

DOI:10.16544/j.cnki.cn43-1494/u.202307051988

文章编号:1674-599X(2023)05-0017-07

引用格式:胡守旺,龙永康,符峰源,等.滨海饱和混凝土中氯离子传输行为的细观模拟研究[J].交通科学与工程,2023,39(5):17-23.

Citation: HU Shouwang, LONG Yongkang, FU Fengyuan, et al. Mesoscopic simulation study on chloride ion transport behavior in marine saturated concrete[J]. J. Transp. Sci. Eng., 2023, 39(5): 17-23.

滨海饱和混凝土中氯离子传输行为的细观模拟研究

胡守旺¹, 龙永康¹, 符峰源¹, 孙稳石², 郑愚¹

(1. 东莞理工学院 生态环境与建筑工程学院, 广东 东莞 523808;

2. 东莞市城建规划设计院, 广东 东莞 523000)

摘 要:为探究饱和混凝土中氯离子传输规律,建立考虑不同混凝土配合比且含有浆体、骨料和界面过渡区的混凝土细观模型,分别计算氯离子在一维和二维扩散时的浓度,并与试验结果进行对比。分析不同水灰比和水化度对氯离子扩散的影响,并针对海岸线环境中钢筋混凝土结构的钢筋初始锈蚀时间进行预测。研究表明:氯离子扩散的细观模型计算时应考虑界面过渡区,且界面过渡区厚度取值为80 μm ;氯离子浓度扩散的细观模型计算值与试验结果吻合较好,且氯离子的扩散性随着混凝土水灰比的增大而显著增大,但随着水化度的增大而变小;氯盐环境中钢筋表面初始锈蚀点的位置是不固定的。在相同条件下,氯离子一维扩散时,钢筋初始锈蚀时间是二维扩散的2.31~3.24倍;当保护层厚度从50 mm增加到60 mm时,在一维扩散中且水灰比分别为0.4、0.5和0.6时,混凝土中钢筋的初始锈蚀时间分别延长28.00%、10.90%和18.50%,在二维扩散中且水灰比为0.4、0.5和0.6时,初始锈蚀时间则分别延长52.42%、7.45%和56.65%。该结果可为海岸线环境中钢筋混凝土结构的钢筋初始锈蚀时间的预测提供借鉴。

关键词:饱和混凝土;氯离子扩散;细观模型;界面过渡区厚度;初始锈蚀时间

中图分类号:U416.1

文献标志码:A

Mesoscopic simulation study on chloride ion transport behavior in marine saturated concrete

HU Shouwang¹, LONG Yongkang¹, FU Fengyuan¹, SUN Wenshi², ZHENG Yu¹

(1. School of Environment and Civil Engineering, Dongguan University of Technology, Dongguan 523808, China;

2. DG Urban Planning Design Institute, Dongguan 523000, China)

Abstract: To investigate the chloride ion transport law in saturated concrete, a meso-scale model for concrete that considering different concrete mixtures with cement paste, aggregate and interfacial transition zones is established. Through the established model, the chloride ions concentrations are calculated in one-dimensional and two-dimensional diffusion, respectively. The simulation results are used to compare with the experimental results. The effects of water-cement ratio and degree of hydration on chloride ion diffusion are analyzed and the initial corrosion time of steel reinforcement in reinforced concrete structures is predicted in coastal environments. The comparison results show that when calculating in the meso-scale model for chloride ion diffusion, it is important to consider the interfacial transition zone, with a thickness of 80 μm . The calculated values of the meso-scale model of chloride ion concentration diffusion are in good agreement with the experimental results. In a chloride-rich environment, the initial corrosion point on the surface of steel reinforcement is not fixed. Under the same conditions, the initial corrosion time of steel reinforcement in one-dimensional diffusion of chloride ions is 2.31-3.24 times that of two-dimensional diffusion. when the thickness of the protective layer is increased from 50 mm to 60 mm and water/cement ratios are 0.4, 0.5, and 0.6,

收稿日期:2023-07-05

基金项目:国家自然科学基金项目(52008107);广东省基础与应用基础研究基金联合基金青年基金项目(2019A1515111032);
广东省普通高校科研项目特色创新项目(2022KTSCX141);东莞市社会发展科技重点项目(20221800905172)

作者简介:胡守旺(1988—),男,东莞理工学院副教授,硕士生导师。E-mail:shouwang.hu@dgut.edu.cn

the initial corrosion time of steel is extends by 28.00%, 10.90%, and 18.50% in one-dimensional diffusion and is extended by 52.42%, 7.45% and 56.65% in two-dimensional diffusion, respectively. The results in this study can be useful for predicting the initial corrosion time of steel reinforcement in coastal environments.

Key words: saturated concrete; chloride diffusion; meso-scale model; thickness of the ITZ; corrosion initiation time

在滨海和海洋环境中,氯离子的侵蚀导致钢筋的锈蚀是影响钢筋混凝土结构耐久性和安全性的主要因素之一。国内外对氯离子侵蚀下结构的安全开展了许多研究^[1-5],但这些研究主要将混凝土视为均质材料,忽略了混凝土细观组成对氯离子传输行为的影响,造成滨海环境下混凝土结构耐久性评估存在不足。在细观层次上,混凝土可看作由浆体和骨料组成的二相模型^[6]或由浆体、骨料和界面过渡区组成的三相模型^[7-8]。一些学者建立了考虑浆体、骨料和界面过渡区的三维模型^[9],研究氯离子在混凝土中的细观传输规律,并验证了该氯离子传输细观三维模型应用于滨海混凝土结构耐久性评估的可行性。因此,本研究针对滨海区域饱和钢筋混凝土中的氯离子传输,拟建立考虑不同配合比且含有浆体、骨料和界面过渡区厚度的钢筋混凝土二维细观模型,分析不同界面过渡区厚度对氯离子扩散行为的影响,计算氯离子在一维和二维扩散时的浓度,并将计算结果与试验结果进行对比,分析不同水灰比和水化度对氯离子扩散的影响,以期在海岸环境下对钢筋混凝土结构中的钢筋初始锈蚀时间进行预测提供参考。

1 细观模型的建立

1.1 骨料

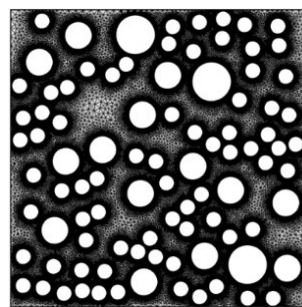
WALRAVEN^[10]基于 Fuller 曲线,推导出试件任意截面平面内骨料直径 $D < D_0$ 的概率 P_c ,其计算公式为:

$$P_c = P_k \left(\begin{array}{l} 1.065 D_0^{0.5} D_{\max}^{-0.5} - 0.053 D_0^4 D_{\max}^{-4.0} - 0.012 D_0^{6.0} D_{\max}^{-6.0} \\ - 0.004 5 D_0^{8.0} D_{\max}^{-8.0} - 0.002 5 D_0^{10.0} D_{\max}^{-10.0} \end{array} \right) \quad (1)$$

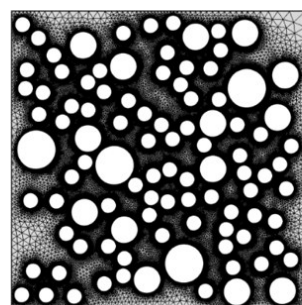
式中: D_0 为筛孔直径, mm; D_{\max} 为最大骨料直径, mm; P_k 为骨料体积占混凝土总体积的百分数, %。

本研究 D_0 分别取 5、12、18 和 22 mm。基于表 1 的混凝土配合比,利用公式(1)计算得到不同粒径的骨料概率,也可以计算得到相应圆形粒径骨料的数量。本研究中骨料形状为圆形,其粒径分别取 8、

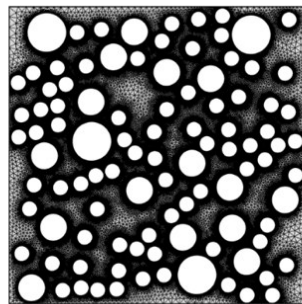
15 和 20 mm,图 1 是不同水灰比的骨料网格图。



(a) 水灰比为 0.4



(b) 水灰比为 0.5



(c) 水灰比为 0.6

图 1 骨料网格

Fig. 1 Mesh of the random aggregates

1.2 氯离子扩散方程

对于饱和混凝土,可以基于 Fick 第二定律来模拟氯离子在混凝土中的扩散,氯离子一维渗透下的扩散方程为:

$$\frac{\partial C_x}{\partial t} = D_{cl} \frac{\partial^2 C_x}{\partial x^2} \quad (2)$$

式中: C_x 为 t 时刻与混凝土曝露面的距离为 x 处的氯离子浓度; D_{cl} 为氯离子扩散系数。

假设氯离子在混凝土中各个方向的扩散系数相同,氯离子二维渗透下的扩散方程为:

$$\frac{\partial C_{x,y}}{\partial t} = D_{CL} \left(\frac{\partial^2 C_{x,y}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_{x,y}}{\partial y^2} \right) \quad (3)$$

式中: $C_{x,y}$ 为 t 时刻距离混凝土相邻两个暴露面的距离分别为 x 和 y 处的氯离子浓度。

当考虑混凝土细观组成对水分和氯离子传输过程的影响,需要分别确定浆体、骨料和界面过渡区水分和氯离子扩散系数。对于扩散系数,ZHENG等^[11]提出水泥浆体氯离子扩散系数 D_{cp} ,计算式为:

$$D_{cp} = \frac{2.14 \times 10^{-10} \varphi^{2.75}}{\varphi^{1.75}(3 - \varphi) + 14.44(1 - \varphi)^{2.75}} \quad (4)$$

式中: φ 为浆体孔隙率。

φ 的计算式为:

$$\varphi = \frac{w/c - 0.17\alpha}{w/c + 0.32} \quad (5)$$

式中: α 为水化度,其值为0.8; w/c 为水灰比。

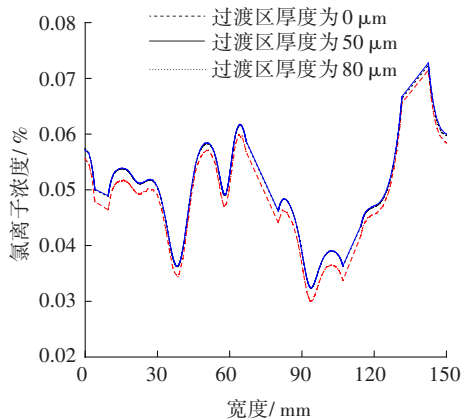
PAN等^[12]对文献[13]的试验数据做回归分析,得到界面过渡区扩散系数与水泥浆体扩散系数和过渡区厚度的数量关系,其表达式为:

$$\frac{D_{ITZ}}{D_{cp}} = \frac{139.434}{T_{ITZ}} + 1.0 \quad (6)$$

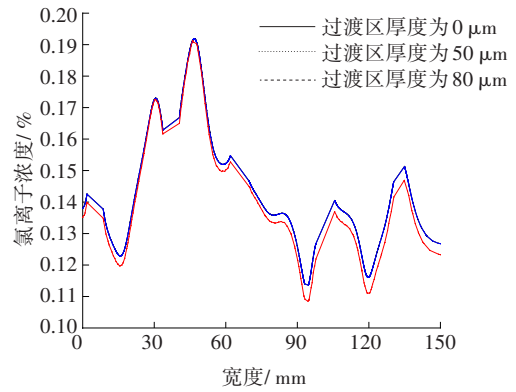
式中: D_{ITZ} 是界面过渡区氯离子扩散系数; T_{ITZ} 是界面过渡区厚度。

1.3 界面过渡区厚度分析

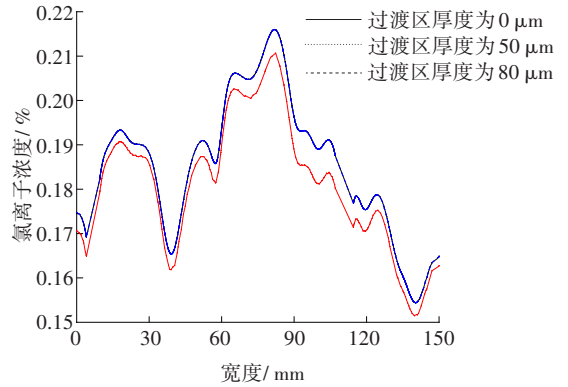
目前,一般认为混凝土内骨料真实界面过渡区的厚度为30~80 μm ^[14]。本研究选择界面过渡区的厚度分别为0、50和80 μm ,计算相同深度下氯离子浓度分布规律。模型表面氯离子浓度为0.50% (占混凝土质量比),侵蚀时间为2 a。通过计算,得到深度为30 mm,宽度为150 mm处的氯离子浓度分布规律。将不同界面过渡区厚度的计算结果与只考虑混凝土浆体的模型计算结果进行对比,结果如图2所示。



(a) 水灰比为0.4



(b) 水灰比为0.5



(c) 水灰比为0.6

图2 氯离子浓度分布

Fig. 2 Profiles of chloride concentration

从图2可以看出,相同深度处氯离子浓度的变化差异较大,表明骨料对氯离子在混凝土中扩散的影响不可忽略。考虑了界面过渡区的细观模型计算得到的氯离子浓度大于不考虑界面过渡区的氯离子浓度,表明界面过渡区对氯离子扩散的影响显著。从图2还可以看出,当界面过渡区厚度从50 μm 增加到80 μm 时,二者的浓度相差小于1%。因此,在分析和计算氯离子浓度时,界面过渡区厚度可取为80 μm 。这样既可有效减小模型大小,也能有效节约计算时间,同时不会影响计算精度。

2 试验验证

本模型采用文献[15]氯离子侵蚀试验数据进行验证,试验试件为150 mm × 150 mm × 150 mm的立方体试块,混凝土配合比见表1。试件制作完成后标准养护28 d。试件原材料选择P·O 42.5 R级水泥,细骨料采用中砂,粗骨料采用碎石,其粒径范围为5~22 mm。

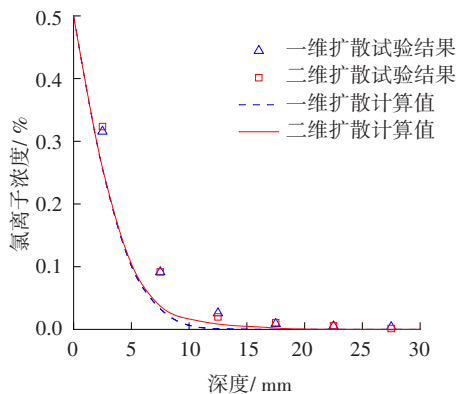
表1 混凝土配合比

Table 1 Mix proportion of concrete kg

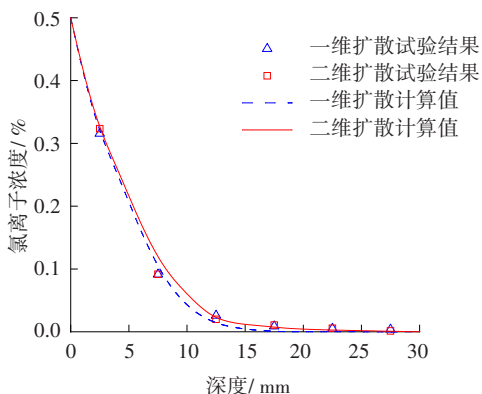
编号	水灰比	水泥	水	砂	粗骨料
C1	0.4	450	180	531	1 239
C2	0.5	360	180	558	1 302
C3	0.6	300	180	576	1 344

试验中,每一个配合比均制作3个标准试件,气候箱温度和湿度分别设置为25℃和95%,利用质量浓度为0.50%的NaCl溶液产生盐雾,试验持续时间为30 d,一维扩散只暴露一个面,二维扩散暴露相邻的两个面,未扩散面均涂上环氧树脂以隔绝氯离子的渗透。试验完成后,用钻孔机在扩散面内取样,按照每5 mm取一层,取样深度为30 mm,取样点个数为4个,将每个点每次取得的粉末进行混合,以减小骨料分布的离散性,试验使用快速氯离子浓度测试仪对已经取样的粉末进行氯离子浓度测试。

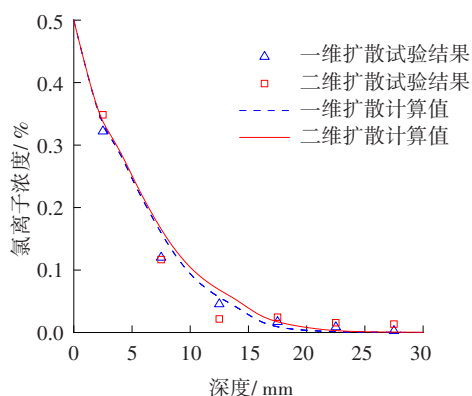
本细观模型计算值与试验结果如图3所示。从图3可以看出,细观模型计算值与试验结果吻合较好,表明:本细观模型的计算结果是可靠的。



(a) 水灰比为0.4



(b) 水灰比为0.5



(c) 水灰比为0.6

图3 计算值与试验值对比

Fig. 3 Comparison between simulated and experimental values

3 模型参数分析

在细观模型中,氯离子扩散系数主要影响参数为水灰比 w/c 和水化度 α 。针对水灰比 w/c 分别为0.4、0.5、0.6和水化度 α 分别为0.7、0.8、0.9的情况,探讨了它们对氯离子扩散性能的影响。其他计算参数为:界面过渡区厚度为80 μm ,表面氯离子浓度为0.50%,氯离子浓度计算位置如图4所示。

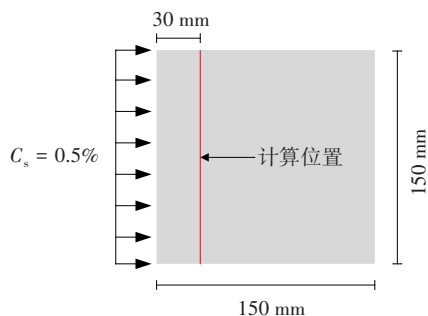


图4 氯离子浓度计算位置

Fig. 4 Simulated position for chloride concentration

3.1 水灰比影响

从图5可知,在相同条件下,氯离子扩散性随着水灰比的增大而增强。因此,降低混凝土的水灰比可以显著提高混凝土的抗氯离子扩散的能力。

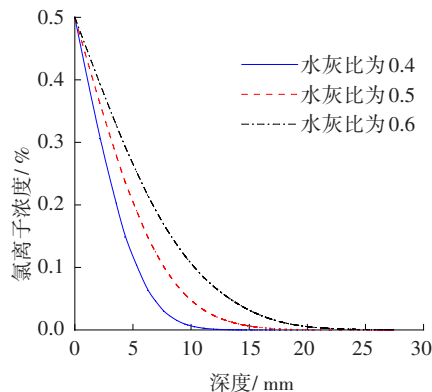
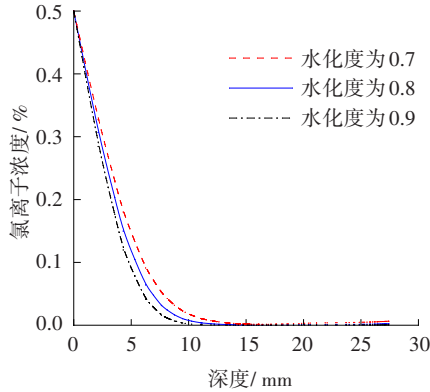


图5 水灰比对氯离子扩散影响

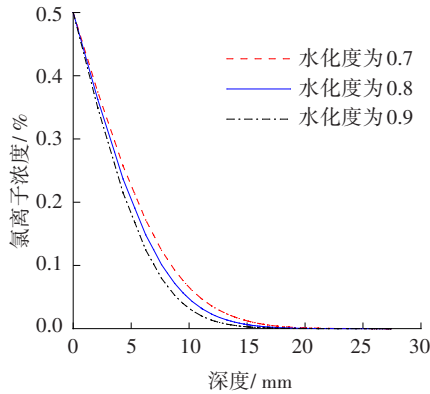
Fig. 5 Influence of the w/c on chloride diffusivity

3.2 水化度影响

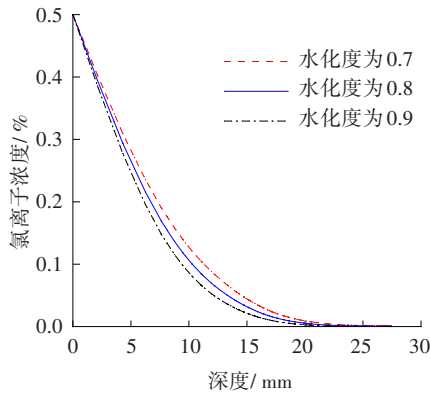
不同水化度下的氯离子在不同水灰比混凝土中浓度分布曲线,如图6所示。从图6可以看出,在相同水灰比同一深度处,水化度越高,氯离子浓度越低,即混凝土抗氯离子扩散性能越高,因此,提高混凝土的水化度也是提高混凝土抗氯离子扩散能力的重要手段之一。



(a) 水灰比为0.4



(b) 水灰比为0.5



(c) 水灰比为0.6

图6 水化度对氯离子扩散影响

Fig. 6 Influence of the degree of hydration on chloride diffusivity

从图5~6可以看出,水灰比和水化度对氯离子传输性能具有直接影响,原因在于水灰比和水化度对混凝土的微观孔隙和整体孔隙率起决定作用。因此,降低水灰比和提高水化度,可有效提高混凝土的抗氯离子侵蚀性能。

4 钢筋初始锈蚀时间

基于不同水灰比的细观模型,计算保护层厚度 C 分别为50、60 mm时的钢筋表面不同点在一维和二维扩散时的氯离子浓度。钢筋的位置和计算点如图7所示。Point 1和Point 3是距离两个暴露面最近的位置,Point 2位于钢筋的表面,介于Point 1和Point 3之间。当钢筋表面的任一点浓度达到临界氯离子浓度时,就认为钢筋开始锈蚀,而对应的时间即为钢筋的初始锈蚀时间。

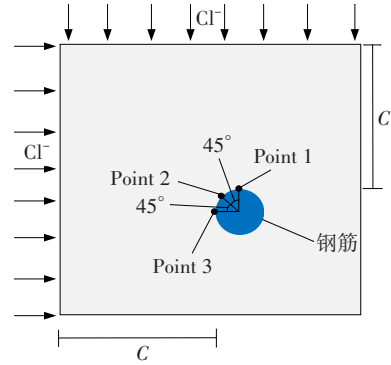


图7 钢筋位置示意

Fig. 7 Diagram of steel reinforcement location

离海岸线越近,大气中氯离子浓度越高,MCCEE等^[13]调查了澳大利亚1158座实桥表面的氯离子浓度,分析得到桥梁混凝土表面的氯离子浓度与海岸线距离的平均值之间存在以下关系:

$$\begin{cases} C_{s(d)} = 0.127\% & , d < 0.10 \\ C_{s(d)} = 0.050\% - 0.078 \lg d & , 0.10 < d < 2.84 \\ C_{s(d)} = 0.013\% & , d > 2.84 \end{cases} \quad (7)$$

式中: $C_{s(d)}$ 为距海岸线距离为 d km处混凝土表面氯离子浓度,可以用单位质量混凝土所含的氯离子质量来表示。

本研究模拟近海岸线环境,表面氯离子浓度为0.127%,文献[16]也给出引起钢筋锈蚀的临界氯离子浓度 C_{cr} ,通过大量数据分析得出其浓度值介于

0.078%和0.085%之间,平均值为0.082%。因此,本研究取临界氯离子浓度为0.082%作进一步分析。

钢筋混凝土结构中的钢筋在不同条件下的初始锈蚀时间如图8所示。从图8可以看出,在相同条件下,一维扩散下钢筋的初始锈蚀时间是二维扩散下钢筋的初始锈蚀时间的2.31~3.24倍。因此,对于角部钢筋,只考虑氯离子的一维扩散的计算结果偏保守,当保护层厚度从50 mm增加到60 mm时,一维扩散时,水灰比为0.4、0.5和0.6的混凝土中钢筋的初始锈蚀时间分别延长28.00%、10.90%和18.50%,而二维扩散时,初始锈蚀时间则分别延长52.42%、7.45%和56.65%。因此,在设计时,适当增大保护层厚度对延长钢筋的初始锈蚀时间的作用显著。

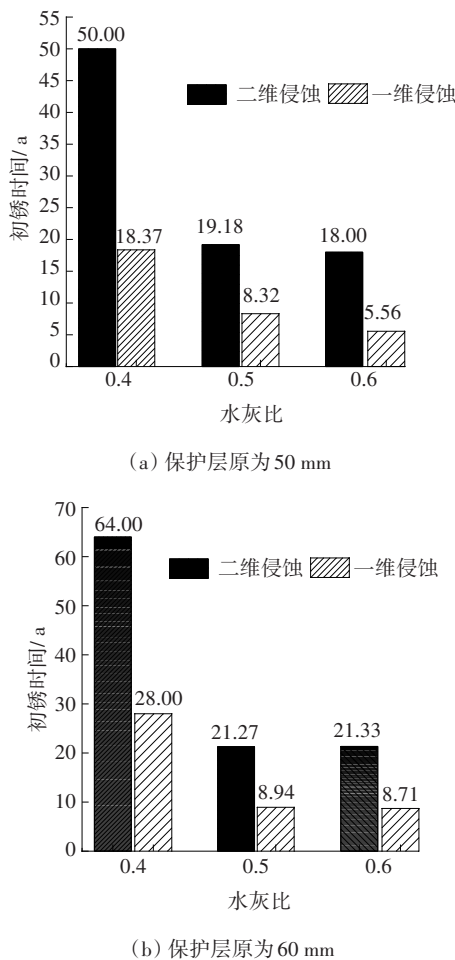


图8 钢筋开始锈蚀时间

Fig. 8 Corrosion initiation time of the steel reinforcement

5 结论

1) 在细观模型中,不考虑界面过渡区计算的氯离子浓度值小于考虑界面过渡区的计算值,表明:

对氯离子扩散的细观模拟中须考虑界面过渡区。在细观模型中,界面过渡区厚度的建议值为80 μm 。

2) 细观模型对氯离子浓度扩散的计算值与试验值吻合较好,表明:本混凝土细观模型的可靠性和适用性均较高。对模型参数进行分析,发现氯离子扩散性随着水灰比的增大而增强,而随着水化度的增大氯离子扩散性反而降低。

3) 在相同条件下,氯离子进行一维扩散时的钢筋初始锈蚀时间是氯离子二维扩散时的2.31~3.24倍。当保护层厚度从50 mm增加到60 mm,且为一维扩散时,水灰比分别为0.4、0.5和0.6的钢筋混凝土的初始锈蚀时间分别延长28.00%、10.90%和18.50%;二维扩散时,初始锈蚀时间则分别延长52.42%、7.45%和56.65%。

参考文献(References):

- [1] LI C, LI J Q, REN Q, et al. Durability of concrete coupled with life cycle assessment: review and perspective [J]. Cement and Concrete Composites, 2023, 139: 105041. DOI: 10.1016/j.cemconcomp.2023.105041.
- [2] LI K F, HAN J G, WANG S N, et al. Long-term performance of structural concretes in China southeast coastal environments exposed to atmosphere and chlorides [J]. Cement and Concrete Research, 2023, 164: 107064. DOI: 10.1016/j.cemconres.2022.107064.
- [3] LENG Y, LU Z H, LI C Q, et al. Time-variant probabilistic assessment of corrosion initiation of marine concrete structures considering maximum phenomenon [J]. Construction and Building Materials, 2021, 272: 121967. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2020.121967.
- [4] SENG KIESSE T, BONNET S, AMIRI O, et al. Analysis of corrosion risk due to chloride diffusion for concrete structures in marine environment [J]. Marine Structures, 2020, 73: 102804. DOI: 10.1016/j.marstruc.2020.102804.
- [5] DEVERA G, CLIMENT M A, VIQUEIRA E, et al. Chloride penetration prediction in concrete through an empirical model based on constant flux diffusion [J]. Journal of Materials in Civil Engineering, 2015, 27(8): 04014231. DOI: 10.1061/(asce)mt.1943-5533.0001173.
- [6] LI L Y, XIA J, LIN S S. A multi-phase model for predicting the effective diffusion coefficient of chlorides

- in concrete [J]. *Construction and Building Materials*, 2012, 26 (1) : 295-301. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2011.06.024.
- [7] 肖建庄, 卢登, 马志鸣. 考虑再生粗骨料随机分布的混凝土氯离子扩散细观数值模拟[J]. *东南大学学报(自然科学版)*, 2014, 44(6): 1240-1245. DOI: 10.3969/j.issn.1001-0505.2014.06.026.
- XIAO Jianzhuang, LU Deng, MA Zhiming. Mesoscopic numerical simulation on chloride diffusion in concrete with random distributed recycled coarse aggregate [J]. *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)*, 2014, 44(6): 1240-1245. DOI: 10.3969/j.issn.1001-0505.2014.06.026.
- [8] DU X L, JIN L, MA G W. A meso-scale numerical method for the simulation of chloride diffusivity in concrete [J]. *Finite Elements in Analysis and Design*, 2014, 85: 87-100. DOI: 10.1016/j.finel.2014.03.002.
- [9] DEHGHANPOOR ABYANEH S, 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. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.05.024.
- [10] WALRAVEN J, REINHARDT H. Theory and experiments on the mechanical behaviour of cracks in plain and reinforced concrete subjected to shear loading [R]. ABSE Colloquium on Advanced Mechanics of Reinforced Concrete: Final report, 1981: 227-252.
- [11] 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. DOI: 10.1061/(asce)0899-1561(2008)20: 5(384).
- [12] PAN Z C, CHEN A R, RUAN X. Spatial variability of chloride and its influence on thickness of concrete cover: a two-dimensional mesoscopic numerical research [J]. *Engineering Structures*, 2015, 95: 154-169. DOI: 10.1016/j.engstruct.2015.03.061.
- [13] MCGEE R. Modelling of Durability Performance of Tasmanian bridges [J]. *ICASP8 Applications of statistics and probability in civil engineering*, 1999, 1: 297-306.
- [14] 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, 5(3/4): 86-92. DOI: 10.1016/S1065-7355(96)00008-9.
- [15] HU S W, PENG J X, ZHANG J R, et al. Influences of time, temperature, and humidity on chloride diffusivity: mesoscopic numerical research [J]. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 2017, 29(11): 04017223. DOI: 10.1061/(asce)mt.1943-5533.0002080.
- [16] 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. DOI: 10.1016/S0008-8846(02)00832-3.
- (责任编辑:欧兆虎;校对:罗容;英文编辑:曾程)