

文章编号: 1007- 2985(2003) 03- 0027- 03

# 混凝土界面百分比计算的 Monte Carlo 法

姜 璐, 郑建军

(浙江工业大学建筑工程学院, 浙江 杭州 310032)

**摘 要:** 基于混凝土细观结构模拟技术, 提出用于计算界面面积百分比的 Monte Carlo 法. 计算结果表明, 对于给定的骨料面积百分比, 界面面积百分比随着骨料最小直径的减小而增大; 对于给定的骨料最小直径, 界面面积百分比随着骨料面积百分比的增大而增大. 应用数学拟合, 给出了界面面积百分比的简单计算公式.

**关键词:** 界面; 计算机模拟; 混凝土; Monte Carlo 法

**中图分类号:** TU528. 1

**文献标识码:** A

混凝土是一种最常用的建筑材料, 它由骨料、水泥和水混合而成. 在混凝土浇筑和成型过程中, 由于骨料表面的边界效应, 水泥颗粒在骨料表面附近形成一层特殊的界面结构.<sup>[1-3]</sup> 这样, 在细观水平上, 可以把混凝土看成是由骨料、水泥浆基体和界面所组成的一种三相复合材料, 它的许多物理性能, 如强度、弹性模量、断裂能和氯离子扩散系数等, 除了与骨料和水泥砂浆的物理性能有关外, 在很大程度上还取决于界面的面积(或体积)百分比.<sup>[4,5]</sup> 为了能较准确地预测混凝土的宏观物理性能, 常常在细观力学模型中引入界面面积百分比这一重要的细观结构参数, 然后研究界面对混凝土宏观物理性能的影响.<sup>[4]</sup> 因此, 界面面积百分比的计算直接影响细观力学模型的预测精度. 由于混凝土中骨料分布的随机性和部分相邻骨料界面之间的重叠效应, 目前还无法正确地计算界面的面积百分比. 为此, 基于混凝土细观结构模拟技术<sup>[6]</sup>, 结合 Monte Carlo 数值积分方法, 笔者提出了界面面积百分比的算法, 并讨论了骨料最小直径和面积百分比对界面面积百分比的影响, 为进一步研究界面对混凝土宏观物理性能的影响奠定了基础.

## 1 混凝土骨料的生成与分布

在研究混凝土细观结构特性时, 计算机模拟和细观结构实验所起的作用具有同等的重要性<sup>[5]</sup>. 在模拟混凝土骨料分布时, 通常假定骨料是球形的, 而且它们在混凝土中均匀随机分布, 因此, 当混凝土构件被一个随机平面所截时, 截面上的骨料呈圆形. 笔者在本文中主要讨论 Fuller 级配骨料, 因为采用该级配所制成的混凝土往往具有最大的密度<sup>[5]</sup>. 根据混凝土体视学理论, 对于 Fuller 级配骨料, 关于圆形骨料个数的累积分布函数  $P(d)$  可以表示成

$$P(d) = \frac{d^{1.5}f(d_0, d_0) - d_0^{1.5}f(d, d)}{d^{1.5}f(d_0, d_0)}, \quad (1)$$

其中,  $f(d, d)$ ,  $d_0$  和  $d_{max}$  分别定义为

$$\begin{aligned} f(d, d) &= -0.4\cos^{1.5} \sin + 0.8\sqrt{2}E(\arcsin(d/d_{max}), 1/\sqrt{2}) - 0.4\sqrt{2}F(\arcsin(d/d_{max}), 1/\sqrt{2}), \\ &= \arccos(d/d_{max}), \quad d_0 = \arccos(d_0/d_{max}), \\ &= \arcsin(\sqrt{2}\sin(d/2)), \quad d_0 = \arcsin(\sqrt{2}\sin(d_0/2)). \end{aligned}$$

这里,  $d$  表示骨料直径,  $d_0$  和  $d_{max}$  分别是骨料的最小和最大直径,  $E(\arcsin(d/d_{max}), 1/\sqrt{2})$  和  $F(\arcsin(d/d_{max}), 1/\sqrt{2})$  为 Legendre 标准椭圆积分.<sup>[7]</sup> 在模拟二维混凝土细观结构时, 所考虑的模拟区域是边长为  $a$  的正方形, 骨料面积百分比  $A_a$  定义为混凝土截面上所有圆形骨

收稿日期: 2003- 06- 05

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50178003)

作者简介: 姜 璐(1979- ), 女, 浙江省杭州市人, 浙江工业大学建筑工程学院硕士研究生, 主要从事混凝土理论与应用研究.

料面积之和与该正方形面积之比. 对于任一给定的骨料面积百分比  $A_a$ , 可按下列步骤生成直径符合(1) 式的各种圆形骨料. ( ) 由  $[0, 1]$  区间上服从均匀分布的随机变量  $W_i$ , 产生一个随机数  $w_i$  (见图 1). ( ) 求解方程  $P(d) = z_i$ , 获得第  $i$  个圆形骨料的直径  $d_i$ . ( ) 累计已生成的  $i$  个圆形骨料的总面积  $A_i = A_{(i-1)} + \frac{d_i^2}{4}$ . ( ) 如果  $A_i \geq A_a a^2$ , 则停止骨料的生成, 这时的  $i$  就是所要分布骨料的总数  $N_a$ . 否则, 重复步骤( ) 至( ) 直至满足  $A_i \geq A_a a^2$ .

为了验证上述方法的有效性, 令  $d_m = 16 \text{ mm}$ ,  $A_a = 0.5$ ,  $d_0$  分别取 0.15, 1, 2 和 5 mm, 模拟结果与(1) 式之间的比较如图 2 所示(从左到右 4 条曲线的  $d_0$  值分别等于 0.15, 1, 2 和 5 mm). 从图 2 可看出, 模拟结果与(1) 式良好吻合.

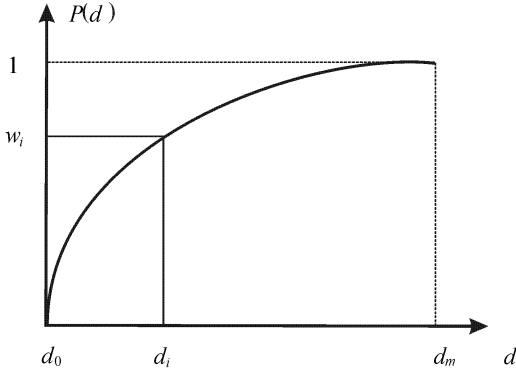


图 1 第  $i$  个骨料的生成

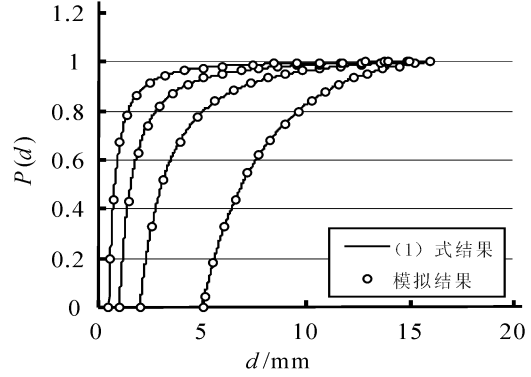


图 2 模拟结果与(1) 式的比较

一旦生成各种尺寸的圆形骨料, 可按下列步骤将它们一一分布到正方形截面上. ( ) 按直径从大到小重新排列所生成的圆形骨料. ( ) 分别由随机变量  $X_i$  和  $Y_i$  确定第  $i$  ( $i = 1, \dots, N_a$ ) 个骨料的圆心位置  $(x_i, y_i)$ . 这里,  $X_i$  和  $Y_i$  是区间  $[d_i/2, (a - d_i/2)]$  上均匀分布的随机变量. ( ) 如果第  $i$  个骨料不与前面已经分布的  $i - 1$  个骨料重叠, 则对第  $i + 1$  个骨料重复步骤( ), 直至  $N_a$  个骨料都分布到该正方形区域中. ( ) 否则, 返回到步骤( ), 重新生成第  $i$  个骨料的圆心位置, 直至  $N_a$  个骨料圆无重叠地分布到正方形截面上.

例如, 取  $a = 100 \text{ mm}$ ,  $d_0 = 2 \text{ mm}$ ,  $d_m = 16 \text{ mm}$ ,  $A_a$  分别取 0.3 和 0.5, 相应的骨料分布如图 3 和图 4 所示. 从这 2 个图可以看出,  $A_a = 0.5$  时的骨料分布密度明显高于  $A_a = 0.3$  时的骨料密度.

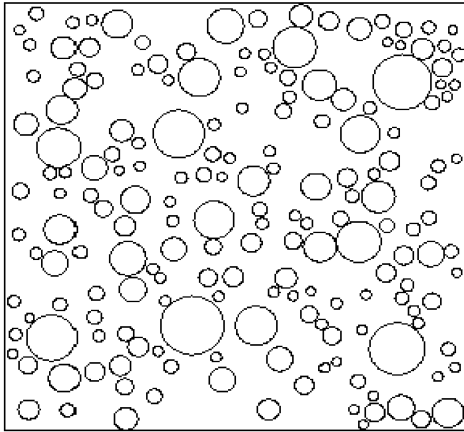


图 3  $A_a = 0.3$  时的骨料分布

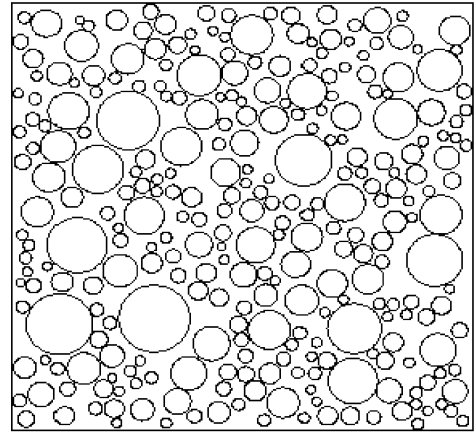


图 4  $A_a = 0.5$  时的骨料分布

### 2 界面面积百分比计算的 Monte Carlo 法

如上所述, 界面是由于水泥颗粒分布受骨料表面影响而在骨料表面附近所形成的特殊结构. 大量的混凝土微观结构实验表明, 界面层的厚度与骨料直径基本无关, 大小约等于  $0.05 \text{ mm}$ .<sup>[4]</sup> 所以, 只要在上面所形成的骨料分布图中的每一个骨料表面加上厚度为  $0.05 \text{ mm}$  的圆环, 即可形成界面微观结构. 尽管骨料之间不会相互重叠, 但当相邻骨料之间的距离小于界面厚度的 2 倍时, 相邻骨料的界面将相互重叠. 正是由于这种重叠效应的随机性, 使得界面面积百分比的解析计算十分困难. 为此, 笔者基于所生成的界面微观结构提出 Monte Carlo 数值算法: (1) 由区间  $[0, a]$  上均匀分布的随机变量  $X_i$  和  $Y_i$ , 生成  $N$  个样点  $(x_i, y_i)$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ); (2) 对每一点进行判断, 然后统计落入界面的总点数  $N_I$ ; (3) 根据 Monte Carlo 数值积分算法, 界面的面积百分比  $A_I$  为

$$A_I = \frac{N_I}{N}. \tag{2}$$

在应用(2)式计算界面的面积百分比时, 首先要验证算法的有效性并确定获得稳定结果的最小模拟点数  $N$ . 笔者注意到, 如果将(2)式中的  $N_I$  换成落入骨料的总点数  $N_{\text{agg}}$ , 同样可以计算骨料的面积百分比  $A_a$ . 由于骨料面积百分比的正确值是预先给定的, 这样, 可以通过比较骨料面积百分比的计算值与正确值, 来验证该算法的有效性并确定获得稳定结果的最小模拟点数  $N$ . 为此, 设  $a = 500 \text{ mm}$ ,  $d_0 = 2 \text{ mm}$ ,  $d_m = 16 \text{ mm}$ ,  $A_a = 0.5$ , 计算所得的骨料圆面积百分比随取样点数  $N$  的变化如图 5 所示. 从图 5 可看出, 计算值与正确值之间的相对误差总体上随着点数  $N$  的增加而逐渐减小, 当  $N > 150\,000$  时, 计算值与正确值几乎完全吻合. 因此,  $N = 150\,000$  就可作为获得稳定计算结果的最小取样点数. 其次, 界面的面积百分比与每一次骨料分布图中相邻骨料界面的重叠情况直接相关, 即不同的骨料分布所对应的界面面积百分比是不一样的. 为此, 将界面面积百分比定义为  $k$  次骨料分布计算所得界面面积百分比的均值. 为了确定合适的  $k$  值, 同样取  $a = 500 \text{ mm}$ ,  $d_0 = 2 \text{ mm}$ ,  $d_m = 16 \text{ mm}$ ,  $A_a = 0.5$ , 界面面积百分比均值随次数  $k$  的变化如图 6 所示. 从图 6 可看出, 当给定  $k$  超过 80 时, 界面面积百分比均值趋于一个定值. 所以, 在本文计算中一律取  $k = 80$ .

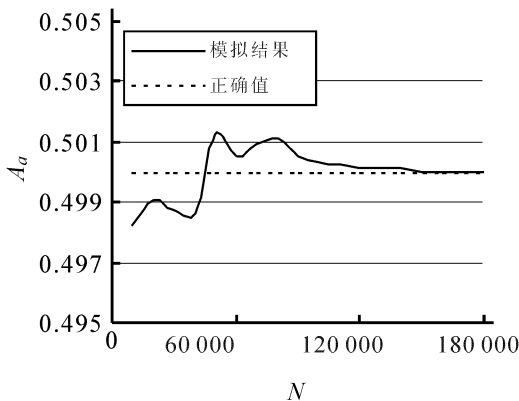


图 5 骨料面积百分比与模拟点数的关系

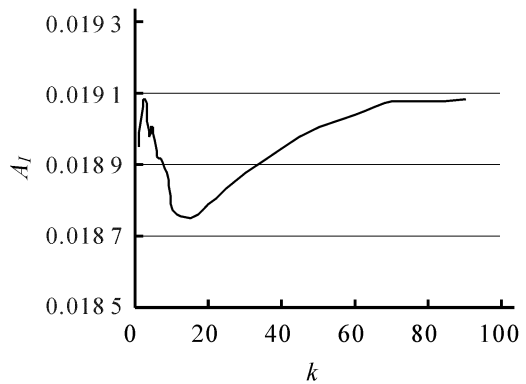


图 6 界面面积百分比与模拟次数的关系

### 3 模拟结果与分析

在计算界面面积百分比时, 对于一般的混凝土, 界面厚度和骨料最大直径分别取  $0.05 \text{ mm}$  和  $16 \text{ mm}$ , 骨料最小直径  $d_0$  分别取  $5.0, 2.0, 1.0, 0.5, 0.25$  和  $0.15 \text{ mm}$ , 骨料面积百分比  $A_a$  分别取  $0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$  和  $0.7$ , 其结果如图 7 所示(从上至下各曲线所对应的  $d_0$  值分别为  $0.15, 0.25, 0.5, 1.0, 2.0$  和  $5.0 \text{ mm}$ ). 从图 7 可看出, 对于给定的骨料面积百分比, 界面面积百分比随骨料最小直径的减小而增大; 对于给定的骨料最小直径, 界面面积百分比随骨料面积百分比的增大而增大. 这是因为, 当界面厚度一定时, 界面面积百分比随着骨料总周长的增大而增大. 很显然, 当骨料面积百分比一定时, 骨料总周长随着  $d_0$  的减小而增大; 而当骨料最小直径一定时, 骨料总周长随骨料面积百分比的增大而增大. 根据图 7 所给出的模拟结果, 界面面积百分比可表示为

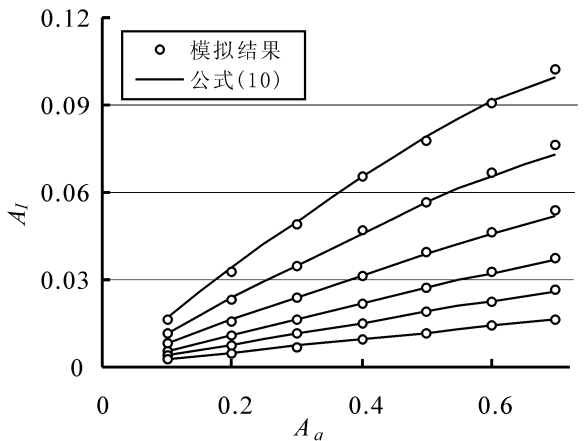


图 7 不同  $d_0$  值所对应的  $A_I$  和  $A_a$  之间的关系

$$V_I = (1 - A_a) \left[ 1 - \exp\left(\frac{-cA_a}{1 - A_a}\right) \right], \tag{3}$$

其中, 系数  $c$  与骨料最小直径  $d_0$  有关, 经过拟合可得

$$c = \frac{d_0}{0.2356d_0^4 - 2.4911d_0^3 + 13.474d_0^2 + 7.137d_0 - 0.4965}$$

模拟结果与(3)式所得结果之间的比较如图 7 所示, 从图 7 可看出, 它们之间良好吻合. 因此, (3)式可以方便地用来计算界面的面积百分比.

(下转第 36 页)

## An Infeasible Simplex Algorithm for Linear Programming

GAO Pei-wang, FAN Guo-bing

(College of Mathematics and Computations, Central South University, Changsha 410075, China)

**Abstract:** This paper presents an improved ( infeasible) simplex method for linear programming, in which some of vertex points, corresponding to the iterative process, can be out of the feasible domain of ( LP). The algorithm would performs the iterations no more than the simplex method and simultaneously, can overcome the iterative loop caused by degeneracy.

**Key words:** linear programming; feasible domain; exterior point; simplex method

( 上接第 29 页)

参考文献:

- [ 1 ] NILSEN A U, MONTEIRO P J M. Concrete: a Three Phase Material [ J]. Cement and Concrete Research, 1993, 23( 1): 147– 151.
- [ 2 ] RAMESH G, SOTELINO E D, CHEN W F. Effect of Transition Zone on Elastic Moduli of Concrete Materials [ J]. Cement and Concrete Research, 1996, 26( 4): 611– 622.
- [ 3 ] SIMEONOV P, AHMAD S. Effect of Transition Zone on the Elastic Behaviour of Cement– Based Composites [ J]. Cement and Concrete Research, 1995, 25( 1): 165– 176.
- [ 4 ] LI G, ZHAO Y, PANG S. Four– Phase Sphere Modelling of Effective Bulk Modulus of Concrete [ J]. Cement and Concrete Research, 1999, 29( 6): 839– 845.
- [ 5 ] ZHENG J J. Mesostructure of Concrete– Stereological Analysis and Some Mechanical Implications [ M]. Delft: Delft University Press, 2000.
- [ 6 ] ZHENG J J, LI C Q. Three– Dimensional Aggregate Density in Concrete With Wall Effect [ J]. ACI Materials Journal, 2002, 99( 6): 568– 575.
- [ 7 ] GEORGE E A, RICHARD A, RANJAN R. Special Functions [ M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.

## Monte Carlo s Approach for the Calculation of Interfacial Transition Zone Fraction in Concrete

JIANG Lu, ZHENG Jia-jun

(College of Civil Engineering and Architecture, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310032, China)

**Abstract:** Based on the simulation technique of concrete mesostructure, a Monte Carlo s approach is presented for the calculation of the area fraction of interfacial transition zone in concrete. Calculated results demonstrate that the area fraction of interfacial transition zone increases, for a given aggregate area fraction, with the decrease of the minimum aggregate diameter and increases, for a given minimum aggregate diameter, with the increase of the aggregate area fraction. By applying mathematical regression, a simple calculation formula of the area fraction of interfacial transition zone is given.

**Key words:** interfacial transition zone; computer simulation; concrete; Monte Carlo s approach