

何 锐,郭 健,胡元元,等. 水泥基材料水分传输及数值模拟方法研究进展[J]. 长安大学学报(自然科学版),2023,43(6):1-12.
HE Rui, GUO Jian, HU Yuan-yuan, et al. Research progress on moisture transport and numerical simulation methods of cement-based materials[J]. Journal of Chang'an University (Natural Science Edition), 2023, 43(6): 1-12.

DOI:10.19721/j.cnki.1671-8879.2023.06.001

水泥基材料水分传输及数值模拟方法研究进展

何 锐¹, 郭 健¹, 胡元元², 李 荣², 房建宏³

(1. 长安大学 材料科学与工程学院, 陕西 西安 710064; 2. 尧柏特种水泥技术研发有限公司, 陕西 西安 710100; 3. 青海省交通科学研究院, 青海 西宁 810016)

摘 要:为了准确分析水分对水泥基材料性能的影响,从水分传输机理、孔结构对水分传输的影响以及水分传输的表征方法等方面系统总结了水泥基材料水分传输的研究进展,并对水泥基材料水分传输的研究发展趋势进行了展望。结果表明:水泥基材料在水分传输的驱动力主要来自渗透作用、扩散作用和毛细作用;连通孔作为水泥基材料水分传输的通道,其临界孔隙率、孔隙分布以及孔径大小等均会影响水分传输的速率;水泥基材料中水分传输虽然可以利用传统试验方法与现代无损测试方法对其进行研究,但是这些手段需要人工多次测量,不仅耗费大量的时间且误差较大,利用不同的数值模拟方法分析水泥基材料水分传输能够获得较好的结果。此外,目前对于水分在水泥基材料内部的传输,大多数研究都忽略渗透作用以及扩散作用的影响,而只是把毛细作用力作为水分传输的驱动力;且利用数值模拟的方法分析水泥基材料的水分传输时大多是在分子尺度上进行研究,并将水分视为一维传输。未来水泥基材料水分传输的研究首先是要系统的考虑水分传输的 3 个驱动力;其次,研究水分传输时最好采用多维的数值模型;最后,应当寻求更为先进的数值模拟方法分析水泥基材料的水分传输。

关键词:道路工程;水泥基材料;水分运移;数值模拟;研究进展;综述

中图分类号:U414

文献标志码:A

文章编号:1671-8879(2023)06-0001-12

Research progress on moisture transport and numerical simulation methods of cement-based materials

HE Rui¹, GUO Jian¹, HU Yuan-yuan², LI Rong², FANG Jian-hong³

(1. School of Materials Science and Engineering, Chang'an University, Xi'an 710064, Shaanxi, China;

2. Yaobai Special Cement Technology R&D Co. Ltd, Xi'an 710100, Shaanxi, China;

3. Qinghai Research Institute of Transportation, Xining 810016, Qinghai, China)

Abstract: To accurately analyze the effect of moisture on the properties of cement-based materials, the research progress of moisture transport in cement-based materials from the aspects of the moisture transport mechanism of cement-based materials was systematically summarized, the effect of pore structure on moisture transport, and the method of characterization of moisture transport, and the development trend of the research on moisture transport in cement-based

收稿日期:2023-06-19

基金项目:国家自然科学基金项目(52278429);陕西省重点研发计划项目(2022GY-422);陕西省交通科技项目(20-16K, 21-50K)

作者简介:何 锐(1984-),男,湖北襄阳人,教授,博士研究生导师,E-mail:heruia@163.com。

materials was given. The results show that the driving force of moisture transport in cement-based materials mainly comes from osmosis, diffusion, and capillarity. The connecting pores, as the channel of moisture transport in cement-based materials, its critical porosity, pore distribution, and pore size, which will affect the rate of moisture transport. Although moisture transport in cement-based materials can be investigated using traditional experimentation methods and modern non-destructive testing methods, these require multiple manual measurements, which are time-consuming and subject to considerable inaccuracies. The numerical simulation methods are used to analyze the moisture transport in cement-based materials to obtain better results. In addition, most of the scholars ignore the influence of osmosis and diffusion and only take the capillary force as the driving force of moisture transport in cement-based materials, and most of the numerical simulation methods to analyze the moisture transport in cement-based materials are carried out at the molecular scale, the moisture is regarded as a one-dimensional transport. Therefore, the future development trend of moisture transport in cement-based materials is to systematically consider the three driving forces of moisture transport firstly. Secondly, it is preferable to adopt multi-dimensional numerical models for the study of moisture transport. And lastly, more advanced numerical simulation methods should be sought to analyze the moisture transport in cement-based materials. 3 figs, 77 refs.

Key words: road engineering; cement-based material; moisture transport; numerical simulation; research progress; review

0 引言

水泥基材料因具有取材便利、原材料价格低廉、强度高等特点,被广泛应用于隧道港口、道路桥梁等工业民用建筑领域中,是世界范围内使用最广的建筑材料^[1]。然而,水泥基材料会在服役期间与周围的环境发生相互作用,使其还未达到使用设计寿命就出现了耐久性问题,不仅造成了大量的经济损失和安全隐患,由此产生的建筑垃圾还会对环境造成不利影响。因此,提高水泥基材料的耐久性以及延长服役寿命显得尤为重要。

事实上,虽然有众多因素影响水泥基材料耐久性,但是这些影响因素都与水分的传输密切相关。比如,水泥基材料在服役期间,外界环境中的水分一方面会作为水泥基材料中物质运输的载体,使氯离子、硫酸根离子等侵蚀性介质迅速进入水泥基材料内部,加剧水泥基材料劣化的进程;另一方面,外界环境中的水分进入到水泥基材料内部时,会让其内外部之间存在湿度梯度,从而使水泥基材料因为干燥收缩而导致开裂,缩短水泥基材料的使用寿命^[2]。因此,研究水泥基材料的水分传输过程,对于分析水泥基材料结构性能的劣化以及耐久性都具有十分重要的意义。然而,由于水分在水泥基材料内部的传输会因为服役环境中含水量的不同而存在一种或多

种不同的传输机制,用同种传输机制去描述不同服役环境下水泥基材料的水分传输时,其结果也会存在差异^[3]。近年来,针对如何去描述不同服役环境下水泥基材料的水分传输这一问题展开研究,已经取得了诸多进展。左胜浩等在研究低气压环境中硬化水泥浆体水分传输特性发现,影响水分传输的主要原因是水蒸气扩散系数、对流传质系数以及材料本征渗透率的增大^[4]。王家赫等研究表明,考虑风速影响的表面扩散模型可以较好地描述在空气低压作用下混凝土的水分传输情况^[5]。王俊洁等研究了在冻融循环前后水泥砂浆的水分传输指出,水分传输受毛细孔、气孔、裂纹三者的共同作用影响^[6]。此外,尽管水泥基材料的水分传输存在多种机制,但其机制模型一般都为经典的非线性扩散方程,而对于非线性扩散方程的求解也主要分为数值解和解析解。其中,数值解的优点是速度快,适用范围广,可以直接求解方程;解析解虽然可以分析误差的界,但是稳定性不好且解的精度不高^[7]。

鉴于此,本文在详细总结国内外相关文献的基础上,系统论述了水泥基材料的水分传输过程,主要包括水泥基材料的水分传输机理以及孔结构对水分传输的影响,总结了水分传输的表征方法,讨论了数值模拟方法在水泥基材料水分传输过程中的应用,分析了目前研究中有待完善之处,并展望该研究发

展趋势。

1 水泥基材料的水分传输

1.1 水泥基材料水分传输机理

1.1.1 饱和及干燥状态下的水分传输机理

对水泥基材料水分传输机理的研究,大部分都集中在液态水在饱和材料中的传输以及干燥过程中水蒸汽在材料内部的传输^[8]。研究表明:当水泥基材料处于饱和状态下时,其水分传输机理可以用达西定律来描述,此时液态水往往会填满水泥基材料内部的孔隙,毛细作用力消失,水分在压力梯度的作用下进行运移,见图1(a);当水泥基材料在干燥状态时,由于水泥基材料内外部存在浓度差,水蒸汽往往通过扩散进行运移,见图1(b),此时可以采用 Fick 定律来描述水泥基材料的水分传输机理^[9-10],即

$$Q = -\frac{k_1}{\mu} \frac{\Delta P}{L} \quad (1)$$

式中: Q 为液体总流量; k_1 为固有渗透率; μ 为水的黏滞系数; ΔP 为压力差; L 为流经样品的长度。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2)$$

式中: C 为浓度; t 为时间; D 为扩散系数; x 为流经样品的深度。

1.1.2 非饱和状态下的水分传输机理

当水泥基材料的水分是在非饱和状态下传输时,水分并不能完全充满水泥基材料内部的孔隙,毛细吸收的方式便成为了水分侵入材料内部的主要方式,见图1(c)^[10-11]。其毛细吸附作用的表达式为

$$Q = -k_2 \frac{\Delta \Psi}{L} \quad (3)$$

式中: k_2 为非饱和渗透系数; $\Delta \Psi$ 为毛细势能差。

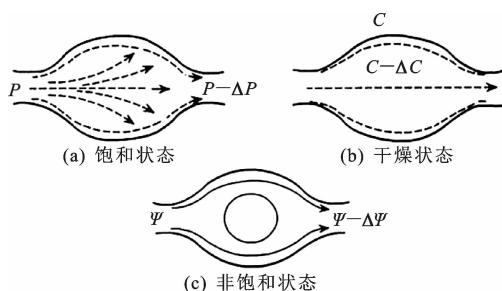


图1 水泥基材料的水分传输机理

Fig. 1 Moisture transport mechanism of cement-based materials

在实际工程中,水泥基材料大都处于非饱和状态,目前鲜有对水泥基材料的非饱和水分传输情况进行系统的理论研究。但在同为非饱和和多孔介质的土壤领域,这一问题被广泛的关注,因而越来越多的

学者开始将土壤界中广泛应用的毛细系数及水力扩散率引入到水泥基材料领域中来^[8]。

如 Hall 等为了探究水泥基材料在非饱和状态下传输时的毛细吸水规律,较早的开展了砖、岩石等一系列多孔建筑材料的毛细吸水试验,发现水分在毛细管作用下的传输存在“时间平方根”规律,即水分渗透深度与多孔材料吸水时间的算术平方根呈线性相关^[12-13]。然而,Lockington 等发现,水泥基材料在毛细吸水后期的“时间平方根”规律不再满足线性关系,而发生了偏移,并认为发生偏移的主要原因是水泥基材料发生再次水化,材料内部的孔隙被再次水化产生的水化产物所填充^[14-15]。Wittmann 等通过对“时间平方根”方程进行了修正,发现经修正后的水分渗透深度与水泥基材料吸水时间的方程可以更好地适用于毛细吸水后期^[16],修正后的方程形式为

$$Y = \frac{W}{S} = K \sqrt{t} + K_0 \quad (4)$$

式中: Y 为水分渗透深度; W 为吸收水的体积; S 为样品暴露在水中的表面面积; K 为吸附系数或渗透系数; K_0 为修正项。

Bazant 等发现随着干燥过程的进行,水泥基材料内部水分的损失速度要比线性扩散理论方程预测的慢得多^[17-18]。因此,为了准确描述非饱和水泥基材料在干燥过程中内部相对湿度的变化,提出了非线性扩散理论方程,发现用非线性扩散理论方程所预测的水泥基材料内部相对湿度与测试数据具有很好的相关性。该非线性扩散理论方程形式为

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \text{div}(C(H) \nabla H) \quad (5)$$

式中: H 为相对湿度; $C(H)$ 为扩散系数; ∇H 为相对湿度梯度。

此外,非线性扩散理论方程将扩散系数视为特定含水量的函数,因此需测量随时间的推移水泥基材料内部的水分分布情况,且适用于研究水分在水泥基材料内部传输过程中的水分分布。

Savage 等为了验证土壤领域的 Richards 水分传输方程是否适用于水泥基材料中的非饱和水分传输,在假定一维水分传输的情况下,对4种配合比的水泥基材料试件施加5种相对湿度来代表不同的恒定边界条件;通过将试验测定与 Richards 水分传输方程预测的水分含量进行比较验证,发现测量值和预测值之间的相对误差小于10%^[19]。Richards 水分传输方程在水泥基材料非饱和水分传输中的应用

是有效的。此外,由于 Richards 水分传输方程中的扩散系数取决于水泥基材料内部的水分含量传输系数,而该传输系数可以通过材料的水分瞬时分布曲线直接获得,且每种材料的水分含量传输系数是特定的,故该方程实用性较好。

综上所述,水泥基材料的水分传输机理与水泥基材料所处的服役环境有关,主要包括在饱和状态下的渗透作用、干燥环境时的扩散作用以及非饱和状态下的毛细吸收作用。非线性扩散理论方程与 Richards 水分传输方程也能较好地描述水泥基材料在非饱和状态下的水分传输情况。

1.2 孔结构对水分传输的影响

水泥基材料中参与水分传输的水主要包括自由水、物理吸附水以及层间水(图 2)。其中,水泥基材料中参与水分传输的液态水主要依靠渗透或毛细吸收作用在连通孔中进行运移,参与水分传输的水蒸汽主要通过浓度梯度扩散或者分子热运动在连通孔中进行运移。因此,只要是连通孔均可成为水分传输的通道,而水泥基材料中的连通孔主要由毛细孔、水化硅酸钙凝胶孔及界面过渡区中的孔组成^[20]。除此之外,Dale 等认为水泥基材料的临界孔隙率、孔隙半径、曲折度以及孔隙分布都会影响水分在水泥基材料中的传输效率^[21]。

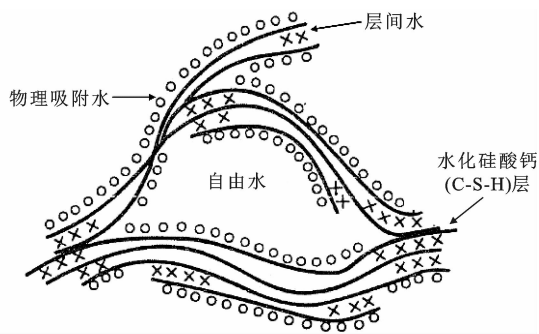


图 2 水泥基材料中参与水分传输的水

Fig. 2 Water involved in moisture transport in cement-based materials

1.2.1 临界孔隙率对水分传输的影响

Garboczi 等采用元胞自动机的计算机模型来模拟水泥基材料在水化过程中的微观结构发展,发现水泥基材料的毛细孔隙率渗流临界值为 0.18,当水泥基材料的毛细孔隙率低于这一临界值时,不论水泥基材料的初始孔隙率有多大、是否添加矿物掺合料、水灰比是多少,水泥基材料的毛细孔均会被阻断而不再连通^[22]。Parrott 认为随着毛细管孔隙率减小到 0.2 以下时,孔隙似乎变得不那么连通,吸水率会是非线性的降低^[23]。Garboczi 等还借助渗流理论

计算得出,当毛细孔隙率小于 0.20 ± 0.05 时,毛细孔会被生成的水化硅酸钙凝胶所填充,此时,水分只能在水化硅酸钙凝胶孔中进行传输^[24]。故当水泥基材料的孔隙率低于临界孔隙率时,其材料内连通孔的比例会随着水泥的水化而减少,且最终毛细孔隙可能会被水化产物完全堵塞。

1.2.2 孔隙半径及分布对水分传输的影响

Seishi 等通过试验发现,硬化水泥基材料的渗透性与毛细孔的孔隙半径有关,当孔隙的半径值在 $75 \sim 750 \text{ nm}$ 时,其渗透率随着孔隙半径的增大而增大^[25]。此外,水泥基材料中还因骨料的存在,会阻碍水泥基材料内部水分的传输,使得水分传输路径的曲折度增加,影响水泥基材料的传输速率。而作为骨料与硬化水泥浆体之间的薄层部分,界面过渡区被认为是水泥基材料微观结构的薄弱环节,其高孔隙率及较大的孔隙尺寸促进了水分在水泥基材料内部的传输^[26]。并且界面过渡区附近可能还会出现裂缝,并随着裂缝的延伸,骨料周围的界面过渡区会相互搭接而发生连通,极大地提高水分及其他离子的传输速率^[27]。水泥基材料在成型和养护过程中也有可能受到动静荷载等因素的影响,导致水泥基材料内部出现裂缝,成为其水分传输的新通道^[28]。

2 水泥基材料水分传输表征方法

水分在水泥基材料传输的 3 种驱动形式分别是:①在压力梯度作用下的渗透作用;②以浓度梯度为驱动力的扩散作用;③通过毛细作用力驱动的毛细吸收作用^[29]。近年来,随着测试技术的进步,主要通过传统试验方法与现代测试方法相结合来表征水泥基材料的水分传输过程。表征水泥基材料水分传输过程的传统试验方法包括称重法和压力渗透法^[20]。表征水泥基材料水分传输的现代试验方法主要包括核磁共振法(NMR)及 X 射线计算机断层扫描法(X-CT)。

2.1 传统试验方法

2.1.1 称重法

用称重法表征水泥基材料的吸水性能不需要特殊的设备,如图 3 所示。该方法通过密封试件的侧面及上表面,只留下表面进行水分传输,然后随着时间的推移连续称量水泥基材料试件吸水前后的质量变化,并通过计算吸水量 i 来绘制 $i-\sqrt{t}$ 曲线。计算吸水量 i 的表达式为

$$i = \frac{m_t - m_0}{S\rho} \quad (6)$$

式中: m_t 为 t 时刻的试件质量; m_0 为初始时的试件质量; ρ 为水的密度。

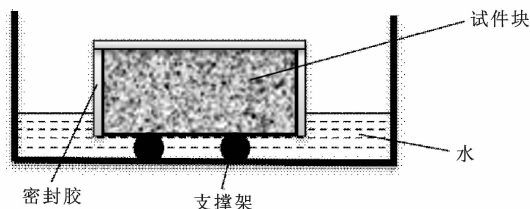


图3 重量法示意

Fig.3 Schematic of gravimetric method

丁倩等利用称重法测定了水泥基材料的保水度及孔隙率,发现水泥基材料的保水度随水灰比的增大而增大,而孔隙率在密封条件下随龄期的增长整体上呈现先增大后减小的趋势^[30]。然而,李明超等认为水泥基材料内部水分传输过程不能通过称量水泥基材料试件吸水前后的质量变化来表示,其仅能用来粗略分析水泥基材料水分传输的特性及规律^[31],因称重法操作比较简单,精度较低,测量过程存在一定的误差^[20,32]。

2.1.2 压力渗透法

压力渗透法是通过加压的方式使水渗入到水泥基材料中,然后观察水的渗透深度,通常采用渗透系数来评价水泥基材料的抗水渗透性。Bošnjak 等通过外部加压的方式测得水泥基材料的渗透性,发现其渗透性随着温度的升高而稳定上升,并认为渗透性增加主要是水泥基材料内部孔隙数量的变化,即大孔数量的占比以及总孔隙率都在增加,从而促进了水分渗透^[33]。Xiong 等通过压力渗透法得出水泥基材料试件渗透的水量与时间平方根呈线性关系,并将其直线的斜率定义为水泥基材料的渗透系数^[34]。何锐等研究了不同养护环境下水泥基材料抗渗性能的变化,发现当处于温差比较大及湿度较低的情况下,水泥基材料的抗渗性能最差^[35]。

压力渗透法可以利用达西定律计算水泥基材料的渗透系数,但是压力渗透法的局限在于测量水泥基材料的渗透系数时,其内部必须要有连通的孔隙,因为只有存在连通孔水分才能进行渗透。故当水泥基材料在饱和状态下进行水分传输时,则无法利用压力渗透法研究其水分传输规律。

2.2 现代试验方法

2.2.1 核磁共振法

NMR 是一种在室温 ($23\text{ }^{\circ}\text{C} \pm 1\text{ }^{\circ}\text{C}$) 下进行定量

测量材料中水含量 (^1H) 的技术^[36]。在这种技术中,原子核的磁矩被操纵,核磁共振弛豫信号的强度与氢质子的数量呈正相关。而水泥基材料中具有可移动的氢质子,这些氢质子的弛豫时间谱会通过龄期的改变去反映水泥基材料中水分所处空间的变化,且水化过程中水泥基材料表面面积的增加及孔结构的形成和变迁均与这种变化密切相关,故可利用其研究水泥基材料水化过程中水分传输情况^[37-39]。

Song 鉴于多孔水泥基材料孔隙填充液通常表现出强烈的磁共振信号,并且磁共振的功率允许通过自旋弛豫、扩散、流动和成像直接检测流体,无需与样品物理接触,故认为 NMR 可以用于研究多孔水泥基材料中的水分传输过程^[40]。此外,水中的氢质子还会与孔壁发生相互作用导致信号发生衰减,所以可以应用于研究水泥基材料中的水化反应和水分传输,而由此产生的弛豫速率还与孔隙结构成正比,因此还可以通过弛豫速率来量化水泥基材料的水分分布情况^[37-38,41]。Friedemann 等通过研究横向弛豫时间分布特征峰对时间的依赖性,定量监测了水化过程中水分在水泥基材料中的转变过程,发现物理结合的孔隙水具有足够的流动性,可以确保在水泥基材料水化过程中的休眠期和加速期,水分可以均匀分布到周围的水泥基材料中^[42]。

尽管 NMR 技术可以用较高的精度和灵敏度来表征水泥基材料的水分传输,但 NMR 对操作要求比较高。除此之外,由于水泥及其矿物掺和料中含有大量铁相等顺磁性物质,这些顺磁性物质会导致 NMR 内磁场分布不均匀,影响核磁共振信号,进而使试验结果出现一定的偏差^[43]。

2.2.2 X 射线计算机断层扫描法

X-CT 法是一种利用计算机来处理 X 射线数据,从而再现被扫描物体断层区域图像的无损检测技术^[44]。它可以非破坏性地检测样品的内部结构,从而连续监测水分进入水泥基材料的演变过程,并且这个过程可以通过 2D 或 3D 图像映射进行重建^[45]。

严辰成等通过 X-CT 法得到水泥基材料内部的三维孔隙结构图,并认为水灰比对水分传输影响较大,因为随着水灰比的降低,水泥基材料内部的毛细孔及界面过渡区孔的裂缝明显减少^[46]。杨林等通过在水中加入氯化铯来增强 CT 图像中水的 X 射线衰减信号,从而非破坏性地连续跟踪水泥基材料中水的动态传输过程,得到了水分渗透深度与时间平

方根呈线性关系的规律,并提出计算水泥基材料渗透系数的理论模型^[47]。Zhang 等在 3D 打印水泥基材料层间区域使用 X-CT 进行原位跟踪水分的传输过程,发现不同夹层区域的孔隙特性存在差异。这些差异会导致不同方向的水传输速率不同,使得抗水渗透能力具有明显的各向异性^[48]。

董必钦等认为应用 X-CT 技术不仅可以定量计算水泥基材料在不同吸水时间下的水分渗透程度,还能研究水分传输时毛细吸收系数对其的影响^[49]。然而,Boone 等发现 X-CT 扫描过程需要花费较长的时间,而水分前锋的位置会随着水分在水泥基材料中的动态运移持续发生变化^[50]。因此,王小虎等认为无论是否使用高原子序数的盐(如 CsCl)来增强 X-CT 图像灰度,水泥基材料的动态吸水过程都难以通过 X-CT 扫描测试方法准确表征^[51]。

3 水泥基材料水分传输数值模拟方法

虽然传统试验方法与现代无损测试方法都能够对水分在水泥基材料中的传输过程进行研究,但这些手段会耗费大量的时间与精力且工序复杂。因此,可以借助已有数学模型来对水泥基材料的水分传输进行数值模拟。目前水泥基材料水分传输的模拟数值方法主要有有限元法(FEM)、细观模型(MM)、分子动力学法(MDM)以及格子玻尔兹曼法(LBM)。

3.1 有限元法

FEM 是一种能够求出偏微分方程边值问题近似解的数值技术^[52]。求解时可以把水泥基材料整个区域分解成若干个子区域,每个子区域就称作有限元。

晁鹏飞等基于 Fick 定律的非线性偏微分方程,利用 FEM 模拟出高性能水泥基材料内部水分扩散,发现水泥基材料内部水分湿度随着干燥深度的增加而减小^[53]。Akand 等通过快速傅里叶变换生成透水水泥基材料的二维重建模型,并使用 FEM 来预测模型的渗透率,发现由重建方法生成的透水水泥基材料试件能够有效地表征水泥基材料中的孔隙分布,且模型的精度在 90% 以上^[54]。在湿度为 60%、温度为 20℃ 环境下,郭远臣等利用 ABAQUS 有限元软件中的质量扩散模块对再生骨料水泥基材料的内部水分迁移进行了试验研究和有限元分析,发现在扩散过程中,水分先从小于水泥基材料表面开始扩散,随后逐渐扩散至水泥基材料内部,且其水分浓度呈梯度分布^[55]。Li 等提出了一种 3D FEM 来研

究饱和水泥基材料的水分传输,通过一系列数值试验,来计算不同体积分数粗骨料的水泥基材料渗透系数,发现经数值计算与物理试验得出的渗透系数相符;其还通过数值计算定量研究了界面过渡区和骨料对水泥基材料渗透性的影响,研究结果表明,当骨料透水以及界面过渡区孔隙率较高时,能显著提高水泥基材料的渗透性^[56]。Van Belleghem 等通过使用 FEM 求解 3D Richards 方程来模拟开裂和未开裂水泥基材料的毛细水传输规律,并在模型中施加了现实的边界条件,通过对具有一个或多个个人工裂缝的水泥基材料试件进行重力吸水试验和 X 射线照相来验证所开发的数值模型,发现其数值结果的瞬态水分布与试验结果一致^[57]。Smyl 等分别用经典等温不饱水分传输模型以及双渗透水分传输模型来模拟水泥基材料中的水分侵入,并用有限元软件 HYDRUS 3D 进行求解,将数值模拟的结果与吸水率的试验测量结果进行比较;结果表明,经典等温不饱水分传输模型很好地模拟了水分进入水泥基材料的早期阶段,而双渗透水分传输模型很好地模拟了后期水泥基材料的水分传输过程^[58-59]。

尽管 FEM 在求解时会基于连续介质理论把物体分解成若干个有限元,使复杂的水泥基材料能用相应的单元简化,然而在简化时水泥基材料会被视为是一种各向同性的均质材料,因此模拟结果精度可能会出现浮动。

3.2 细观模型

通过求解不同类型的细观格构来模拟各相材料复杂细观结构及其相互作用,MM 法在模拟水泥基材料的非均质特性以及水分传输等方面被认为是有效的^[60]。

王立成等提出了计算水泥基材料裂缝处水分传输系数的细观格构网络模型,并建立了只含有 1 条裂缝的水泥基材料二维细观格构网络模型,依托该模型开展了在干湿循环交替环境下开裂水泥基材料水分传输的细观数值模拟仿真分析;并通过对比已有的试验数据,验证了该二维细观格构网络模型的正确性^[61-62]。此外,他还根据模型所预测的相对含水量,较准确地分析了水分在开裂水泥基材料中的传输过程^[63]。梁敏飞等基于在受限圆柱空间内生随机椭圆粒子的方法建立了水泥基材料的三维细观模型,该模型通过假定水泥基材料是由砂浆、骨料和界面过渡区组成的三相复合材料,来表征水泥基材料的渗透性,通过对比试验和数值结果,证实了该细观模型的适用性^[64-65]。Abyaneh 等认为用三角

剖分进行表面网格化骨料颗粒,以及用四面体单元离散多孔水泥浆体所形成的水泥基材料细观结构可以独立于离散化大小来模拟水泥基材料最小的微裂纹,并用该细观结构模拟了水泥基材料的扩散系数和渗透率,模拟结果表明,与多孔基体相比,微裂纹对水分传输性能的影响在具有更致密的水泥基材料上更为显著^[66]。

MM法可以采用不同截面面积以及不同种类的格构单元来确定水泥基材料水分运移的传输系数,因此在模拟水泥基材料的非均质性方面是可行的。但该计算模型需要考虑各相材料的复杂相互作用且还要求解大规模的非线性方程,对计算机性能要求较高。

3.3 分子动力学法

通过建立材料的分子结构模型,MDM可以用来模拟水泥基材料中分子在力场中的物理化学变化过程,继而探究微观尺度下水泥基材料的性能形成机理^[67]。

李登科等采用MDM系统地研究了水分子在水化硅酸钙凝胶孔中的传输过程,发现在分子尺度上,因为强烈的界面作用,水分子在毛细孔中的传输速率会明显大于其在纳米孔道内^[68]。Hou等为了从分子水平上研究水泥基材料水化产物的迁移行为,通过采用MDM模拟了水分子在水泥水化产物的类似物托贝莫来石在纳米孔中的传输,发现水分子会在硅酸盐链间的通道中扩散,并表现出密度大、择优取向好、界面组织有序、扩散速率低等特性^[69]。贾玉婷等还分别对水分子饱和状态及非饱和状态下在水化硅酸钙纳米孔道中的传输和动力学方面利用MDM进行了模拟分析,得到水分子在非饱和状态下传输的驱动力为毛细作用,饱和状态时的驱动力则主要是上下部水分子的扩散作用^[70]。Deng等模拟了不同钙硅比的水化硅酸钙凝胶混合相界面,建立了3种不同的纳米凝胶孔道模型,用MDM模拟研究了水分子和水化硅酸钙凝胶表面之间的相互作用,发现水分子的分布因其自身羟基的不同而存在差异^[71]。Zehtab等通过MDM评估了水分子在不同温度下对水化硅酸钙凝胶扩散系数的变化情况,模拟结果表明,在不同的温度下,水分子的扩散系数随温度的升高而变大^[72]。

运用MDM模拟水泥基材料的水分传输时,往往都是模拟了水分子在水泥水化产物类似物中的传输,而这类类似物与真实的水化产物存在差异,只能在一定程度上反映水泥基材料水分传输的规律。此

外,在模拟水泥基材料的水分传输时,大多聚焦在水分饱和状态下的传输,忽略了水泥基材料的水分在非饱和状态下传输的情况。

3.4 格子玻尔兹曼法

LBM是一种从MDM发展而来,在介观尺度上求解流体力学方程的离散化方法,并利用Boltzmann统计以及粒子的迁移和碰撞来描述物体的微观物理过程^[73]。因此可以用来模拟微细观尺度上不规则形状介质(如水泥基材料)的复杂流动问题。

李凯等采用部分反弹LBM模拟了水分在砂浆内部的传输过程,结果表明,砂浆的水分渗透系数与界面过渡区的厚度、孔隙率以及骨料含量有关,且当界面过渡区的厚度及孔隙率一定时,水泥浆体的水分渗透系数将会低于砂浆的水分渗透系数^[74]。李东遥等利用Shan-Chen模型的LBM模拟了水泥基材料在不同水灰比下的水分传输,结果表明其水分传输速率会随水灰比增大而变快,且在水分传输的不同时期,液相的输送也不一样^[73]。在水分传输的初期,由于受到毛细作用,液相会迅速充满模型表面附近的孔隙;而到了水分传输的中后期,液相会在压力差的作用下,先把较大的孔隙通道填满,之后再填充较小的孔隙,并与含有凝结水的孔隙连通。Zhang等使用多松弛时间碰撞算子的LBM对基于微观结构水泥基材料的渗透率进行建模,分析了饱和水泥基材料中的水分传输,通过从已有文献中获得的试验数据来验证分析,结果表明,模拟的渗透率与早期样品的实测渗透率接近,并且认为临界孔隙率是决定水泥基材料渗透性的关键参数^[75]。Zalzale等开发了一个基于部分反弹的3D格子Boltzmann模型,并用于计算水泥基材料在不同饱和度和下的渗透率,研究发现,3D LBM非常适合复杂多尺度水泥基材料微观结构内部渗透率的数值计算,且当毛细管孔隙完全饱和时,模拟出来的渗透率与测量值非常吻合^[76-77]。

相比于分子动力学法在微观尺度下与流体力学法在宏观尺度下进行模拟,LBM可在介观尺度上模拟多孔介质的多相流,因此其在模拟水泥基材料水分传输方面具有更大的优势。但利用LBM计算模拟时,往往会忽略水泥基材料骨料的形状厚度以及水泥持续水化等因素对水泥基材料水分传输的影响,导致模拟结果存在一定的偏差。

利用数值模拟方法研究水泥基材料的水分传输不仅可以节约大量的人力物力,而且还能够获得较好的结果。但是这些研究大多数都依赖于现有的水

泥基材料样本的图像来重建模型。因此,如若未能通过试验获得水泥基材料样本的图像或者忽略水泥基材料微观结构的部分特性,则利用数值模拟方法来研究水泥基材料的水分传输将会受到限制。

4 结 语

(1)水分在水泥基材料内部传输受 3 种不同的驱动力作用;且水分渗透深度与水泥基材料吸水时间的算术平方根呈线性相关;水泥基材料中的毛细孔、水化硅酸钙凝胶孔以及界面过渡区中的孔均会对水泥基材料水分传输产生不同程度的影响。

(2)研究水泥基材料的水分传输机理时,多以毛细作用力为驱动力来研究水泥基材料的水分传输过程,而忽略渗透作用及扩散作用对其影响。因此,今后应系统考虑水分运移的 3 个驱动力。

(3)水泥基材料实际上是由浆体、骨料、界面过渡区、裂缝等组成的多相复合材料,利用数值模拟分析水泥基材料水分传输时,不应将水泥基材料假定成各向同性的均质材料,且为了使模拟水泥基材料内部水分传输规律的结果更加准确,应该使用三维的水分数值传输模型。

(4)水泥基材料在不同尺度下的组成分布存在差异,因此利用数值方法模拟水泥基材料水分传输时,其理论方法和力学模型应随着计算机技术的更新与离散元理论的发展进行更系统和深入的研究。

参考文献:

References:

- [1] 李洪马,潘志华,陈阳义,等. 水泥基材料水分传输的影响因素研究[J]. 混凝土,2015(9):97-100.
LI Hong-ma, PAN Zhi-hua, CHEN Yang-yi, et al. Research on the factors influencing water transport in cement-based materials[J]. Concrete, 2015(9):97-100.
- [2] 王冬丽,杨 策,潘慧敏,等. 水泥基材料孔结构与吸水性能关系研究进展[J]. 硅酸盐通报,2021,40(5):1420-1428,1440.
WANG Dong-li, YANG Ce, PAN Hui-min, et al. Research progress on relationship between pore structure and water absorption performance of cement-based materials[J]. Bulletin of the Chinese Ceramic Society, 2021, 40(5):1420-1428, 1440.
- [3] 付文恺. 混凝土内部水分传输特性与二维渗水监测研究[D]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学,2018.
FU Wen-kai. Study on moisture transfer characteristics and two-dimensional seepage monitoring in concrete[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2018.
- [4] 左胜浩,元 强,黄庭杰,等. 低气压环境下硬化水泥浆体的水分传输特性[J]. 硅酸盐学报,2023,51(5):1104-1114.
ZUO Sheng-hao, YUAN Qiang, HUANG Ting-jie, et al. Moisture transfer characteristics of hardened cement pastes in low air pressure[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2023, 51(5):1104-1114.
- [5] 王家赫,谢永江,冯仲伟,等. 列车气动效应作用下隧道衬砌混凝土水分传输理论研究[J]. 中南大学学报(自然科学版),2023,54(4):1613-1621.
WANG Jia-he, XIE Yong-jiang, FENG Zhong-wei, et al. Theoretical study on moisture transfer in tunnel lining concrete under train aerodynamic effect[J]. Journal of Central South University (Science and Technology), 2023, 54(4):1613-1621.
- [6] 王俊洁,薛善彬,张 鹏,等. 引气剂对冻融循环前后砂浆毛细吸水规律的影响[J]. 建筑材料学报,2022,25(10):1007-1014.
WANG Jun-jie, XUE Shan-bin, ZHANG Peng, et al. Effect of air entraining agent on capillary water absorption of mortar before and after freeze-thaw cycle[J]. Journal of Building Materials, 2022, 25(10):1007-1014.
- [7] 张 脩,赵鸿铎,赵队家. 水泥混凝土板水分迁移模型的近似解析解[J]. 同济大学学报(自然科学版),2015,43(10):1528-1535.
ZHANG Xiao, ZHAO Hong-duo, ZHAO Dui-jia. Approximate analytical solution of water movement in concrete slabs[J]. Journal of Tongji University (Natural Science), 2015, 43(10):1528-1535.
- [8] 刘兆麟. 非饱和水泥基材料中水分传输的数值模拟研究[D]. 青岛:青岛理工大学,2018.
LIU Zhao-lin. Numerical simulation of water transport in unsaturated cement-based materials[D]. Qingdao: Qingdao Technology University, 2018.
- [9] YANG Z F, WEISS W J, OLEK J. Water transport in concrete damaged by tensile loading and freeze-thaw cycling[J]. Journal of Materials in Civil Engineering, 2006, 18(3):424-434.
- [10] 张苑竹,李晓珍,魏新江,等. 水下隧道混凝土中水分运移[J]. 硅酸盐学报,2015,43(4):368-375.
ZHANG Yuan-zhu, LI Xiao-zhen, WEI Xin-jiang, et al. Water penetration in underwater concrete tunnel[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2015, 43(4):368-375.
- [11] 王立成,鲍玖文,李淑红. 损伤混凝土毛细吸水性能试

- 验研究和水分分布预测分析[J]. 大连理工大学学报, 2015, 55(6): 597-604.
- WANG Li-cheng, BAO Jiu-wen, LI Shu-hong. Experimental study of capillary water absorption in damage concrete and prediction of water content distribution [J]. Journal of Dalian University of Technology, 2015, 55(6): 597-604.
- [12] HALL C, KALIMERIS A N. Water movement in porous building materials—V: Absorption and shedding of rain by building surfaces[J]. Building and Environment, 1982, 17(4): 257-262.
- [13] HALL C, HOFF W D, SKELDON M. The sorptivity of brick; Dependence on the initial water content[J]. Journal of Physics D (Applied Physics), 1983, 16(10): 1875-1880.
- [14] LOCKINGTON D, PARLANGE J Y, DUX P. Sorptivity and the estimation of water penetration into unsaturated concrete[J]. Materials and Structures, 1999, 32(5): 342-347.
- [15] LOCKINGTON D A, PARLANGE J Y. Anomalous water absorption in porous materials[J]. Journal of Physics D (Applied Physics), 2003, 36(6): 760-767.
- [16] WITTMANN F H, ZHANG P, ZHAO T. Einfluss kombinierter umweltbelastungen auf Die best? Nndigkeit von stahlbetontragwerken/influence of combined environmental loads on durability of reinforced concrete structures [J]. Restoration of Buildings and Monuments, 2006, 12(4): 349-362.
- [17] BAŽANT Z P, NAJJAR L J. Drying of concrete as a nonlinear diffusion problem[J]. Cement and Concrete Research, 1971, 1(5): 461-473.
- [18] BAŽANT Z P, NAJJAR L J. Nonlinear water diffusion in nonsaturated concrete[J]. Matériaux et Construction, 1972, 5(1): 3-20.
- [19] SAVAGE B M, JANSSEN D J. Soil physics principles validated for use in predicting unsaturated moisture movement in Portland cement concrete[J]. ACI Materials Journal, 1997, 94(1): 63-70.
- [20] 杨 林. 非饱和混凝土水分与氯离子传输行为研究[D]. 南京: 东南大学, 2017.
- YANG Lin. Study on moisture and chloride ion transport behavior of unsaturated concrete [D]. Nanjing: Southeast University, 2017.
- [21] DALE P, BENTZ, EDWARD J, et al. Percolation of phases in a three-dimensional cement paste microstructural model[J]. Cement and Concrete Research, 1991, 21(2/3): 325-344.
- [22] GARBOCZI E J, BENTZ D P. Computer simulation of the diffusivity of cement-based materials[J]. Journal of Materials Science, 1992, 27(8): 2083-2092.
- [23] PARROTT L J. Variations of water absorption rate and porosity with depth from an exposed concrete surface; Effects of exposure conditions and cement type[J]. Cement and Concrete Research, 1992, 22(6): 1077-1088.
- [24] GARBOCZI E J, BENTZ D P. Modelling of the microstructure and transport properties of concrete [J]. Construction and Building Materials, 1996, 10(5): 293-300.
- [25] SEISHI G, ROY D M. The effect of W/C ratio and curing temperature on the permeability of hardened cement paste [J]. Cement and Concrete Research, 1981, 11(4): 575-579.
- [26] SHARMA M, BISHNOI S. The interfacial transition zone; Microstructure, properties, and its modification [M]//RAO A R M. Advances in Structural Engineering, Vol 2; Lecture Notes in Civil Engineering. Singapore: Springer Singapore, 2018: 745-754.
- [27] 欧阳利军, 安子文, 杨伟涛, 等. 混凝土界面过渡区 (ITZ) 微观特性研究进展[J]. 混凝土与水泥制品, 2018(2): 7-12.
- OUYANG Li-jun, AN Zi-wen, YANG Wei-tao, et al. Research progress on microscopic characteristics of concrete interface transition zone (ITZ) [J]. China Concrete and Cement Products, 2018(2): 7-12.
- [28] PARK S S, KWON S J, SANG H J. Analysis technique for chloride penetration in cracked concrete using equivalent diffusion and permeation [J]. Construction and Building Materials, 2012, 29: 183-192.
- [29] 叶凡凡, 潘志华, 王学兵, 等. 压力下水泥基材料中水分传输规律的研究[J]. 混凝土, 2017(4): 43-46.
- YE Fan-fan, PAN Zhi-hua, WANG Xue-bing, et al. Moisture transport regularity in cement based material under the water pressure [J]. Concrete, 2017(4): 43-46.
- [30] 丁 倩, 黄耀英, 徐小枫, 等. 基于不同测试方法的密封养护水泥砂浆孔隙率和饱水度变化规律[J]. 硅酸盐通报, 2021, 40(11): 3584-3592, 3600.
- DING Qian, HUANG Yao-ying, XU Xiao-feng, et al. Change rule of porosity and saturation of cement mortar under sealed curing condition based on different measured methods [J]. Bulletin of the Chinese Ceramic Society, 2021, 40(11): 3584-3592, 3600.
- [31] 李明超, 冯 达, 张梦溪, 等. 碾压混凝土层间水分非

- 饱和传输试验与数值分析[J]. 水利学报, 2022, 53(1): 86-97, 108.
- LI Ming-chao, FENG Da, ZHANG Meng-xi, et al. Experimental and numerical analysis of unsaturated water transfer of RCC layers[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2022, 53(1): 86-97, 108.
- [32] 凌纪花. 带裂缝水泥基材料水分传输过程的快速可视化表征与量化分析[D]. 深圳: 深圳大学, 2020.
- LING Ji-hua. Rapid visual characterization and quantitative analysis of moisture transfer process of cement-based materials with cracks[D]. Shenzhen: Shenzhen University, 2020.
- [33] BOŠNJAČ J, OŽBOLT J, HAHN R. Permeability measurement on high strength concrete without and with polypropylene fibers at elevated temperatures using a new test setup[J]. Cement and Concrete Research, 2013, 53: 104-111.
- [34] XIONG B, GAO L, CHEN J, et al. Action mechanism for improving water impermeability of concrete surface based on deep penetrating sealer[J]. Construction and Building Materials, 2022, 322: 126424.
- [35] 何 锐, 王 铜, 陈华鑫, 等. 青藏高原气候环境对混凝土强度和抗渗性的影响[J]. 中国公路学报, 2020, 33(7): 29-41.
- HE Rui, WANG Tong, CHEN Hua-xin, et al. Impact of Qinghai-Tibet Plateau's climate on strength and permeability of concrete[J]. China Journal of Highway and Transport, 2020, 33(7): 29-41.
- [36] SNOECK D, PEL L, DE BELIE N. The water kinetics of super absorbent polymers during cement hydration and internal curing visualized and studied by NMR[J]. Scientific Reports, 2017, 7: 9514.
- [37] MULLER A C A, SCRIVENER K L, GAJEWICZ A M, et al. Use of bench-top NMR to measure the density, composition and desorption isotherm of C-S-H in cement paste[J]. Microporous and Mesoporous Materials, 2013, 178: 99-103.
- [38] MULLER A C A, SCRIVENER K L, GAJEWICZ A M, et al. Densification of C-S-H measured by ^1H NMR relaxometry[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2013, 117(1): 403-412.
- [39] 曹天露, 邹定华, 冯春花, 等. ^1H 弛豫时间谱在水泥基材料研究中的应用[J]. 硅酸盐通报, 2018, 37(3): 888-893.
- CAO Tian-lu, ZOU Ding-hua, FENG Chun-hua, et al. Application of relaxation time of ^1H in cement based materials research[J]. Bulletin of the Chinese Ceramic Society, 2018, 37(3): 888-893.
- [40] SONG Y Q. Magnetic resonance of porous media (MRPM): A perspective [J]. Journal of Magnetic Resonance, 2013, 229: 12-24.
- [41] HEIJDEN G, BIJNEN R, PEL L, et al. Moisture transport in heated concrete, as studied by NMR, and its consequences for fire spalling[J]. Cement and Concrete Research, 2007, 37(6): 894-901.
- [42] FRIEDEMANN K, STALLMACH F, KÄRGER J. NMR diffusion and relaxation studies during cement hydration—A non-destructive approach for clarification of the mechanism of internal post curing of cementitious materials [J]. Cement and Concrete Research, 2006, 36(5): 817-826.
- [43] 李春景, 孙振平, 李 奇, 等. 低场核磁共振技术在水泥基材料中的应用[J]. 材料导报, 2016, 30(13): 133-138.
- LI Chun-jing, SUN Zhen-ping, LI Qi, et al. Application of low-field nuclear magnetic resonance in cement-based materials[J]. Materials Reports, 2016, 30(13): 133-138.
- [44] LIU T, ZHANG X, LI Z, et al. Research on the homogeneity of asphalt pavement quality using X-ray computed tomography (CT) and fractal theory[J]. Construction and Building Materials, 2014, 68: 587-598.
- [45] YANG L, ZHANG Y, LIU Z, et al. In-situ tracking of water transport in cement paste using X-ray computed tomography combined with CsCl enhancing[J]. Materials Letters, 2015, 160: 381-383.
- [46] 严辰成, 胡五龙, 朱四荣, 等. 基于 X 射线断层扫描的硬化水泥砂浆孔隙结构分析及表征[J]. 硅酸盐通报, 2019, 38(3): 596-603.
- YAN Chen-cheng, HU Wu-long, ZHU Si-rong, et al. Investigation and characterization of meso pore structure of hardened cement mortar by X-ray computed tomography[J]. Bulletin of the Chinese Ceramic Society, 2019, 38(3): 596-603.
- [47] 杨 林, 张云升, 张春晓. 基于 X-CT 的非饱和水泥基材料水分传输与渗透系数计算[J]. 硅酸盐通报, 2020, 39(12): 3775-3782.
- YANG Lin, ZHANG Yun-sheng, ZHANG Chun-xiao. Water transport and permeability coefficient calculation for unsaturated cement-based materials based on X-CT[J]. Bulletin of the Chinese Ceramic Society, 2020, 39(12): 3775-3782.
- [48] ZHANG Y, QIAO H, QIAN R, et al. Relationship between water transport behaviour and interlayer voids

- of 3D printed concrete[J]. Construction and Building Materials, 2022, 326: 126731.
- [49] 董必钦,郭邦文,刘昱清,等. 水泥净浆水分传输过程可视化表征与定量分析[J]. 深圳大学学报(理工版), 2018, 35(3): 285-291.
- DONG Bi-qin, GUO Bang-wen, LIU Yu-qing, et al. Visualization and quantitative analysis of water transport evolution in cementitious materials[J]. Journal of Shenzhen University (Science & Engineering), 2018, 35(3): 285-291.
- [50] BOONE M A, KOCK T D, BULTREYS T, et al. 3D mapping of water in oolitic limestone at atmospheric and vacuum saturation using X-ray micro-CT differential imaging[J]. Materials Characterization, 2014, 97: 150-160.
- [51] 王小虎,吉克尼都,陈 珊,等. X射线透射成像技术原位追踪混凝土吸水过程[J]. 浙江大学学报(工学版), 2021, 55(4): 727-732, 792.
- WANG Xiao-hu, JI Kenidu, CHEN Shan, et al. Water imbibition in concrete in situ traced by transmission X-ray radiography[J]. Journal of Zhejiang University (Engineering Science), 2021, 55(4): 727-732, 792.
- [52] MAKAROV S N, NOETSCHER G M, RAIJ T, et al. A quasi-static boundary element approach with fast multipole acceleration for high-resolution bioelectromagnetic models[J]. IEEE Transactions on Biomedical Engineering, 2018, 65(12): 2675-2683.
- [53] 晁鹏飞,郑建岚,王雪芳. 高性能混凝土水分扩散数值解法[J]. 福州大学学报(自然科学版), 2007, 35(6): 898-903.
- CHAO Peng-fei, ZHENG Jian-lan, WANG Xue-fang. Numerical algorithm for moisture diffusion in high performance concrete[J]. Journal of Fuzhou University (Natural Science Edition), 2007, 35(6): 898-903.
- [54] AKAND L, YANG M, GAO Z. Characterization of pervious concrete through image based micromechanical modeling[J]. Construction and Building Materials, 2016, 114: 547-555.
- [55] 郭远臣,孙可伟,孙 岩. 基于质量扩散理论再生骨料混凝土水分迁移有限元分析[J]. 昆明理工大学学报(理工版), 2010(3): 38-44.
- GUO Yuan-chen, SUN Ke-wei, SUN Yan. Finite element analysis of moisture migration of recycled aggregate concrete based on mass diffusion theory [J]. Journal of Kunming University of Science and Technology (Science and Technology), 2010(3): 38-44.
- [56] LI X, XU Q, CHEN S. An experimental and numerical study on water permeability of concrete[J]. Construction and Building Materials, 2016, 105: 503-510.
- [57] VAN BELLEGHEM B, MONTOYA R, DEWANCK-ELE J, et al. Capillary water absorption in cracked and uncracked mortar—A comparison between experimental study and finite element analysis [J]. Construction and Building Materials, 2016, 110: 154-162.
- [58] SMYL D, GHASEMZADEH F, POUR-GHAZ M. Modeling water absorption in concrete and mortar with distributed damage[J]. Construction and Building Materials, 2016, 125: 438-449.
- [59] SMYL D, GHASEMZADEH F, POUR-GHAZ M. Can the dual-permeability model be used to simulate unsaturated moisture flow in damaged mortar and concrete? [J]. International Journal of Advances in Engineering Sciences and Applied Mathematics, 2017, 9(2): 54-66.
- [60] 鲍玖文. 混凝土中物质传输过程的细观数值模拟研究[D]. 大连:大连理工大学, 2014.
- BAO Jiu-wen. Study on meso-numerical simulation of material transport process in concrete [D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2014.
- [61] 王立成,鲍玖文. 干湿交替下开裂混凝土中水分传输的细观数值分析[J]. 水利学报, 2016, 47(8): 986-995.
- WANG Li-cheng, BAO Jiu-wen. Mesoscale numerical analysis on moisture transport in cracked concrete subjected to drying-wetting cycles[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2016, 47(8): 986-995.
- [62] WANG L, BAO J, UEDA T. Prediction of mass transport in cracked-unsaturated concrete by mesoscale lattice model[J]. Ocean Engineering, 2016, 127: 144-157.
- [63] 王立成,鲍玖文. 开裂混凝土中水分传输过程的细观模型[J]. 建筑材料学报, 2014, 17(6): 972-977, 983.
- WANG Li-cheng, BAO Jiu-wen. Mesoscale model for water transport in cracked concrete [J]. Journal of Building Materials, 2014, 17(6): 972-977, 983.
- [64] 梁敏飞,封 坤,肖明清,等. 基于材料试验和细观模型的混凝土渗透性研究[J]. 建筑材料学报, 2020, 23(4): 801-809.
- LIANG Min-fei, FENG Kun, XIAO Ming-qing, et al. Water permeability of concrete based on materials experiment and mesoscale model[J]. Journal of Building Materials, 2020, 23(4): 801-809.
- [65] LIANG M, FENG K, HE C, et al. A meso-scale model toward concrete water permeability regarding aggregate permeability[J]. Construction and Building Materials, 2020, 261: 120547.

- [66] ABYANEH S D, WONG H S, BUENFELD N R. Simulating the effect of microcracks on the diffusivity and permeability of concrete using a three-dimensional model[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 119:130-143.
- [67] 李金子. 水泥基材料纳米尺度孔隙的水分输运模拟研究[D]. 泰安:山东农业大学, 2021.
LI Jin-zi. Simulation study on water transport in nano-scale pores of cement-based materials[D]. Taian; Shandong Agricultural University, 2021.
- [68] 李登科, 赵铁军, 卢世伟, 等. 基于分子动力学水分和离子在水化硅酸钙纳米孔道中的传输特性研究[J]. *硅酸盐通报*, 2017, 36(8):2560-2564, 2588.
LI Deng-ke, ZHAO Tie-jun, LU Shi-wei, et al. Transport characteristics of water and ions in nano channels of calcium silicate hydrate based on molecular dynamics[J]. *Bulletin of the Chinese Ceramic Society*, 2017, 36(8):2560-2564, 2588.
- [69] HOU D, LI Z. Molecular dynamics study of water and ions transport in nano-pore of layered structure: A case study of tobermorite[J]. *Microporous and Mesoporous Materials*, 2014, 195:9-20.
- [70] 贾玉婷, 赵铁军, 侯东帅, 等. 非饱和及饱和状态下水化硅酸钙孔道中水分和离子传输的分子动力学研究[J]. *硅酸盐通报*, 2019, 38(3):615-621.
JIA Yu-ting, ZHAO Tie-jun, HOU Dong-shuai, et al. Molecular dynamics study on transport of water and ions in nanometer channel of calcium silicate hydrate unsaturated and saturated state[J]. *Bulletin of the Chinese Ceramic Society*, 2019, 38(3):615-621.
- [71] DENG H, HE Z. Interactions of sodium chloride solution and calcium silicate hydrate with different calcium to silicon ratios: A molecular dynamics study[J]. *Construction and Building Materials*, 2021, 268:121067.
- [72] ZEHTAB B, TARIGHAT A. Molecular dynamics simulation to assess the effect of temperature on diffusion coefficients of different ions and water molecules in C-S-H[J]. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2018, 22(4):483-497.
- [73] 李东遥, 单钰涵, 韩宇栋, 等. 基于 Lattice-Boltzmann 方法的水泥基材料溶液传输过程模拟[J]. *建筑材料学报*, 2021, 24(4):716-725.
LI Dong-yao, SHAN Yu-han, HAN Yu-dong, et al. Numerical simulation of solution transportation in cementitious materials based on Lattice-Boltzmann method[J]. *Journal of Building Materials*, 2021, 24(4):716-725.
- [74] 李凯, 许立, 杨璐璐, 等. 基于部分反弹格子 Boltzmann 方法研究砂浆水渗透性能[J]. *硅酸盐学报*, 2022, 50(10):2701-2711.
LI Kai, XU Li, YANG Lu-lu, et al. Water permeability of mortar investigated by partial bounce-back lattice Boltzmann method[J]. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, 2022, 50(10):2701-2711.
- [75] ZHANG M, YE G, BREUGEL K V. Microstructure-based modeling of permeability of cementitious materials using multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method[J]. *Computational Materials Science*, 2013, 68:142-151.
- [76] ZALZALE M, MCDONALD P J, SCRIVENER K L. A 3D lattice Boltzmann effective media study: Understanding the role of C-S-H and water saturation on the permeability of cement paste[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2013, 21(8):085016.
- [77] TABRIZI E M, TOHIDVAND H R, HAJIALILUEBONAB M, et al. An investigation on the strain accumulation of the lightly EICP-cemented sands under cyclic traffic loads[J]. *Journal of Road Engineering*, 2023, 3(2):203-217.