (in Chinese)

[14] YAN T, YU H F, MA H Y, et al. Experimental study of the relationship between bond strength of aggregates interface and microhardness of ITZ in concrete[J]. Construction and Building Materials, 2022, 352:128990.

[15] MENG Z Z, LIU Q F, UKRAINCZYK N, et al. Numerical study on the chemical and electrochemical coupling mechanisms for concrete under combined chloride-sulfate attack[J]. Cement and Concrete Research, 2024, 175:107368.

[16] ZHANG H R, JI T, LIU H. Performance evolution of the interfacial transition zone(ITZ) in recycled aggregate concrete under external sulfate attacks and dry-wet cycling [J]. Construction and Building Materials, 2019, 229:116938.

[17] WU K, HAN H, LI H X, et al. Experimental study on concurrent factors influencing the ITZ effect on mass transport in concrete[J]. Cement and Concrete Composites, 2021, 123:104215.

[18] MA H Y, TU Y, YU H F, et al. Mechanical properties and microstructural characteristics of coral-aggregate-concrete ITZ: Experimental study[J]. Journal of Building Engineering, 2023, 72:106647.

[19] 田卒士. 基于多尺度模型的水泥基材料传输性能研究[D]. 杭州:浙江大学, 2019.
TIAN Zushi. Research on the transport performance of cement-based materials based on a multi-scale model [D]. Hangzhou:Zhejiang University, 2019. (in Chinese)

[20] MA H Y, LI Z J. Multi-aggregate approach for modeling interfacial transition zone in concrete[J]. ACI Materials Journal, 2014, 111(2):189-199.

[21] GARBOCZI E, BENTZ D. Computer modelling of interfacial transition zone microstructure and properties[C]//Engineering and Transport Properties of the Interfacial Transition Zone in Cementitious Composites. Paris:RILEM, 1999:349-385.

[22] SHI Y, LV X D, ZHOU S H, et al. Mechanical properties, durability, and ITZ characteristics of full-grade dam concrete prepared by aggregates with surface rust stains[J]. Construction and Building Materials, 2021, 305:124798.

[23] LIU J, MA K L, SHEN J T, et al. Influence of recycled concrete aggregate enhancement methods on the change of microstructure of ITZs in recycled aggregate concrete [J]. Construction and Building Materials, 2023, 371:130772.

[24] ZHU Z G, PROVIS J L, CHEN H S. Quantification of the influences of aggregate shape and sampling method on the overestimation of ITZ thickness in cementitious materials[J]. Powder Technology, 2018, 326:168-180.

[25] PENG Z S, LIU Q F, GAO X, et al. Effects of aggregate distribution on the cracking behavior of concrete: A discrete element method study[J]. Cement and Concrete Composites, 2025, 162:106119.

[26] SHARMA M, BISHNOI S. Influence of properties of interfacial transition zone on elastic modulus of concrete: Evidence from micromechanical modelling [J]. Construction and Building Materials, 2020, 246:118381.

[27] GAO X, PENG Z S, TONG L Y, et al. Effect of global aggregate distribution on interfacial transition zones in cement-based materials: An analytical-numerical study [J]. Construction and Building Materials, 2025, 458: 138278.

[28] ZHENG J J, LI C Q, ZHOU X Z. Thickness of interfacial transition zone and cement content profiles around aggregates[J]. Magazine of Concrete Research, 2005, 57(7):397-406.

[29] LIU C, ZHANG M Z. Multiscale modelling of ionic diffusivity in unsaturated concrete accounting for its hierarchical microstructure [J]. Cement and Concrete Research, 2022, 156:106766.

[30] ZHU Z G, XU W X, CHEN H S, et al. Evolution of microstructures of cement paste via continuous-based hydration model of non-spherical cement particles[J]. Composites Part B: Engineering, 2020, 185:107795.

[31] STROEVEN M, STROEVEN P. Space system for simulation of aggregated matter application to cement hydration[J]. Cement and Concrete Research, 1999, 29(8):1299-1304.

[32] XU W X, LÜ 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]. Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications, 2013, 392(3):416-426.

[33] 张坚, 刘清风. 基于非球形颗粒水化堆积的水泥浆氯离子扩散系数预测[J]. 建筑材料学报, 2023, 26(9):955-962.
ZHANG Jiang, LIU Qingfeng. Prediction for chloride diffusivity of cement paste based on accumulation of hydrated imperfectly spherical particles[J]. Journal of Building Materials, 2023, 26(9): 955-962. (in Chinese)

[34] ZHENG J J, LI C Q, ZHAO L Y. Simulation of two-dimensional aggregate distribution with wall effect[J]. Journal of Materials in Civil Engineering, 2003, 15(5):506-510.

[35] XIONG Q X, TONG L Y, MEFTAH F, et al. Improved

predictions of permeability properties in cement-based materials: A comparative study of pore size distribution-based models[J]. Construction and Building Materials, 2024, 411:133927.

[36] JIANG Z L, HUANG Q H, XI Y P, et al. Experimental study of diffusivity of the interfacial transition zone between cement paste and aggregate[J]. Journal of Materials in Civil Engineering, 2016, 28(10):04016109.

[37] GAO X, LIU Q F, CAI Y X, et al. A new model for investigating the formation of interfacial transition zone in cement-based materials[J]. Cement and Concrete Research, 2025, 187:107675.

[38] 吕凯. 水泥基材料微细观结构定量表征与模拟计算[D]. 南京：东南大学, 2020.
LÜ Kai. Quantitative characterization and numerical simulation of micro-and meso-structure of cement-based materials[D]. Nanjing: Southeast University, 2020. (in Chinese)

[39] LIN J Y, CHEN H S. Measurement of continuum percolation properties of two-dimensional particulate systems comprising congruent and binary superellipses[J]. Powder Technology, 2019, 347:17-26.

[40] 郑建军，周欣竹，姜璐，等. 混凝土界面面积分数和渗流阈值及其应用(Ⅰ)—计算机模拟[J]. 建筑材料学报, 2006, 9(3):266-273.
ZHENG Jianjun, ZHOU Xinzhu, JIANG Lu, et al. Area fraction and percolation threshold of ITZ in concrete and its application (Ⅰ)—Computer simulation[J]. Journal of Building Materials, 2006, 9(3):266-273. (in Chinese)

[41] ZHANG S F, LIU R G, LU C H, et al. Application of digital image correlation to study the influence of the water/cement ratio on the interfacial transition zone in cement-based materials[J]. Construction and Building Materials, 2023, 267:130167.

[42] TONG L Y, XIONG Q X, ZHANG M, et al. Multi-scale modelling and statistical analysis of heterogeneous characteristics effect on chloride transport properties in concrete[J]. Construction and Building Materials, 2023, 367:130096.

[43] YAN B X, JIA H W, YILMAZ E, et al. Numerical study on microscale and macroscale strength behaviors of hardening cemented paste backfill[J]. Construction and Building Materials, 2022, 321:126327.

[44] POWERS T C. Structure and physical properties of hardened Portland cement paste[J]. Journal of the American Ceramic Society, 1958, 41(1):1-6.

[45] 童良玉，刘清风. 考虑时变孔隙结构的非饱和混凝土扩散性能预测模型[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(8):1950-1961.
TONG Liangyu, LIU Qingfeng. Prediction model for diffusivity of unsaturated concrete by considering time-varying pore structure [J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2023, 51(8): 1950-1961. (in Chinese)

[46] TONG L Y, XIONG Q X, ZHANG Z, et al. A novel lattice model to predict chloride diffusion coefficient of unsaturated cementitious materials based on multi-typed pore structure characteristics[J]. Cement and Concrete Research, 2024, 175: 107351.

[47] XIONG Q X, TONG L Y, ZHANG Z, et al. A new analytical method to predict permeability properties of cementitious mortars: The impacts of pore structure evolutions and relative humidity variations[J]. Cement and Concrete Composites, 2023, 137: 104912.

[48] ABYANEH S D, WONG H S, BUENFELD N R. Modelling the diffusivity of mortar and concrete using a three-dimensional mesostructure with several aggregate shapes[J]. Computational Materials Science, 2013, 78:63-73.

[49] JIANG J Y, SUN G W, WANG C H. Numerical calculation on the porosity distribution and diffusion coefficient of interfacial transition zone in cement-based composite materials [J]. Construction and Building Materials, 2013, 39:134-138.

[50] SUN Z H, GARBOCZI E J, SHAH S P. Modeling the elastic properties of concrete composites: Experiment, differential effective medium theory, and numerical simulation[J]. Cement and Concrete Composites, 2007, 29(1):22-38.

[51] 蔡渝新，刘清风. 碱激发混凝土抗氯离子侵蚀性能的数值研究[J]. 建筑材料学报, 2023, 26(6):596-603, 622.
CAI Yuxin, LIU Qingfeng. Numerical estimation on chloride erosion resistance of alkali-activated concrete[J]. Journal of Building Materials, 2023, 26(6): 596-603, 622. (in Chinese)

[52] ZHENG J J, ZHOU X Z. Analytical solution for the chloride diffusivity of hardened cement paste[J]. Journal of Materials in Civil Engineering, 2008, 20(5):384-391.

[53] 邓超. 水泥颗粒形貌及粒径分布对水化反应过程的影响[D]. 重庆：重庆大学, 2017.
DENG Chao. The effects of cement particle shape and size distribution on hydration process[D]. Chongqing: Chongqing University, 2017. (in Chinese)