中国科学: 技术科学 2026 年 第 56 卷 第 7 期: 1656 ~ 1675
SCIENTIA SINICA Technologica techcn.scichina.com
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

评 述 复杂恶劣条件下水电开发基础科学问题专刊

混凝土纳-微-细观多尺度结构数字化重构

蒋金洋[1*], 张宇[2], 许文祥[3], 林均霖[1]

1. 东南大学材料科学与工程学院, 南京 211189
2. 山东科技大学土木工程与建筑学院, 青岛 266590
3. 河海大学力学与工程科学学院, 南京 211100
* E-mail: jiangjinyang16@163.com

收稿日期: 2025-12-12; 接受日期: 2026-03-23; 网络版发表日期: 2026-07-10
国家自然科学基金(批准号: 52525901, 52293431, 52479128)资助项目

摘要 混凝土作为全球用量最大的材料之一, 是现代基础设施建设的重要支撑. 混凝土的宏观力学与耐久性能本质上源于其内部的多尺度结构特征, 解析多尺度结构并建立跨尺度关联机制是该领域的重大科学挑战与前沿研究方向. 本文系统综述了混凝土从纳观、微观到细观尺度的数字化重构方法, 包括水化硅酸钙凝胶的分子构型与纳观性能、水泥水化过程与微结构动态演变以及细观尺度骨料分布与界面过渡区的重构技术, 总结了现有方法在不同尺度上的适用性与局限性, 展望了融合人工智能技术的混凝土多尺度数字孪生, 为混凝土材料的设计与性能优化提供理论基础与方法支撑.

关键词 混凝土, 多尺度, 数字化重构, 数字孪生, 结构演变

1 引言

混凝土是全球用量最大的人造材料之一, 在现代建筑与基础设施系统中扮演着不可替代的角色. 混凝土的宏观性能, 如力学强度、耐久性与功能性, 本质上源于其内部高度复杂的多尺度结构体系[1,2], 涵盖纳观尺度下的水化硅酸钙(C-S-H)凝胶分子构型[3]、微观尺度下的水化产物分布与孔隙结构[4,5]以及细观尺度下的骨料排列与界面过渡区[6,7]等, 这些多尺度结构在温湿度变化、化学侵蚀与外部荷载等环境作用下的动态响应与演化行为, 直接控制着混凝土的宏观性能表现与服役寿命[8~10]. 因此, 解析混凝土的多尺度结构特征, 实现其空间上的数字化重构, 对洞悉其动态演变规律意义重大, 是该领域的重大科学挑战与前沿研究方向.

本文围绕混凝土纳-微-细观多尺度结构的数字化重构, 系统梳理并综述了该领域的主要研究进展与方法体系, 具体包括: 纳观层面对水化硅酸钙凝胶分子构型及其性能的模拟与重构方法、微观层面水泥水化过程、微结构演化与数值重建技术、细观尺度中骨料分布、界面过渡区建模及多相复合材料的重构策略. 文中总结了各类数字化重构方法在不同尺度上的适用性与局限性, 并进一步展望了融合人工智能与数字孪生技术的混凝土多尺度建模新范式, 为推动混凝土材料设计与性能优化的理论创新与工程应用提供支撑.

引用格式: 蒋金洋, 张宇, 许文祥, 等. 混凝土纳-微-细观多尺度结构数字化重构. 中国科学: 技术科学, 2026, 56: 1656–1675
Jiang J Y, Zhang Y, Xu W X, et al. Digital multi-scale reconstruction of concrete's nano-micro-meso structure (in Chinese). Sci Sin Tech, 2026, 56: 1656–1675, doi: 10.1360/SST-2025-0408

© 2026 《中国科学》杂志社

2　水化产物分子尺度构型与性能

2.1　环境电子显微镜原位量化水化生成和结构演变

在水泥基材料复杂体系中，水化、碳化、高温劣化等过程涉及从原子级到微米级的多尺度结构演变，伴随动态化学与物理变化. 传统离线表征方法难以捕捉瞬态过程，而电子显微镜(包括透射电子显微镜(transmission electron microscope, TEM)和扫描电子显微镜(scanning electron microscope, SEM))凭借超高空间分辨率和原位环境控制能力，成为解析材料动态行为的关键工具. 电子显微镜的原位观测技术通过在成像过程中精准调控温度、湿度、应力等外部条件，实现对材料实时结构演变的追踪[11]；而量化分析则通过图像识别、衍射解析、元素分析等手段，将微观现象转化为可量化的参数(如生长速率、孔隙率、晶体取向). TEM通过加速电子束穿透超薄样品(厚度通常< 100 nm)，利用电子与原子的相互作用形成图像，核心优势在于亚埃级空间分辨率，可直接观测原子排列和纳米相结构，其量化分析依赖于高角环形暗场扫描的原子序数衬度、选区电子衍射(selected area electron diffraction, SAED)、电子能量损失谱(electron energy loss spectroscopy, EELS)及图像分析算法[12]；SEM通过聚焦电子束扫描样品表面，激发二次电子、背散射电子等信号生成具有三维立体感的形貌像，优势在于大景深和微米级视场，量化分析包括背散射电子显微镜(backscattered electrons, BSE) 信号的原子序数敏感性、能谱仪(energy dispersive spectrometer, EDS)的元素面分布定量分析及图像三维重构技术. 二者结合具有多尺度结构表征能力，可构建“原子-纳米-微米”的跨尺度结构图谱，实现原位动态追踪，突破传统离线表征的“时间快照”限制，同时结合统计方法与物理模型实现定量化分析.

该技术在水泥基材料等多体系中展现了广泛适用性，如Zheng等人[13]通过原位TEM观测到硅酸三钙(alite)水化中C-S-H的“针状伸长-织构致密化”两阶段生长，量化其针状长度增长率为7 nm/min，孔隙率从7.9%降至3.1%，揭示了位错作为形核活性位点的关键作用. 通过SEM原位加热记录了[14]C-S-H在20 ℃~800 ℃的动态收缩，观测到800 nm孔隙的自愈合现象及CaO析出导致的Ca/Si比下降，明确了800 ℃以上向亚稳钙硅酸盐的相变路径. 同时SEM可分析阿利特水合物碳化的形貌与成分演变，通过二次电子成像和EDS面扫描实现量化. 不止于此，原位透射电镜能够捕捉到水化铝酸钙碳化中方解石从纺锤形到菱形十二面体的形态演变[15]，量化其生长速率为0.2 μm/天，并结合原子力显微镜(atomic force microscope, AFM)表征方解石的表面形貌与杨氏模量 (43~68 GPa), 并通过X射线衍射(X-ray diffraction, XRD)分析其结晶度，建立结晶度与力学性能的关联. 电子显微镜技术优势显著，突破了传统表征技术(如XRD, 热重)的“平均化”局限，实现纳米尺度(甚至原子级)的动态追踪，直接揭示微观机制，且可同步关联形貌、结构与成分，为性能量化提供多维度依据. 然而，其局限性亦不容忽视，如样品制备复杂、电子束可能导致样品损伤、实验条件与实际应用存在差异、存在空间与时间分辨率权衡问题、TEM高分辨率模式下视场小、SEM高帧率成像易产生运动模糊等，因此观测区域的局限性可能影响统计代表性[13~16]. 原位TEM与SEM已成功解决了多个核心科学难题，阐明了纳米尺度动态过程的机制，如C-S-H生长的定向性源于表面能最小化[13]，高温下C-S-H的相变并非突变而是逐步重构[14]，并建立了微观结构参数与宏观性能的关联. 未来可通过开发低剂量成像技术、结合机器学习算法实现智能化量化、多技术联用及构建跨尺度模型等方式推动其发展. 电子显微镜的原位观测与量化方法为材料动态行为的多尺度解析提供了强有力的工具，尤其在水泥基材料研究中推动了对关键过程的机理认知，尽管存在挑战，但随着技术升级与方法创新，将在跨尺度材料研究中发挥更核心的作用，为高性能材料设计与优化提供微观理论支撑.

2.2　基于DFT和MD的C-S-H凝胶分子构型计算

作为硅酸盐水泥基材料的主要水化产物，C-S-H凝胶的分子构型对于理解胶凝材料的结构特性具有重要意义. 当前，对C-S-H分子结构的解析得益于密度泛函理论(density functional theory, DFT)、分子动力学(molecular dynamics, MD)等模拟方法的快速发展，前者基于量子力学，通过Kohn-Sham方程将多电子问题转化为单电子近似，利用交换-相关泛函描述电子相互作用，可高效计算基态能量、电子结构及几何优化；后者依据经典牛顿力学，数值求解原子运动方程以模拟体系动态演化，擅长揭示时间依赖行为与宏观热力学性质. 其计算模型主要以托贝莫来石(tobermorite)和六

水硅钙石(jennite)作为C-S-H凝胶的类晶体构建而成[17]. 水泥基材料体系常用的分子动力学力场有ClayFF, CVFF和ReaxFF力场, 其中ClayFF力场为经典力场, 常用来研究水泥熟料相(如C_3S, C_3A)及主要水化产物(如C-S-H凝胶、钙矾石、氢氧化物等层状/多孔矿物)的结构、力学性能、溶胀行为及其与水溶液的界面; CVFF力场适用于多肽、蛋白质等有机体系的结构、表面性质及界面相互作用, 与键长、键角、扭转角和面外相互作用有关的势态也可以用CVFF来描述; ReaxFF力场为反应力场, 适合研究涉及化学键断裂与形成的过程, 如水化反应初始阶段、腐蚀过程(如硫酸盐侵蚀)、分解、界面化学反应等. 分子动力学可以实现分子尺度C-S-H构型的量化, 研究表明当Ca/Si比处于0.9~1.3范围时, C-S-H分子模型与Tobermorite晶体结构相似; 当Ca/Si比为1.5~2.3时, 模型结构近似于Jennite[18]. 以11Å Tobermorite晶体为初始结构, 以中子散射或核磁共振等实验方法表征所得的钙硅比、密度及聚合度等数据为靶标进行化学约束逆向设计, 以钙氧层作为刚性骨架, 通过删除硅链中桥接的硅氧四面体和增加层间钙离子的方法来调整模型的钙硅比, 继而采用蒙特卡罗方法对干燥的C-S-H结构进行水分子吸附以使体系总密度满足要求, 随后在反应力场下激发水解反应, 最终构建出更接近实际体系的C-S-H分子模型[19](如图1所示). C-S-H基本结构单元主要由硅酸盐链和钙离子组成, 呈钙硅层-层间水-钙硅层的三明治层状结构. 其存在大量晶体缺陷, 如硅酸盐链的不连续性及层间区域原子排列的无序性. 随着钙硅比的升高, 硅酸盐链逐渐断裂, 其微观结构从有序态向无定形态转变[20]. 此外, 基于11Å Tobermorite构建Ca/Si比为1.7的C-S-H分子模型中, 分子结构呈现以硅氧单体、二聚体为主的短硅链构型, 表明C-S-H凝胶具有低结晶特征的短程空间有序性, 通过硅氧链随机断裂调控Ca/Si比进而直接关联密度变化, 解决了C-S-H成分-密度关系长期缺失的难题, 为水泥基材料设计提供了原子级理论工具[21].

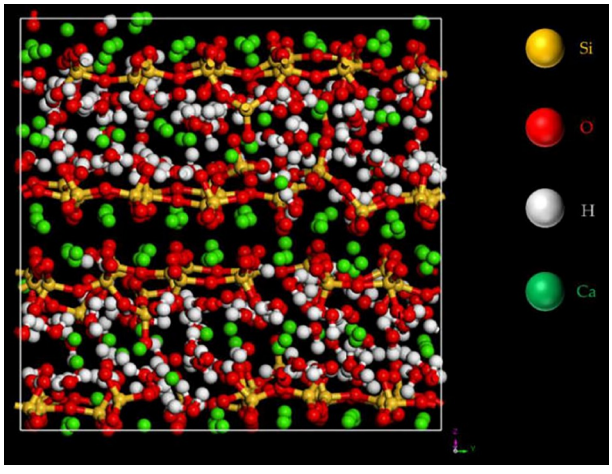


图 1 分子动力学模拟的C-S-H分子结构[19]

Figure 1 Molecular dynamics simulation of C-S-H molecular structure [19].

此外, DFT和MD亦可针对其他胶凝材料开展分子构型研究, 如水化硅铝酸钙(C-A-S-H)、水化硅铝酸钠(N-A-S-H)等[22,23], 揭示了硅铝四面体网络的结构特征, 碱离子通过电荷补偿维持骨架稳定, 但离子迁移会弱化硅铝四面体结构导致宏观强度损失, 高温下的水解反应进一步引发骨架从网络向链状结构转变从而导致性能劣化. 其中, 采用自下而上的方法识别并建立Al取代Si的C-A-S-H原子结构模型, 基于DFT计算解析Al–O键电子结构, 发现$[AlO_4]^{5-}$四面体增强界面共价性, Al–O–Si键的存在表明C-A-S-H具有沸石类结构特征, 且存在可逆结构转变, 可被归类为软多孔晶体, 且其层间的Al–O–Si交联结构对C-A-S-H性能提升起着关键作用. 此外, 采用Na原子、H_2O分子及Si_2AlO_{10}基团作为基本结构单元构建梯度温度/水分的N-A-S-H分子动力学模型, 基于ClayFF力场精确描述Na–O、Al–O–Si键及水分子氢键网络, 结果表明N-A-S-H呈类似玻璃态的无序三维网络结构, 由硅铝四面体通过Si–O–Al和Si–O–Si键连接, Na^+分布于骨架孔隙中, 有序性低. 因此, 水化硅铝酸钙(钠)(C(N)-A-S-H)的分子结构为地聚物、碱激活矿渣等低碳胶凝材料的性能调控提供了分子层面的理论基础.

尽管DFT与MD在C-S-H原子结构解析方面成果显著, 但DFT计算规模小, 计算成本随原子数呈三次方增长, 难以处理数千以上原子的C-S-H介观体系; 而MD力场普适性较差, 难以精确描述体系动态反应过程. 未来可通过机器学习势函数及增强采样算法等方法, 实现兼顾DFT精度与MD效率的水泥基材料体系长时程模拟.

2.3 基于MD的C-S-H凝胶力学和传输性能计算

分子动力学模拟为解析C-S-H力学性能的纳米起源提供了关键手段. 采用ClayFF/ReaxFF力场, 通过恒

应变速率拉伸/压缩等静态加载或冲击荷载等动态加载方式, 计算弹性常数、抗拉强度及弹性-塑性转变阈值, 分析其失效模式. C-S-H的力学指标(如弹性模量、强度、韧性)主要受其化学组分及环境因素调控, 而力场参数作为模拟输入条件, 会影响力学性能计算结果的准确性[24]. 随着Ca/Si比的增加, C-S-H的弹性模量和剪切应力显著减小, 这是因为Ca/Si比的增加引起硅酸盐链断裂, 从而导致层间骨架坍塌、力学性能降低[20,25,26]. 力场选择显著影响弹性参数, ClayFF力场计算的9Å tobermorite杨氏模量为176.67 GPa, 而ReaxFF力场结果为112.72 GPa, 差异源于化学键合描述的不同[27,28]. 环境因素中, 高温会导致硅氧键伸长和水分子极化减弱, 引发体积膨胀和强度下降, 而高压下C-S-H的弹性行为会因(020)面晶胞参数突变而发生相变[29,30]. 动态加载模拟显示, C-S-H力学行为表现出各向异性, 在单轴拉伸载荷作用下, C-S-H在*a*, *b*方向的弹性模量约为40~50 GPa, 在*c*方向的弹性模量约为25 GPa[3]. C-S-H的抗压强度显著高于抗拉强度, 且纳米级断裂呈韧性特征, 与宏观线性弹性断裂力学模型存在本质差异[31]. 此外, 大量研究将聚合物或二维纳米材料引入C-S-H凝胶中构建复合材料体系, 通过分析其界面结构及相互作用进而揭示力学性能增强机理[32~36], 从而为超高性能水泥基材料的设计制备提供新思路.

C-S-H纳米通道内水分与离子的传输行为反映了水泥基材料的耐久性能. 基于分子动力学方法可构建离子溶液渗透C-S-H纳米通道模型(如图2所示), 通过均方位移计算水分/离子扩散系数, 可衡量粒子的运动能力和运动状态; 结合径向分布函数解析氢键网络与离子键合特性, 可反映体系的微观结构, 如原子堆叠方式、配位数、键长、相态等, 进而揭示C-S-H水分与离子扩散传输机制. 从传输特性来看, 水分与离子的迁移受孔道约束、化学环境及界面作用调控. 温度升高会增强粒子热运动从而加速水分子扩散, 但可能破坏离子水合壳结构, 导致钠离子、硫酸根离子等传输速率下降[37]. Ca/Si比通过改变硅酸盐链结构影响传输性能, 高Ca/Si比引发长链断裂, 暴露更多氧位点, 促进水分子与钙离子的结合, 进而增强氯离子吸附[38]. 此外, 离子传输呈现特异性机制, 硫酸根离子主要通过与钙离子结合实现吸附, 钠离子则与非桥氧位点相互作用, 二者均受体系电荷平衡调控[39]. 表面极性通过改变水分子排列影响扩散速率, 疏水性表面因氢键

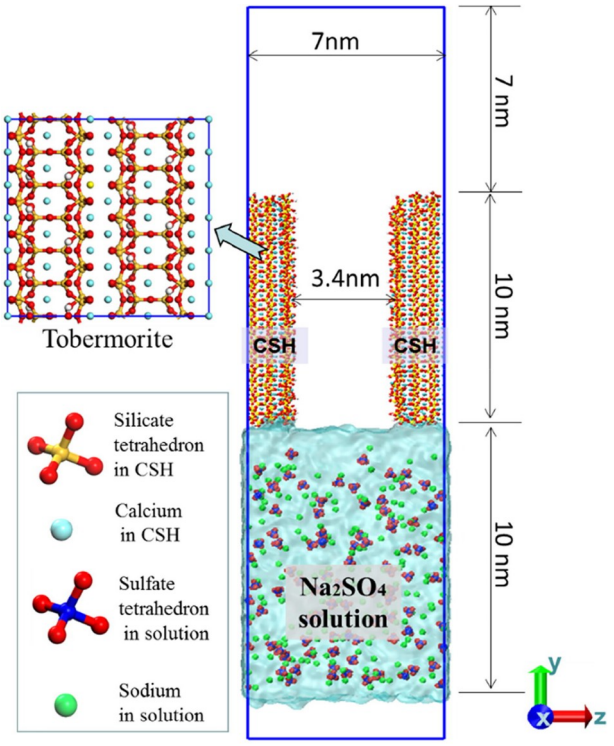


图 2　硫酸盐溶液渗透C-S-H纳米通道模型[39]

Figure 2　Sulfate solution permeation C-S-H nanochannel model [39].

网络弱化使水分子扩散加快, 亲水性表面则因强吸附作用限制传输[40]. 因此, C-S-H中水分与离子的传输行为是多因素耦合作用的结果, 对水泥基材料的耐久性及优化设计具有重要意义.

MD在C-S-H力学及传输性能研究中具备原子尺度原位分析优势, 可揭示分子结构演化与性能衰退的定量关联机制, 然而其受限于力场精度、时间尺度与体系尺寸瓶颈等, 难以精确描述复杂多阶段化学反应, 且纳秒级模拟无法覆盖水泥基材料体系水化或传输的小时级过程. 元动力学是一种增强采样的分子动力学方法, 专门用来解决传统模拟因时间尺度限制而无法观测到的“稀有事件”(如熟料矿物的溶解、离子迁移或早期水化反应)的问题. 机器学习分子动力学能通过人工智能范式从根本上解决传统分子动力学在精度与效率之间难以兼顾的核心矛盾, 且可实现时空尺度的复杂相互作用描述及高通量模拟与智能设计. 因此, 未来可结合元动力学、机器学习等方法突破现有局限, 为水泥基材料的耐久性设计与性能优化提供不可替代的理论基础.

3 水化动态演变与水化微结构

3.1 水化微结构数值模型

水化动态演变与微结构解析是水泥基材料宏观性能的重要基础, 现有研究已构建了多种水化过程-微结构动态关联数值模型[41], 这些模型多以动力学方程为基础, 能够准确预测纯熟料矿物、混合水泥等不同胶凝体系的水化反应[42]与界面演化过程[43]. 从建模思路上看, 现有水化-微结构数值模型并非源于单一研究路径, 而是分别基于颗粒几何演化、界面能驱动、反应-传输耦合及热力学约束等不同理论框架发展而来. 具有代表性的建模方法包括: (1) 基于颗粒动态演化的HYMOSTRUC3D模型[44~46]; (2) 通过界面能计算的μic模型[47,48]; (3) 集成物质传输方程的DuCOM模型; (4) 采用离散元算法的CEMHYD3D模型[49~51]; (5) 引入热力学约束的THAMES模型[52~54]. 数值模型的微观特征模拟结果可与介观力学模型、宏观传输模型建立参数传递机制, 形成跨尺度性能预测的科学框架. 其中, CEMHYD3D作为一款图像基离散数值模型, 其构建依托三维数字化重构技术, 建立具有空间分辨能力的多元物相数据库[55]. 在该模型中, 离散化微结构的表征通过三维阵列中体素的拓扑信息实现, 单个体素(1 μm^3)表征材料介观层面的组分属性. 需要指出的是, 建模时默认体素内部为均质状态, 难以反映亚微米尺度下凝胶相的结构非均匀性, 因此更适用于微结构演化趋势分析. 该方法的优势在于水化进程中能动态追踪产物的三维逾渗演化, 特别是在新相成核与界面重构过程中, 可通过体素状态转移矩阵实时更新界面传输通道的连通特性[56].

水泥颗粒的几何形态拓扑特征呈现显著非理想性, 其表面构型往往偏离经典对称分布模式[57]. 采用多级中心扩展算法生成的类分形颗粒能够有效再现真实水泥的几何特性, 为模型中颗粒重构过程提供更符合物理实际的拓扑输入参数[58]. 但相关建模通常仍假设颗粒内部组成与反应活性均一, 该简化在多相或高掺量矿物掺合料体系中可能引入偏差. 随着低碳胶凝材料的研究拓展了水泥体系的物相反应网络, 研究者由此建立了分析矿物掺合料微结构演化的多尺度框架. 通过计算模块创新性地将矿渣反应进程与孔隙溶液离子迁移率相耦合, 能够模拟碱性环境维持对硅铝酸盐溶蚀速率的调控作用[59]. 通过考虑孔隙溶液变化与氢氧化钙分布[60], 模型进一步引入了粉煤灰、硅灰等常用辅助性胶凝材料, 并计算其对水化热的贡献, 研究了SCMs对微结构发展与强度的影响[61]. 结果表明粉煤灰颗粒在水泥体系中具有双重作用机理: 既作为纳米级成核位点加速水化产物析晶, 又通过界面拓扑重构增加凝胶相输运路径迂曲度, 这种双效耦合机制可定量解析多元胶凝体系的性能优化窗口[62].

将水化产物空间分布与多孔介质理论相结合, 研究者建立了从微观结构到宏观传输参数的跨尺度映射体系. 颗粒形貌学的多层级影响机制被建立以说明非对称颗粒的三维堆积构型不仅改变接触界面化学反应活性分布, 更通过优化产物相的结晶取向显著降低渗透路径连通性[63]. 研究特别指出, 忽略颗粒真实形貌将导致传输参数计算产生系统性偏差, 其原因在于理想几何假设不能完整描述界面过渡区的电荷分布特性与产物层扩散势垒形成机制[64]. 此外, 在考虑外部侵蚀因素时, 需同步耦合化学溶解动力学与孔隙结构拓扑演变方程, 才能准确预测试样使用寿命. 尽管微结构数值模型在模拟水化进程和微观结构演化方面取得了显著进展, 但其应用仍存在显著局限性. 模型的微米级空间分辨率限制了其对传输性能预测的精度, 早期水化动力学模拟的保真度较低以及模拟过程受限于算力成本. 因此, 该类水化-微结构数值模型目前主要用于机理解析与趋势判断, 其工程尺度应用仍需结合实验数据进行校准.

3.2 基于深度学习的微结构视觉识别

水化微结构特征在混凝土材料的研究中起着至关重要的作用, 它不仅反映了材料组分和制备工艺对水化过程的影响机制, 还直接决定材料水化后的宏观性能[65]. 传统水化微结构的分析方法高度依赖专业经验与大量人工操作, 如物理描述符、统计函数等分析手段通常需预设孔隙率、密实度、空间排布等特征参数, 这可能导致部分潜在特征被忽略[66]. 相比之下, 深度学习提供了一种数据驱动的视觉识别方法. 它受人脑视觉感知机制启发, 在反向传播算法优化下自适应调整神经元权重. 通过多层卷积与池化, 模型能够逐级提取从局部纹理到宏观语义结构的多尺度特征, 并形成非线性映射关系. 这一过程无需人工设定特征参数, 可显著降低主观偏差. 因此, 深度学习能够自动从BSE等图像中识别微结构特征[67,68], 为混凝土水化微

结构的智能化表征开辟了全新路径.

在分析混凝土水化微结构的特定特征时，需确保研究对象的结构尺寸足以代表材料整体特性，这一关键概念被定义为代表性体积单元(representative volume element, RVE)[69]. 在深度学习应用框架下，基于卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)的分类模型为水泥基复合材料RVE的确定提供了智能化策略(图3(a))[70]，例如，将三种类型水泥基复合材料的二值化BSE图像输入CNN后，通过调整图像的像素分辨率，并保持几何尺寸不变，可系统观测CNN分类精度的变化规律. 研究表明，当图像物理尺寸达到约90.08 μm时，CNN在训练集、验证集与测试集上均达到接近100%的分类准确率，意味着该图像尺寸具有足够的代表性(图3(b)). 该方法为确定深度学习模型表征水泥基复合材料所需的最小图像尺寸奠定了理论基础; 进一步地, 遮挡敏感性分析能够直观识别不同类型水泥基复合材料微结构差异的最关键区域(图4)[70]. 通过在BSE图像中随机遮挡局部区域并监测分类精度变化，从而量化不同微观结构特征对CNN判别决策的贡献度. 研究发现，水泥基复合材料的孔隙空间排列特征比单一孔隙率参数具有更高的影响权重. 因此，深度学习不仅能自动识别混凝土材料水化微结构特征的多样性以实现最优分类精度，还可通过模型提取关键特征的可视化呈现，揭示人类专家可能忽略的微观结构模式与潜在作用机制[71].

水泥浆体微结构是由水泥熟料水化反应形成的复

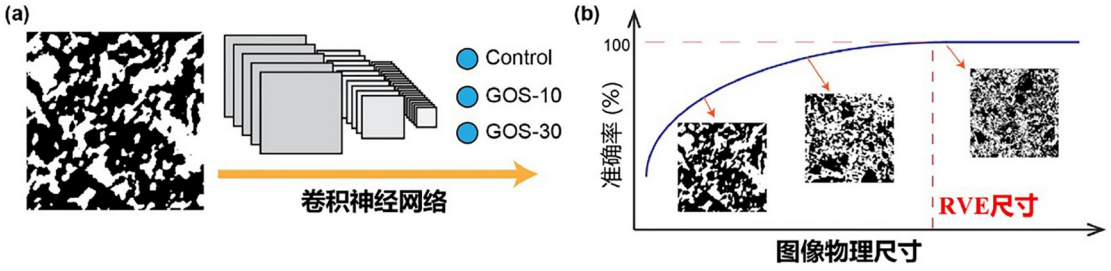


图 3　(a) 用于水泥类型分类的卷积神经网络(CNN)示意图; (b) 通过CNN计算水泥复合材料代表性体积单元(RVE)的方法示意图[70]

Figure 3　(a) Convolutional neural network (CNN) diagram for cement type classification; (b) a schematic diagram of the method for calculating the representative volume element (RVE) of cement composites by CNN [70].

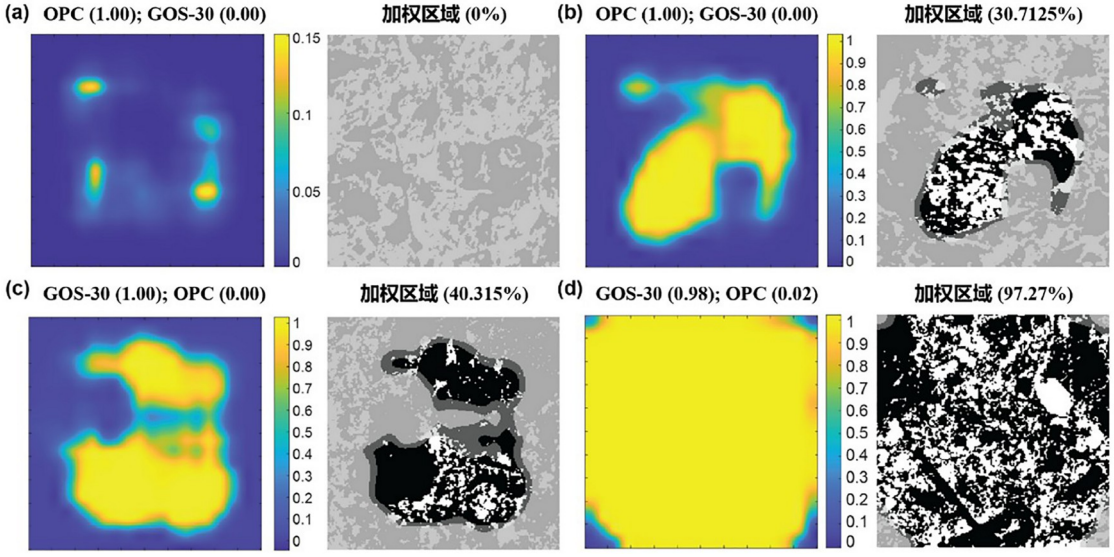


图 4　(a), (b) OPC和 (c), (d) GOS-30样本的遮挡敏感性分析[70]

Figure 4　The occlusion sensitivity analysis of OPC (a), (b) and GOS-30 samples (c), (d) [70].

杂多相体系[72]，其相邻区域存在显著的跨区域空间相关性. CNN能够通过整合邻区信息精准预测中心区域的微观结构，从而有效揭示这些区域之间的空间相关性(图5)[73]. 该研究采用创新的同心圆采样策略，通过随机裁剪、旋转等数据增强方法，从16张高分辨率的BSE图像中构建了超过15000个样本量的数据集，并按10:4:1的比例划分为训练集、验证集与测试集. 该深度学习方法包括两个主要步骤: 首先, 构建包含分类算法的CNN模型，用于检测微观结构中的空间相关性；其次，基于捕获的空间相关性，使用带有回归算法的CNN模型重建微观结构模式. 为了量化评估重构性能，引入了“偏差像素”作为评价指标(定义为预测灰度值与真实值的差异). 量化结果显示，回归模型在预测中心区域微观结构时，其输出与真实图像的偏差像素数量较低，表明重建模式与真实结构高度吻合，验证了模型在捕捉与重建空间相关性方面的泛化能力. 更重要的是，深度学习揭示了水泥浆体微结构中的空间相关性表现出与尺度和距离相关的分形特征，且不同组分之间的空间相关性呈现复杂的多维度相互作用. 这种自动化、智能化的图像重构方法能够同时保留低阶和高阶信息，为其他多孔材料的图像分析提供了可借鉴的技术范式.

深度学习在混凝土水化微结构图像的特征提取、分类及重构等领域已展现出巨大应用潜力，需强调的是，上述研究的成功取决于相关数据集的获取与预处理质量. 高质量的BSE图像采集是有效特征识别的前提，图像分辨率与对比度的不足将直接影响特征提取的可靠性. 在预处理阶段，精准的二值化等操作是去除噪声、突显微观结构形貌特征的关键步骤；而针对样本量有限可能导致的过拟合问题，则需通过旋转、翻转等数据增强技术增加训练样本的多样性，从而提升模型对微结构特征的泛化识别能力. 未来，随着多源异构数据融合技术的成熟与算法模型的持续优化，深度学习有望实现微观结构图像数据的自主生成，大幅降低传统数据获取与处理方式的高成本限制，为混凝土新材料的研发突破与工程应用提供更为坚实的技术支撑.

4 混凝土骨料堆积与界面过渡区

4.1 骨料动态堆积模拟

在细观尺度上，混凝土可视为由骨料、界面过渡区(interfacial transition zones, ITZs)和均匀砂浆组成的三相复合材料. 混凝土的宏观力学性能主要由这些细观组分决定. 同时，混凝土材料的非均质特性会导致其离子迁移、水分渗透等传输性能呈现显著的空间分布不均性，进而影响宏观尺度下混凝土材料在环境作用下的耐久性劣化规律. 因此，建立包含真实骨料信息的细观模型，对于准确模拟和预测混凝土的力学行为与传输过程至关重要. 目前，生成混凝土细观模型的方法主要有两种: 数字图像分析法和参数化建模方法[74]. 其中, 数字图像分析法指通过X射线计算机断层扫描(X-ray computed tomography, X-CT)技术[75]、激光扫描测试技术[76]等专业成像设备扫描混凝土试件，结合数字图像处理技术(例如，Avzio等软件)重构混凝土细观结构. 数字图像分析法能够真实地反映出混凝土内部骨料的分布、ITZs形态等细观结构特征. 然而，模型的精度和可靠性受制于成像设备的分辨率. 成像设备扫描精度不足会导致骨料边界难以清晰界定，甚至出现颗粒重叠现象. 此外，测试试件尺寸有限、庞大的数据处理量和成本较高等限制了其推广应用.

作为替代方案，参数化建模方法凭借其高效低成

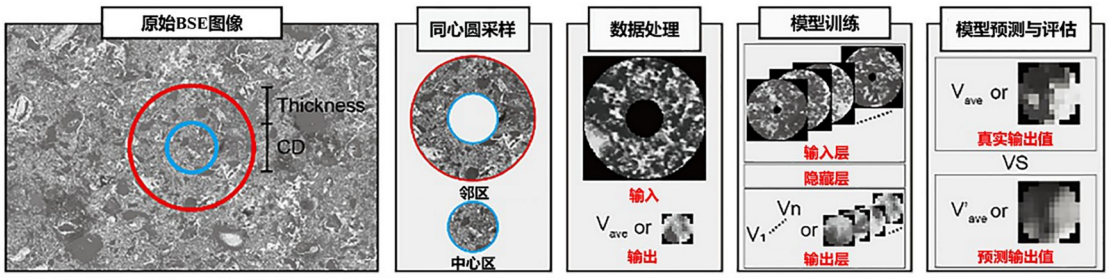


图 5 基于深度学习方法研究水泥浆体微观结构空间相关性的流程示意[73]

Figure 5 A process diagram for studying the spatial correlation of cement paste microstructure based on deep learning method [73].

本的优势应运而生，混凝土细观结构可以被视为骨料的随机堆积模型[77]. 参数化建模过程主要依据计算几何及图形学理论，构造具有真实几何特征的骨料模型，开发接触检测及堆积算法，最终构建出满足预设目标的混凝土骨料堆积数值模型. 在骨料几何模型构建方面，球体因其计算便利成为最早且最常用的几何模型[78,79]，但球体只能保留骨料体积信息. 随后，椭球体[80]和正多面体[81,82]被用于模拟包含伸长率与棱角度的骨料形状，但这些模型生成的骨料形状具有一定的对称性且缺乏随机性. 后续研究多采用通过Voronoi镶嵌法[83]和凸多面体延拓法[84,85]生成的随机多面体来表征骨料. 然而, 凸粒子模型无法模拟兼具凸凹形貌的真实非凸骨料. 为解决这一局限，学者们基于X-CT技术扫描获取骨料颗粒的数字图像数据，利用球谐函数等数学工具表征骨料的几何形貌特征[86,87]，成功构建了具有局部凹陷特征的几何粒子模型. 值得注意的是，Xu等人[88]提出了一种数学可控的参数化建模方法，通过引入局部凹陷来重构真实骨料表面的非凸形貌特征，该方法相对于球谐函数模型具有更明确的几何意义.

在堆积算法方面，最广泛使用的方法是取放法[89]，也被称为随机有序添加(random sequential absorption, RSA)或随机投放(random parking, RP). 在RSA中, 骨料以随机位置和方向连续放置，直至体积分数满足要求. 尽管RSA操作简便，但获得较高体积分数骨料的效率较低. 为此，研究者们开发了一些优化的RSA算法以提升骨料体积分数和效率. Leite等人[90]提出了一种随机启发式算法，通过允许骨料平移和旋转来生成椭球骨料的随机投放模型，这与Zhou等人[91]提出的平移-旋转法类似. 此外, Zhang等人[92]基于试样单元的Voronoi图，通过收缩算法建立了多面体骨料的随机投放模型. 尽管这些优化算法在提升RSA效率和骨料体积分数方面取得了一定进展，但它们仍难以充分模拟颗粒在真实堆积过程中的动态相互作用与位置调整机制，尤其对于非凸形貌骨料的复杂堆积行为，其模拟精度和效率仍存在局限. 在此背景下，离散元法(discrete element modelling，DEM)作为一种强大的数值工具，能够模拟非球形颗粒的随机动态堆积，并生成高体积分数的颗粒分布，被广泛应用于混凝土中骨料、水泥颗粒及外加剂的随机堆积模拟[93,94]. 然而，大多数研究仍聚焦于简单球形、椭球形甚至凸形颗粒的DEM应用[95]，而对于具有凸凹形貌特征的真实非凸骨料的DEM研究则相对匮乏. 为突破传统DEM在处理此类高体积分数的真实非凸骨料随机紧密堆积的效率与精度瓶颈，许文祥课题组[88]开发了基于graphics processing unit (GPU)加速的离散元模型. 该模型创新性地采用水平集算法实现非凸骨料的高效接触检测，其中水平集算法通过定义在颗粒上的水平集函数, 利用“以空间换时间”的策略大幅提升了计算效率. 该研究成功构建体积分数高达76%的三维非凸骨料随机紧密堆积模型(见图6)，为高体积分数复杂形貌骨料的堆积模拟提供了解决方案. 尽管基于GPU加速和水平集接触检测的DEM方法在构建高体积分数非凸骨料模型上取得了显著进展, 尤其是突破了单一形貌的限制, 然而该领域仍面临严峻挑战，现有算法在处理真实混凝土中包含从细骨料(0~4.75 mm)到粗骨料(5~40 mm)的大跨度粒径分布时, 计算效率急剧下降, 严重限制了模型在实际工程混凝土级配设计中的适用性. 未来研究需进一步攻克以下方向: 开发多尺度/混合算法、优化自适应空间分割与接触检测技术、采用多时间步长积分策略以及探索级配等效简化方法. 这些方法结合更强大的异构计算能力，将有望实现在宽级配甚至连续级配下的高效高保真堆积模拟.

4.2　界面过渡区量化

ITZs是混凝土中除骨料和砂浆之外的第三种不可忽视的相, 其形成机制复杂, 依据混凝土材料制备与服役过程剖析其成因和演化可以划分[96]为: (1) 边壁效

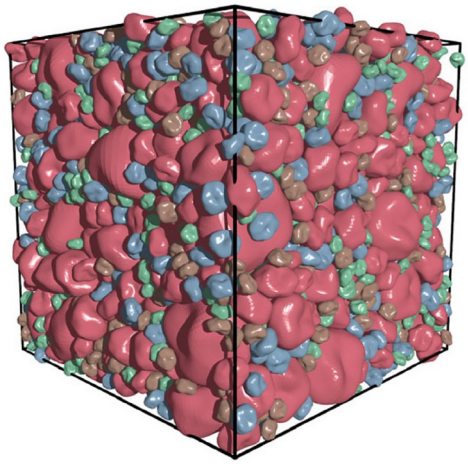


图 6　三维非凸骨料随机紧密堆积模型[88]

Figure 6　Three-dimensional non-convex aggregate random close packing model [88].

应, (2) 微区泌水效应, (3) 离子的迁移、沉积及成核作用, (4) 单边生长效应, (5) 絮凝成团效应和 (6) 脱水收缩效应. 由于ITZs区域的孔隙率较高, ITZs的体积分数和厚度等性质对混凝土的传输性能有重要影响[97]. 然而, 实验中难以精准界定骨料周围ITZs的边界和体积[98], 因此直接测量ITZs的体积分数极具挑战性. 当前ITZs的表征技术主要包括光学显微镜、X-CT技术、纳米压痕法、XRD方法、扫描电子显微镜[99]和交流阻抗谱等, 可用于分析其微观结构演化、厚度、硬度及弹性模量等特征. 但由于ITZs范围仅几十微米, 取样难度大, 这些技术的测试结果往往存在较大离散性, 需通过大量数据积累以提高定量表征的准确性. 例如, 扫描电子显微镜图像可以显示砂浆和混凝土的细观结构的二维切片. Lu等人[99]已经证实, 即使ITZs在三维细观结构中是均匀厚度的, 二维切片也会显示出ITZs厚度的广泛分布.

作为直接实验表征的补充, 过去数十年间, 理论和数值模拟方法在统计量化ITZs体积分数方面做出了重要贡献. 最早可追溯至20世纪90年代末, Lu与Torquato[100]开创性地提出了基于最近表面分布函数的分析框架, 用于计算所谓的球形孔隙“排除”概率. 随后, Garboczi和Bentz[101]应用该球形孔隙“排除”概率, 结合硬核软壳(hard-core soft-shell, HCSS)[102]模型(即假设颗粒由不可重叠的刚性内核与可渗透的软外壳组成), 评估不同几何形状和尺寸骨料周围的ITZs体积分数, 其中每个骨料及其周围的ITZs分别被视为硬核和软壳, 在每个硬核上涂有一层预定义厚度(如ITZs厚度). 然而, 上述基于球形的理论模型难以直接应用于非球形骨料. 为突破此限制, Zheng等人[103]和Xu和Chen[104]分别利用蒙特卡罗模拟研究了椭球形骨料周围的ITZ体积分数, 但两者关于椭球形骨料形状效应的数值结果差异较大. 此外, Xu等人[105~107]进一步给出了对于不同凸骨料和纤维(包括椭球体、多面体和球柱体)的ITZs体积分数的近似理论模型. 尽管这些重要的研究丰富了对混凝土中ITZs体积分数的认识, 但真实非凸骨料周围的ITZs体积分数仍然是一个未解决的问题, 特别是在非凸骨料高堆积分数的堆积模拟中. 为了解决这一问题, 许文祥课题组[88]基于所构建的三维非凸骨料随机紧密堆积模型, 结合硬核软壳模型, 建立了包含非凸骨料、ITZs和均质砂浆的三相混凝土细观结构. 通过蒙特卡罗随机点采样法, 在细观结构中生成大量随机点, 利用水平集算法判断点是否位于ITZs区域, 从而精确测定了高堆积分数下真实三维非凸骨料周围的ITZ体积分数. 这一工作首次实现了高体积分数非凸骨料堆积中ITZs体积分数的精准量化, 为揭示ITZs与混凝土宏观性能的关联提供了关键支撑. 尽管在ITZs体积分数量化方面取得了显著进展, 然而该领域仍存在挑战: 一方面是ITZs内部的非均质性和厚度的非均匀性. 当前模型普遍将ITZs简化为具有均质属性和均匀厚度的理想层. 然而, 实际ITZs的厚度在骨料表面存在显著的空间变化. 更重要的是, 即使在同一厚度下, ITZs区域内部的孔隙率、水化产物相分布、微观缺陷以及由此衍生的力学与传输性能也呈现强烈的梯度变化和空间变异性. 这种复杂的非均质特性难以通过当前均匀化的ITZ模型准确表征. 此外, 当前模型多为静态, 难以模拟水泥水化过程、环境作用(干湿循环、冻融)下ITZs微观结构的动态演化, 仍需进一步深入研究.

4.3 纤维增强水泥基材料的细观数值模拟

在提升水泥基材料的韧性、抗裂性和耐久性方面, 纤维增强已被证明是一条极其有效的途径. 通过掺入钢纤维、合成纤维或天然纤维, 可以显著抑制基体裂缝的萌生与扩展, 赋予材料优异的能量吸收能力和延性. 然而, 纤维增强水泥基复合材料(fiber reinforced cement-based composites, FRC)性能的飞跃式提升, 其核心机制根植于纤维-基体界面在细观尺度下的复杂相互作用. 因此, 深入探究并精确表征这些细观结构特征及其演变规律, 是理解FRC增韧机制、预测其服役性能、并最终实现材料理性设计与优化的关键所在.

依据纤维从水泥基体中拔出的特点, 学者们提出了一系列的力学模型从不同角度揭示FRC的多缝开裂和高延性的形成机制[108~110]. Kabele和Stemberk[111]提出了一种考虑复合材料微观随机特性的FRC应力-应变计算模型, Lu和Leung[112]基于裂纹表面附近应力分布与基体开裂强度的关系, 建立了FRC拉伸行为分析模型. 当给定细观尺度力学参数时, 上述模型可以量化FRC在拉伸过程中的开裂行为和拉伸曲线. 基于传统模型, Jiang等人[113~115]引入考虑断裂效应和双向拔出修正的纤维桥接模型, 通过考虑随机分布的纤维对基体应力发展的影响, 对并联纤维增强体系的裂纹追踪算法进行精细化计算, 如图7所示. 其局限性主要在于模型参数(如纤维黏结强度、滑移硬化/软化规律)高

度依赖实验标定，且通常假设纤维分布均匀、取向随机，难以准确反映实际材料中纤维团聚、取向偏析等非均匀分布的影响. 结合先进的微观扫描技术，可在保持试件完整性的前提下预测整体的延性性能. 更进一步，在此模型的基础上，将FRC的变形行为转化为无损基体弹性变形与裂纹表面纤维桥接变形耦合的结果, 通过引入基体与最近裂纹表面的距离参数, 结合纤维桥接分布模型(fiber bridging distribution model, FBDM)，建立了纤维桥接力与基体应力分布之间的关系. 该模型能够主动捕捉按照构件强度分布顺序出现的裂纹，从而避免了预设载荷步长导致的曲线计算精度不稳定的问题. 其核心理念是通过数值方法(如基于应力判断或断裂能准则)主动预测并追踪裂缝萌生、扩展与连通的全过程, 动态更新裂缝网络, 从而更真实地模拟FRC的多缝开裂行为. 其局限性在于计算成本高昂, 且对网格尺寸、断裂准则以及裂缝扩展步长敏感, 在模拟复杂三维裂缝网络相互作用时面临收敛性挑战.

当纤维从基体中拔出时，根据线弹性断裂力学理论，可以得到单根纤维与基体之间的荷载-位移关系, 将其划分为三个阶段：初始阶段(弹性阶段)、纤维脱黏阶段和纤维滑移阶段，如图8所示. 基于单丝拔出行为, Huo等人[116,117]提出使用纤维/界面联合本构模型模拟纤维与基体界面之间的相互作用. 该模型的核心是将纤维与界面视为一个力学耦合单元, 用统一的荷载-位移关系来描述从弹性黏结、脱黏到滑移摩擦的完整拔出过程，从而避免了分别建模纤维和复杂界面区的困难，大幅简化了模型并提高了计算效率. 其局限性在于该本构关系通常基于简化假设(如界面均匀、力学行为路径无关), 难以精确描述循环荷载、动力冲击或化学侵蚀下的界面性能退化，且模型参数需要大量精细的单丝拔出实验进行标定. 进一步根据纤维埋置深度、倾斜角度和断裂状态进行分类计算，得到相应类别的联合单元的比例和本构. 利用蒙特卡罗方法随机投放至设定好尺寸和本构的基体试件中，实现FRC拉伸行为的细观有限元模拟分析. 其优势在于将传统方法中FRC的三相建模简化为两相，大幅提高计算效率. 该方法可实现FRC在不同温度下的准静态力学性能(抗压、四点弯曲和单轴拉伸)和落锤冲击性能的数值模拟. 其不仅可计算得到应力-应变曲线，还可通过塑性应变云图和应力云图观察到多缝开裂状态和内部纤维的应力水平, 如图9所示.

当前细观数值模型的核心突破在于实现“纤维-界面-基体”协同演化的动态捕捉. 其可靠性高度依赖于微观参数的精准输入. 同步辐射显微computed tomography (CT)与数字体图像相关(digital image correlation, DIC)技术的发展, 使原位观测纤维拔出过程中的界面微滑移量和三维应变场成为可能，为模型参数标定提供了直接依据. 未来需结合DIC定量分析裂纹张开位移与模拟塑性应变场的空间匹配度. 同时，现有模型多聚焦准静态工况，而实际工程中的冲击、疲劳

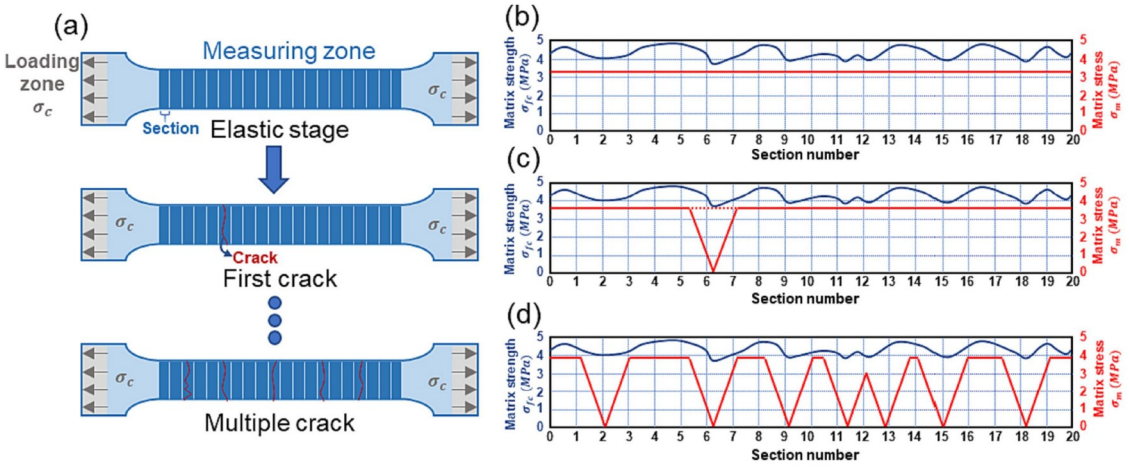


图 7　裂纹追踪算法的示意图[115]. (a) 拉伸过程裂纹扩展示意; (b) 弹性阶段试件缺陷尺寸概率分布; (c) 初裂阶段试件缺陷尺寸概率分布; (d) 多缝开裂阶段试件缺陷尺寸概率分布

Figure 7　Schematic diagram of crack tracking algorithm [115]. (a) Schematic illustration of crack propagation during the tensile test; (b) probability distribution of defect sizes in specimens during the elastic stage; (c) probability distribution of defect sizes in specimens during the initial cracking stage; (d) probability distribution of defect sizes in specimens during the multi-crack stage.

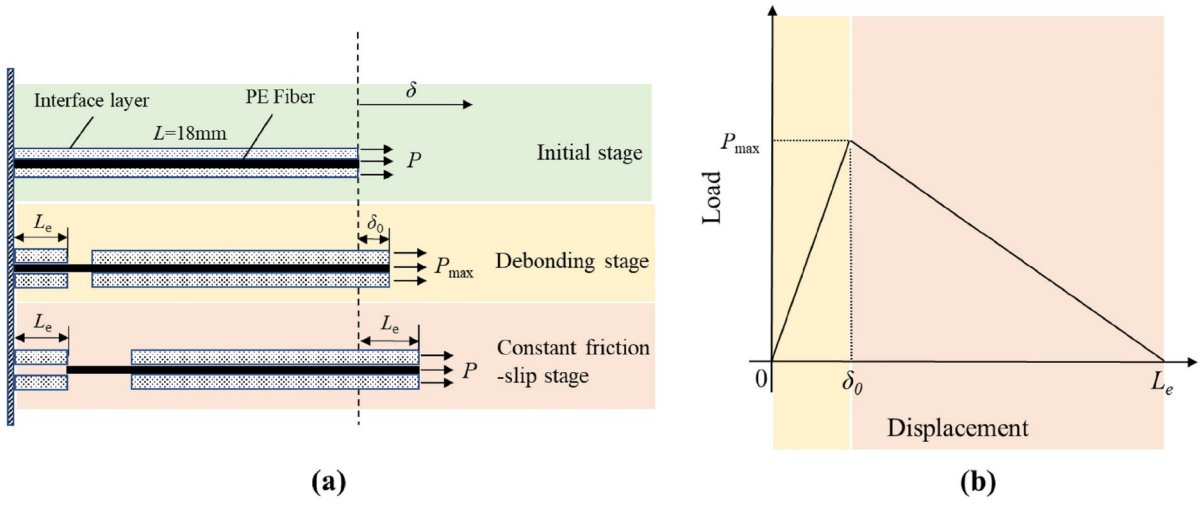


图 8 FRC中典型的单丝拔出过程[116]. (a) PE纤维拔出过程的三个阶段; (b) PE纤维的单丝拔出曲线

Figure 8 Typical monofilament pull-out process in FRC [116]. (a) The three stages of the PE fiber pull-out process; (b) the single fiber pull-out curve for PE fibers.

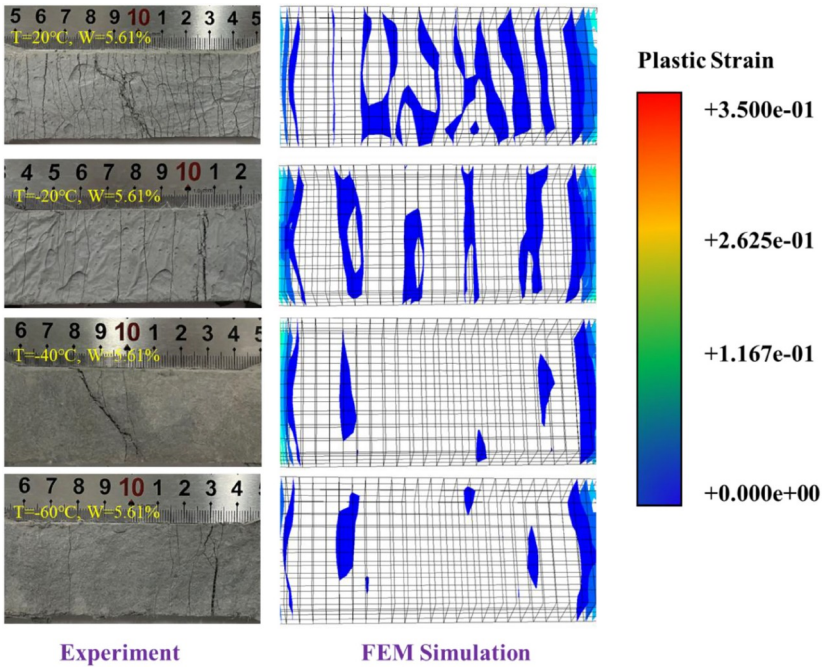


图 9 FRC在不同温度下的试验开裂形貌与有限元模拟的塑性应变云图的比较[117]

Figure 9 The experimental cracking morphology and finiteness of FRC at different temperatures comparison of plastic strain contours of element simulation [117].

荷载会引发界面黏结退化与速率效应. 引入率相关界面本构及化学-力学耦合框架(如考虑冻融/侵蚀环境下界面相的劣化)是模拟服役性能演化的必然方向. 此外, 机器学习辅助的参数反演优化有望解决复杂模型中多变量耦合导致的标定困难, 推动细观模拟从机理阐释向工程设计工具转化.

5 试验手段跨尺度信息获取

在混凝土多尺度结构数字化重构的研究中, 三维

数值方法常受限于其固有的尺度局限性. 不同尺度下所采用的方法差异显著, 导致跨尺度关键结构特征之间难以建立有效的关联机制. 相比之下, 实验表征手段在尺度适应性方面表现出较强的灵活性. 例如, AFM, CT及各类电子显微镜技术(如SEM, TEM), 可通过调整成像精度与样品制备策略, 实现从纳米到毫米级跨尺度范围内的结构量化与形态表征, 从而为建立跨尺度关联提供了重要实验依据.

AFM作为一种高分辨率表征工具, 在水泥基材料微纳结构表征与性能量化中发挥着关键作用, 其核心通过力-距离曲线(F/D曲线)捕捉探针与材料表面的相互作用, 实现对表面形貌、黏附力、Hamaker常数等关键参数的测定[118,119]. 在纳观形貌表征方面, AFM可精准获取水泥基材料的表面粗糙度, 为分析界面接触面积与力的关系提供基础[120], 例如, 对波特兰水泥(PC)和粒化高炉矿渣(GGBFS)抛光表面的扫描显示, 其表面粗糙度会显著影响黏附力测量的准确性, 需通过算法修正以消除干扰. 在C-S-H研究中, AFM还能同步记录表面高度与力曲线, 揭示不同Ca/Si比下的微观异质性, 如Ca/Si = 1.1时C-S-H表面呈现更均匀的纳米结构. 性能量化方面, AFM通过吸附力(snap-in)和拉脱力(pull-off)的测量, 可量化颗粒间的黏附力与Hamaker常数 (表征范德华力的关键参数). 研究表明[121], PC在空气中的Hamaker常数(24.06×10^{-20} J)高于GGBFS (5.15×10^{-20} J), 且因多相组成呈现两组特征值, 分别对应未水化C_3S相和其他水化产物. 对于C-S-H, 其Hamaker常数随Ca/Si比先增后减, 在Ca/Si = 1.1时达到峰值(0.21×10^{-18} J), 反映了硅氧四面体与Ca^{2+}桥接对范德华力的调控作用[122]. 此外, AFM测得的黏附力受环境湿度影响显著: 高湿度(90% RH)下, C-S-H表面因水膜形成产生毛细力, 使拉脱力较干燥环境(30% RH)提高30%~50%, 且Ca/Si比越高, 亲水性越强, 黏附力增幅越明显. 此外, AFM还为关联纳观力与宏观性能提供了桥梁. 例如, 有研究表明[122]碳纳米管(carbon nanotubes, CNTs)通过提高C-S-H颗粒间的黏附力, 增强浆体的弹性模量与抗蠕变性能; 而C-S-H的表面能在Ca/Si = 1.1时达0.28 J/m^2, 与分子动力学模拟结果一致, 解释了该配比下水泥强度最优的现象. 尽管AFM存在局限, 如探针几何形状需校准、实验条件(如真空)与实际工况存在差异等, 但其在揭示水泥基材料纳观作用机制(如离子吸附、界面黏结)中的不可替代性已得到验证. 未来通过结合环境控制舱实现原位湿度/温度调控, 有望进一步拓展其在动态水化、碳化过程研究中的应用.

冷冻扫描电镜(Cryo-scanning electron microscopy, Cryo-SEM)推动了水泥基领域先进表征的进步, 其核心原理可通俗理解为"冷冻保鲜+精细切割": 先通过液氮将样品冷却至−140℃, 固定样品中的结构水以维持其原生状态; 再利用加速电压的准直氩离子束, 以掠射角轰击样品表面, 制备出毫米级平整观测面; 最后采用超高分辨率SEM, 结合透镜内探测器的二次电子或BSE模式完成成像. 其缺陷在于室温氩离子束切割则可能因产热破坏C-S-H等含水相结构[123]. 国内外学者依据Viguier等人[124]和Park等人[125]的温度计算确定−140℃冷冻以防C-S-H脱水相变, 通过模拟电子束穿透深度选择0.3~4.0 kV低加速电压实现0.9 nm/像素分辨率, 采用Phansalkar自适应局部阈值算法处理低对比度图像, 实现5 nm级孔隙定量分析[126]. Cryo-SEM在水泥基材料表征中展现出显著优势: 其一, −140℃冷冻可固定水泥材料结构水, 避免室温BIB中常见的C-S-H针状结构弯曲或孔隙变形, 保障微观形貌的原生性; 其二, 离子束制备的观测面无机械抛光缺陷, 能清晰区分不同组分材料, 突破传统限制. 值得注意的是, AFM与Cryo-SEM在跨尺度表征中形成了鲜明的互补性. AFM聚焦纳观尺度的力学参数与表面能量化, 精准揭示分子间相互作用与微观异质性; 而Cryo-SEM则擅长微纳尺度下原生形貌与孔隙结构的高保真表征, 清晰呈现材料内部的空间分布特征. 二者的联合应用可实现跨尺度关联, 例如, 通过AFM获取C-S-H的黏附力与表面能数据, 结合Cryo-SEM观测到的微观孔隙与相分布, 为解析水泥基材料强度形成机制提供更全面的实验支撑. 此外, AFM的真空操作局限可通过Cryo-SEM的原位冷冻策略部分弥补, 而Cryo-SEM在参数量化上的不足则能借助AFM得以完善, 二者协同提升了跨尺度信息获取的完整性与准确性.

此外, 同步辐射多尺度成像[127]、细观多场耦合加载测试[128,129]以及基于机器学习[130]的智能数据分析等创新手段的运用, 为解析水泥基材料纳-微-细观结构形成机制、多相界面交互作用及复杂环境劣化过程提供了全新视角. 同步辐射多尺度成像与细观多场耦合加载测试用于增强原位等效性与时变追踪能力; 扫描电化学显微镜(scanning electrochemical microscope,

SECM)与孔隙网络模型在X-CT/μCT的基础上, 将几何连通映射为有效扩散、渗透与电导等功能化传输参数, 实现几何到功能的可验证桥接[131]; 基于机器学习的方法可用于区分骨料、裂缝与ITZs各项特征, 并构建卷积神经网络-长短期记忆等模型以关联结构与性能, 同时可通过交叉验证与不确定性区间评估提升模型可靠性. 此外, 数字图像处理技术还可提供粒径分布、孔隙度、ITZs厚度等标准化几何特征, 为传输与力学模型提供输入支持[132,133]; X-CT与纳米压痕技术联用[134,135], 将纳米尺度的模量与三维微结构精确配对, 构建从细观本构到构件响应的多尺度传递链, 并以构件级力学和耐久指标进行回归与校核. 因此, 在水泥基材料细观领域逐渐形成以“问题、手段、指标、验证”的闭环框架, 从而实现研究由结构描绘向可量化、可验证的性能调控的转变.

相比之下, 数值方法在高精度三维重构以及时空动态演化方面具有优势, 实验手段在信息获取的全面性和量化能力上仍显不足, 尤其在动态过程捕获与内部场定量描述方面存在局限. 因此, 将多尺度试验表征与数值模拟相结合, 已成为验证计算模型可靠性、弥补纯数值方法跨尺度建模能力不足的有效途径. 创新表征技术与数值方法的融合可形成完整闭环: 通过AFM, Cryo-BIB-SEM, X-CT/μCT等技术采集多尺度实验数据, 经数字图像处理与机器学习优化提取特征并转化为量化参数, 据此构建层级化数值模型, 经实验校准与交叉验证后, 预测材料宏观性能并通过宏观试验验证. 这种“实验-模拟”融合的研究策略, 不仅有助于实现从纳观到宏观的结构信息融合, 也为混凝土材料的数字化设计与性能预测提供了更为坚实的理论基础.

6 展望: 基于机器学习的混凝土多尺度数字孪生

当前, 混凝土多尺度研究尚未充分转化为材料研发的实际推动力, 也未能有效支撑工程应用, 其核心瓶颈在于多尺度关联机制的缺失. 纳观、微观与细观尺度之间存在明显的理论断层, 导致跨尺度结构演变信息难以有效映射至宏观性能响应. 随着数字技术的持续革新, 混凝土研究正步入以多尺度数字孪生为代表的新范式. 数字孪生通过构建与物理实体高度协同的虚拟模型, 实现从纳观到宏观的全链条数字化映射与动态推演, 为混凝土材料的智能设计与长效服役性能预测提供全新路径.

本文作者在该方向开展了初步探索[136], 在纳观层面, 结合分子动力学与密度泛函理论模拟手段, 可精准解析C-S-H凝胶等关键水化产物的分子构型与性能间关联, 建立诸如钙硅比等纳观特征符, 为数字孪生提供原子尺度下的结构-性能基础数据库. 在微观尺度, 依托水化微结构数值模型与基于深度学习的图像识别技术, 实现了水化过程动态重构与微结构特征的智能提取, 形成包括孔隙分布、相组成等在内的微观特征符, 初步建立了配比-结构-性能的定量映射关系. 在细观尺度, 通过离散元方法构建了具有真实几何形态的骨料模型及界面过渡区非均匀场, 揭示多场耦合环境下细观结构的演化机制, 并提取骨料形态、界面厚度等细观特征符. 在此基础上, 进一步构建强度、耐久性等宏观特征符, 形成“纳-微-细-宏”多尺度特征符体系. 通过建立混凝土多尺度数据库, 并基于机器学习方法量化各尺度关键特征符之间的关联权重, 系统挖掘跨尺度关键参数及其传递规律, 如图10所示. 最终构建

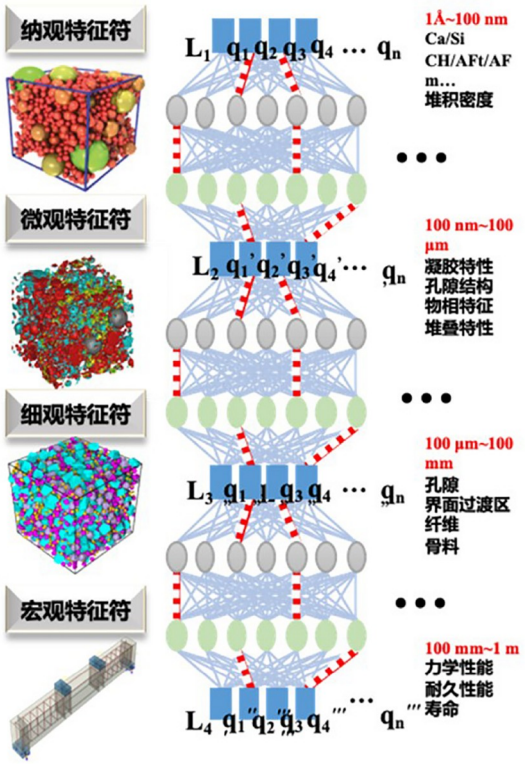


图 10 跨尺度性能集成预测示意图

Figure 10 Schematic diagram of cross-scale performance integration prediction.

从化学组分、微结构特征到宏观性能的跨尺度预测模型, 实现从分子层级到工程尺度的性能集成预测, 为混凝土材料的科学设计与智能研发提供核心方法支撑.

7 结语

本文系统综述了混凝土在纳观、微观与细观尺度上的数字化重构方法研究进展, 在纳观尺度, 通过原位TEM, DFT与MD模拟等手段, 揭示了水泥水化产物的形成机制与分子构型, 实现了对其力学和传输性能的精准量化; 在微观尺度, 依托水化微结构数值模型与深度学习方法, 实现了水化过程的动态重构与微结构特征的智能识别, 建立了结构-性能之间的关联机制; 在细观尺度, 重点探讨了骨料分布、界面过渡区及纤维掺入等对材料宏观性能的影响规律, 揭示了多相复合体系中的结构效应. 然而, 当前研究仍存在明显局限: 多尺度之间的关联机制尚未建立, 导致从纳观、微观到细观的结构信息难以有效映射至宏观性能, 制约了混凝土材料研发的工程转化与应用效能. 未来可引入人工智能与大数据技术, 深度融合多尺度结构数据, 构建混凝土数字孪生系统, 从而为实现材料设计与性能预测的全链条数字化提供核心方法支撑.

参考文献

1 Xu W, Shu K, Fan D, et al. Self-sensing enhancement in smart ultra-high performance concrete composites via multi-scale carbon black: Insights from micro to macro characteristics. Compos Part B-Eng, 2025, 304: 112645

2 Aretxabaleta X M, López-Zorrilla J, Etxebarria I, et al. Multi-step nucleation pathway of C-S-H during cement hydration from atomistic simulations. Nat Commun, 2023, 14: 7979

3 Hou D, Li H, Zhang L, et al. Nano-scale mechanical properties investigation of C-S-H from hydrated tri-calcium silicate by nano-indentation and molecular dynamics simulation. Construction Building Mater, 2018, 189: 265–275

4 Wang J, Wang X, Ding S, et al. Micro-nano scale pore structure and fractal dimension of ultra-high performance cementitious composites modified with nanofillers. Cement Concrete Compos, 2023, 141: 105129

5 Dong W, Wang J. Degradation mechanism and strength prediction of aeolian sand concrete under sulphate dry-wet cycles. Construction Building Mater, 2024, 450: 138617

6 Zhou G, Xu Z. 3D mesoscale investigation on the compressive fracture of concrete with different aggregate shapes and interface transition zones. Construction Building Mater, 2023, 393: 132111

7 Bai F, Li Y, Liu L, et al. An efficient and high-volume fraction 3D mesoscale modeling framework for concrete and cementitious composite materials. Composite Struct, 2023, 325: 117576

8 Wang K, Cheng Y, Yang L, et al. Effects and interactions of scouring abrasion and external sulfate attack on deterioration of lining concrete: Experiments and preliminary modeling. Construction Building Mater, 2023, 393: 132077

9 Zhang M, Cui J, Liu K, et al. Study on the durability deterioration law of marine concrete with nano-particles under the coupled effects of freeze-thaw cycles, flexural fatigue load and Cl^- erosion. J Building Eng, 2024, 87: 109039

10 Ye Y, Xie T, Guo T, et al. Durability of basalt fiber-reinforced aeolian sand concrete in extreme environments: Resistance to wind-sand erosion and salt freeze-thaw cycles. Construction Building Mater, 2024, 457: 139264

11 McDowall A W, Chang J-J, Freeman R, et al. Electron microscopy of frozen hydrated sections of vitreous ice and vitrified biological samples. J Microsc, 1983, 131: 1–9

12 Zhang Z, Scherer G W, Bauer A. Morphology of cementitious material during early hydration. Cement Concrete Res, 2018, 107: 85–100

13 Zheng Q, Jiang J, Li X, et al. *In situ* TEM observation of calcium silicate hydrate nanostructure at high temperatures. Cement Concrete Res, 2021, 149: 106579

14 Zheng Q, Liang C, Jiang J, et al. Carbonation dynamics of hydrated alite revealed by electron microscopy. Chem Eng J, 2023, 469: 143720

15 Zheng Q, Liang C, Jiang J, et al. Alite hydration at the single grain level. Cement Concrete Compos, 2023, 144: 105297

16 Gauvin R, Demers H, Brodusch N. Dark-field imaging with electron backscatter diffraction patterns. In: Proceedings of European Microscopy Congress 2016: Proceedings. Hoboken: John Wiley & Sons, Ltd., 2016. 519–520

17 Richardson I G. The calcium silicate hydrates. Cement Concrete Res, 2008, 38: 137–158

18 Dolado J S, Griebel M, Hamaekers J. A molecular dynamic study of cementitious calcium silicate hydrate (C-S-H) gels. J Am Ceramic Soc, 2007, 90: 3938–3942

19 Hou D, Zhao T, Ma H, et al. Reactive molecular simulation on water confined in the nanopores of the calcium silicate hydrate gel: Structure, reactivity, and mechanical properties. J Phys Chem C, 2015, 119: 1346–1358

20 Abdolhosseini Qomi M J, Krakowiak K J, Bauchy M, et al. Combinatorial molecular optimization of cement hydrates. Nat Commun, 2014, 5: 4960

21 Pellenq R J M, Kushima A, Shahsavari R, et al. A realistic molecular model of cement hydrates. Proc Natl Acad Sci USA, 2009, 106: 16102–16107

22 Zhang Y, Li T, Hou D, et al. Insights on magnesium and sulfate ions' adsorption on the surface of sodium alumino-silicate hydrate (NASH) gel: A molecular dynamics study. Phys Chem Chem Phys, 2018, 20: 18297–18310

23 Yang J, Hou D, Ding Q. Structure, dynamics, and mechanical properties of cross-linked calcium aluminosilicate hydrate: A molecular dynamics study. ACS Sustain Chem Eng, 2018, 6: 9403–9417

24 Luo Q, Xiang Y, Yang Q, et al. Molecular simulation of calcium-silicate-hydrate and its applications: A comprehensive review. Construction Building Mater, 2023, 409: 134137

25 Manzano H, Dolado J S, Guerrero A, et al. Mechanical properties of crystalline calcium-silicate-hydrates: Comparison with cementitious C-S-H gels. Physica Status Solidi (a), 2010, 204: 1775–1780

26 Zhang Y, Wu J, Wang L, et al. Atomic-level structure evolution of calcium silicate hydrate nucleation process, the amorphous-to-crystalline pathway. J Am Ceram Soc, 2024, 107: 5022–5035

27 Tarighat A, Tavakoli D. Estimation of the elastic properties of important calcium silicate hydrates in nano scale—A molecular dynamics approach. J Rehabil Civ Eng, 2019, 7: 18–36

28 Hajilar S, Shafei B. Nano-scale investigation of elastic properties of hydrated cement paste constituents using molecular dynamics simulations. Comput Mater Sci, 2015, 101: 216–226

29 Zhang Y, Zhou Q, Ju J W, et al. New insights into the mechanism governing the elasticity of calcium silicate hydrate gels exposed to high temperature: A molecular dynamics study. Cement Concrete Res, 2021, 141: 106333

30 Honorio T. Monte Carlo molecular modeling of temperature and pressure effects on the interactions between crystalline calcium silicate hydrate layers. Langmuir, 2019, 35: 3907–3916

31 Bauchy M, Laubie H, Abdolhosseini Qomi M J, et al. Fracture toughness of calcium-silicate-hydrate from molecular dynamics simulations. J Non-Crystalline Solids, 2015, 419: 58–64

32 Zhou Y, Hou D, Geng G, et al. Insights into the interfacial strengthening mechanisms of calcium-silicate-hydrate/polymer nanocomposites. Phys Chem Chem Phys, 2018, 20: 8247–8266

33 Hou D, Yu J, Wang P. Molecular dynamics modeling of the structure, dynamics, energetics and mechanical properties of cement-polymer nanocomposite. Compos Part B-Eng, 2019, 162: 433–444

34 Wan H, Zhang Y. Interfacial bonding between graphene oxide and calcium silicate hydrate gel of ultra-high performance concrete. Mater Struct, 2020, 53: 34

35 Zheng Q, Jiang J, Chen C, et al. Nanoengineering microstructure of hybrid C-S-H/silicene gel. ACS Appl Mater Interfaces, 2020, 12: 17806–17814

36 Zhang Y, Yang T, Jia Y, et al. Molecular dynamics study on the weakening effect of moisture content on graphene oxide reinforced cement composite. Chem Phys Lett, 2018, 708: 177–182

37 Wang F, Zhang Y, Jiang J, et al. Effect of temperature on the capillary transport of sodium sulfate solution in calcium silicate hydrate nanopore: A molecular dynamics study. Construction Building Mater, 2020, 231: 117111

38 Zhou Y, Hou D, Jiang J, et al. Experimental and molecular dynamics studies on the transport and adsorption of chloride ions in the nano-pores of calcium silicate phase: The influence of calcium to silicate ratios. Microporous Mesoporous Mater, 2018, 255: 23–35

39 Yang J, Hou D, Ding Q. Ionic hydration structure, dynamics and adsorption mechanism of sulfate and sodium ions in the surface of calcium silicate hydrate gel: A molecular dynamics study. Appl Surf Sci, 2018, 448: 559–570

40 Romero-Vargas Castrillón S, Giovambattista N, Aksay I A, et al. Effect of surface polarity on the structure and dynamics of water in nanoscale confinement. J Phys Chem B, 2009, 113: 1438–1446

41 Roussel N, Geiker M R, Dufour F, et al. Computational modeling of concrete flow: General overview. Cement Concrete Res, 2007, 37: 1298–1307

42 Pommersheim J M, Clifton J R. Mathematical modeling of tricalcium silicate hydration. II. Hydration sub-models and the effect of model parameters. Cement Concrete Res, 1982, 12: 765–772

43 Dolado J S, van Breugel K. Recent advances in modeling for cementitious materials. Cement Concrete Res, 2011, 41: 711–726

44 van Breugel K. Numerical simulation of hydration and microstructural development in hardening cement-based materials (I) theory. Cement Concrete Res, 1995, 25: 319–331

45 van Breugel K. Numerical simulation of hydration and microstructural development in hardening cement-based materials. Cement Concrete Res, 1995, 25: 522–530

46 Ye G, van Breugel K, Fraaij A L A. Three-dimensional microstructure analysis of numerically simulated cementitious materials. Cement Concrete Res, 2003, 33: 215–222

47 Bishnoi S, Scrivener K L. µic: A new platform for modelling the hydration of cements. Cement Concrete Res, 2009, 39: 266–274

48 Bishnoi S, Scrivener K L. Studying nucleation and growth kinetics of alite hydration using µic. Cement Concrete Res, 2009, 39: 849–860

49 Bentz D P. Capillary porosity depercolation/repercolation in hydrating cement pastes via low-temperature calorimetry measurements and CEMHYD3D modeling. J Am Ceramic Soc, 2006, 89: 2606–2611

50 Bentz D P. Modeling the influence of limestone filler on cement hydration using CEMHYD3D. Cement Concrete Compos, 2006, 28: 124–129

51 Bentz D P. Three-dimensional computer simulation of portland cement hydration and microstructure development. J Am Ceramic Soc, 2008, 80: 3–21

52 Feng P, Miao C, Bullard J W. A model of phase stability, microstructure and properties during leaching of portland cement binders. Cement Concrete Compos, 2014, 49: 9–19

53 Bullard J W, Lothenbach B, Stutzman P E, et al. Coupling thermodynamics and digital image models to simulate hydration and microstructure development of portland cement pastes. J Mater Res, 2011, 26: 609–622

54 Koenders E A B, van Breugel K. Numerical modelling of autogenous shrinkage of hardening cement paste. Cement Concrete Res, 1997, 27: 1489–1499

55 Wu D L, Wang P M. Research on computer simulation of cement hydration—CEMHYD3D system analysis and practical simulation (in Chinese). Mater Rep, 2007: 100–103 [吴丹琳, 王培铭. 水泥水化过程计算机模拟研究——CEMHYD3D系统分析与模拟实现. 材料导报, 2007: 100–103]

56 Bullard J W, Enjolras E, George W L, et al. A parallel reaction-transport model applied to cement hydration and microstructure development. Model Simul Mater Sci Eng, 2010, 18: 025007

57 Wu D J, She W, Miu C W, et al. Simulation of cement hydration microstructure evolution process based on improved CEMHYD3D model (in Chinese). J Build Mater, 2020, 23: 11–17 [吴大江, 佘伟, 缪昌文, 等. 基于改进的CEMHYD3D模型模拟水泥水化微结构演变过程. 建筑材料学报, 2020, 23: 11–17]

58 Liu C, Huang R, Zhang Y, et al. Modelling of irregular-shaped cement particles and microstructural development of Portland cement. Construction Building Mater, 2018, 168: 362–378

59 Chen W, Brouwers H J H, Shui Z H. Three-dimensional computer modeling of slag cement hydration. J Mater Sci, 2007, 42: 9595–9610

60 Wang X Y, Lee H S. Modeling the hydration of concrete incorporating fly ash or slag. Cement Concrete Res, 2010, 40: 984–996

61 Wang X Y, Cho H K, Lee H S. Prediction of temperature distribution in concrete incorporating fly ash or slag using a hydration model. Compos Part B-Eng, 2011, 42: 27–40

62 Liu C, Wang F, Zhang M. Modelling of 3D microstructure and effective diffusivity of fly ash blended cement paste. Cement Concrete Compos, 2020, 110: 103586

63 Liu L, Tao G, Chen H, et al. Shape effect of cement particles on the ionic diffusivity of hardened cement paste—A three-dimensional numerical investigation. Construction Building Mater, 2020, 250: 118736

64 Liu C, Qian C, Qian R, et al. Numerical prediction of effective diffusivity in hardened cement paste between aggregates using different shapes of cement powder. Construction Building Mater, 2019, 223: 806–816

65 Jiang J, Liu Y, Lin J, et al. Machine learning assisted design of low-carbon aluminosilicate cementitious composites with diverse raw materials and target mechanical strength. Case Studies Construction Mater, 2025, 22: e04664

66 Jin Z Q, Sun W, Hou B R, et al. Deformation and microstructure evolution of concrete subjected to elevated temperature (in Chinese). J Southeast Univ, 2010, 40: 619–623 [金祖权, 孙伟, 侯保荣, 等. 混凝土的高温变形与微结构演化. 东南大学学报（自然科学版）, 2010, 40: 619–623]
67 Jiang J Y, Wu H T, Wang F J, et al. Cross-dimensional reconstruction of microstructures and transport properties characterization of porous materials via deep convolutional generative adversarial network (in Chinese). Eng Mech, 2025, 42: 34–46 [蒋金洋, 吴浩天, 王凤娟, 等. 基于深度卷积生成对抗网络的多孔材料微结构跨维度重构及传输性能表征. 工程力学, 2025, 42: 34–46]
68 Yao X, Fang H, Du M, et al. Evolution of the microporous structure in cement hydration: A deep learning-based image translation method. J Building Eng, 2024, 94: 110065
69 Sui H, Wang W, Lin J, et al. Spatial correlation and pore morphology analysis of limestone calcined clay cement (LC3) via machine learning and image-based characterisation. Construction Building Mater, 2023, 401: 132721
70 Lin J, Liu Y, Sui H, et al. Microstructure of graphene oxide-silica-reinforced OPC composites: Image-based characterization and nano-identification through deep learning. Cement Concrete Res, 2022, 154: 106737
71 Chen Z, Lin J, Sagoe-Crentsil K, et al. Development of hybrid machine learning-based carbonation models with weighting function. Construction Building Mater, 2022, 321: 126359
72 Miao Y, Yu W, Jin L, et al. Effect of shrinkage-induced initial damage on the frost resistance of concrete in cold regions. Eng Fract Mech, 2024, 312: 110652
73 Lin J, Chen S, Wang W, et al. Transregional spatial correlation revealed by deep learning and implications for material characterisation and reconstruction. Mater Charact, 2021, 178: 111268
74 Thilakarathna P S M, Kristombu Baduge K S, Mendis P, et al. Mesoscale modelling of concrete—A review of geometry generation, placing algorithms, constitutive relations and applications. Eng Fract Mech, 2020, 231: 106974
75 Yang Z J, Li B B, Wu J Y. X-ray computed tomography images based phase-field modeling of mesoscopic failure in concrete. Eng Fract Mech, 2019, 208: 151–170
76 Zhang L, Xie H, Feng J. Mesoscale modeling and failure mechanism of concrete considering pore structures and actual aggregate shapes. Construction Building Mater, 2022, 353: 129133
77 Wittmann F H, Roelfstra P E, Sadouki H. Simulation and analysis of composite structures. Mater Sci Eng, 1985, 68: 239–248
78 Shahbeyk S, Hosseini M, Yaghoobi M. Mesoscale finite element prediction of concrete failure. Comput Mater Sci, 2011, 50: 1973–1990
79 Wriggers P, Moftah S O. Mesoscale models for concrete: Homogenisation and damage behaviour. Finite Elem Anal Des, 2006, 42: 623–636
80 Xu W, Chen H. Mesostructural characterization of particulate composites via a contact detection algorithm of ellipsoidal particles. Powder Tech, 2012, 221: 296–305
81 Xu W, Chen H, Liu L. Evaluation of mesostructure of particulate composites by quantitative stereology and random sequential packing model of mono-/polydisperse convex polyhedral particles. Ind Eng Chem Res, 2013, 52: 6678–6693
82 Liu L, Shen D, Chen H, et al. Aggregate shape effect on the diffusivity of mortar: A 3D numerical investigation by random packing models of ellipsoidal particles and of convex polyhedral particles. Comput Struct, 2014, 144: 40–51
83 Naderi S, Tu W, Zhang M. Meso-scale modelling of compressive fracture in concrete with irregularly shaped aggregates. Cement Concrete Res, 2021, 140: 106317
84 Ma H, Xu W, Li Y. Random aggregate model for mesoscopic structures and mechanical analysis of fully-graded concrete. Comput Struct, 2016, 177: 103–113
85 Ma H, Song L, Xu W. A novel numerical scheme for random parameterized convex aggregate models with a high-volume fraction of aggregates in concrete-like granular materials. Comput Struct, 2018, 209: 57–64
86 Garboczi E J, Bullard J W. Contact function, uniform-thickness shell volume, and convexity measure for 3D star-shaped random particles. Powder Tech, 2013, 237: 191–201
87 Zhu Z, Chen H, Xu W, et al. Parking simulation of three-dimensional multi-sized star-shaped particles. Model Simul Mater Sci Eng, 2014, 22: 035008
88 Xu W, Jia M, Guo W, et al. GPU-based discrete element model of realistic non-convex aggregates: Mesoscopic insights into ITZ volume fraction and diffusivity of concrete. Cement Concrete Res, 2023, 164: 107048
89 Wang Z M, Kwan A K H, Chan H C. Mesoscopic study of concrete I: Generation of random aggregate structure and finite element mesh. Comput Struct, 1999, 70: 533–544

90 Leite J P B, Slowik V, Mihashi H. Computer simulation of fracture processes of concrete using mesolevel models of lattice structures. Cement Concrete Res, 2004, 34: 1025–1033

91 Zhou R, Song Z, Lu Y. 3D mesoscale finite element modelling of concrete. Comput Struct, 2017, 192: 96–113

92 Zhang J, Wang Z, Yang H, et al. 3D meso-scale modeling of reinforcement concrete with high volume fraction of randomly distributed aggregates. Construction Building Mater, 2018, 164: 350–361

93 Pieralisi R, Cavalaro S H P, Aguado A. Discrete element modelling of the fresh state behavior of pervious concrete. Cement Concrete Res, 2016, 90: 6–18

94 Pieralisi R, Cavalaro S H P, Aguado A. Advanced numerical assessment of the permeability of pervious concrete. Cement Concrete Res, 2017, 102: 149–160

95 Gong Z, Wu Y, Zhu Z, et al. DEM and dual-probability-Brownian motion scheme for thermal conductivity of multiphase granular materials with densely packed non-spherical particles and soft interphase networks. Comput Methods Appl Mech Eng, 2020, 372: 113372

96 Chen H S, Sun W, Stroeven Piet. Interfacial transition zone between aggregate and paste in cementitious composites (II): Mechanism of formation and degradation of interfacial transition zone microstructure, and its influence factors (in Chinese). Chin Ceram Soc, 2004, 1: 70–79 [陈惠苏, 孙伟, Stroeven Piet. 水泥基复合材料集料与浆体界面研究综述(二): 界面微观结构的形成、劣化机理及其影响因素. 硅酸盐学报, 2004, 1: 70–79]

97 Patel R A, Phung Q T, Seetharam S C, et al. Diffusivity of saturated ordinary Portland cement-based materials: A critical review of experimental and analytical modelling approaches. Cement Concrete Res, 2016, 90: 52–72

98 Gao Y, De Schutter G, Ye G, et al. Characterization of ITZ in ternary blended cementitious composites: Experiment and simulation. Construction Building Mater, 2013, 41: 742–750

99 Lu Y, Islam M A, Thomas S, et al. Three-dimensional mortar models using real-shaped sand particles and uniform thickness interfacial transition zones: Artifacts seen in 2D slices. Construction Building Mater, 2020, 236: 117590

100 Lu B, Torquato S. Nearest-surface distribution functions for polydispersed particle systems. Phys Rev A, 1992, 45: 5530

101 Garboczi E J, Bentz D P. Analytical formulas for interfacial transition zone properties. Adv Cement Based Mater, 1997, 6: 99–108

102 Torquato S. Bulk properties of two-phase disordered media. I. Cluster expansion for the effective dielectric constant of dispersions of penetrable spheres. J Chem Phys, 1984, 81: 5079–5088

103 Zheng J J, Guo Z Q, Pan X D, et al. ITZ volume fraction in concrete with spheroidal aggregate particles and application: Part I. Numerical algorithm. Mag Concrete Res, 2011, 63: 473–482

104 Xu W X, Chen H S. Analytical and modeling investigations of volume fraction of interfacial layers around ellipsoidal aggregate particles in multiphase materials. Model Simul Mater Sci Eng, 2013, 21: 015005

105 Xu W, Chen H, Chen W, et al. Theoretical estimation for the volume fraction of interfacial layers around convex particles in multiphase materials. Powder Tech, 2013, 249: 513–515

106 Xu W, Chen W, Chen H. Modeling of soft interfacial volume fraction in composite materials with complex convex particles. J Chem Phys, 2014, 140: 34704

107 Xu W, Wang H, Niu Y, et al. Insight into interfacial effect on effective physical properties of fibrous materials. I. The volume fraction of soft interfaces around anisotropic fibers. J Chem Phys, 2016, 144: 014703

108 Yang E H, Li V C. Strain-rate effects on the tensile behavior of strain-hardening cementitious composites. Construction Building Mater, 2014, 52: 96–104

109 Kang J, Bolander J E. Event-based lattice modeling of strain-hardening cementitious composites. Int J Fract, 2017, 206: 245–261

110 Li J, Weng J, Yang E H. Stochastic model of tensile behavior of strain-hardening cementitious composites (SHCCs). Cement Concrete Res, 2019, 124: 105856

111 Kabele P, Stemberk M. Stochastic model of multiple cracking process in fiber reinforced cementitious composites. In: Proceedings of the 11th International Conference on Fracture (ICF XI). Turin: CCI Centro Congressi Internazionale srl, 2005

112 Lu C, Leung C K Y. A new model for the cracking process and tensile ductility of strain hardening cementitious composites (SHCC). Cement Concrete Res, 2016, 79: 353–365

113 Jiang J, Luo Q, Wang F, et al. Uniaxial tensile constitutive model of fiber reinforced concrete considering bridging effect and its numerical algorithm. J Sustain Cement-Based Mater, 2023, 12: 207–217

114 Luo Q, Zhang J, Lu Z, et al. A prediction model of the tensile properties of engineered cementitious composites (ECC) based on the continuous crack tracking algorithm. J Building Eng, 2023, 79: 107903
115 Luo Q, Lu Z, Wang F, et al. Influence of flaw distribution on tensile behavior of engineered cementitious composites (ECC) based on flaw probability model. Construction Building Mater, 2023, 402: 133096
116 Huo Y, Lu D, Wang Z, et al. Bending behavior of strain hardening cementitious composites based on the combined fiber-interface constitutive model. Comput Struct, 2023, 281: 107017
117 Huo Y, Han X, Wu C, et al. Tensile behavior simulation of ECC/SHCC at subzero temperatures based on a fiber/interface combination constitutive model. Cement Concrete Compos, 2025, 158: 105969
118 Butt H J, Cappella B, Kappl M. Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications. Surf Sci Rep, 2005, 59: 1–152
119 Trtik P, Kaufmann J, Volz U. On the use of peak-force tapping atomic force microscopy for quantification of the local elastic modulus in hardened cement paste. Cement Concrete Res, 2012, 42: 215–221
120 Zheng Q, Jiang J, Xu G, et al. New insights into the role of portlandite in the cement system: Elastic anisotropy, thermal stability, and structural compatibility with C-S-H. Cryst Growth Des, 2020, 20: 2477–2488
121 Lomboy G, Sundararajan S, Wang K, et al. A test method for determining adhesion forces and Hamaker constants of cementitious materials using atomic force microscopy. Cement Concrete Res, 2011, 41: 1157–1166
122 Chen X, Park J, Ji W, et al. Unlocking the interaction mechanism of CNTs and C-S-H on enhancing elastic and viscoelastic properties of alite paste. Adv Sci, 2025, 12: e05876
123 Harper J M E, Cuomo J J. Material processing with broad-beam ion sources. Annu Rev Mater Sci, 1983, 13: 413–439
124 Viguier B, Mortensen A. Heating of TEM specimens during ion milling. Ultramicroscopy, 2001, 87: 123–133
125 Park Y M, Ko D S, Yi K W, et al. Measurement and estimation of temperature rise in TEM sample during ion milling. Ultramicroscopy, 2007, 107: 663–668
126 Kleiner F, Matthes C, Rößler C. Argon broad ion beam sectioning and high resolution scanning electron microscopy imaging of hydrated alite. Cement Concrete Res, 2021, 150: 106583
127 Bie B X. Experimental study on mechanical behavior and deformation of composites based on synchrotron radiation X-ray (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Wuhan: Wuhan University of Technology, 2022 [别必雄. 基于同步辐射的复合材料动态力学性能与损伤实验研究. 博士学位论文. 武汉: 武汉理工大学, 2022]
128 He Z, Zhai W, Shi J, et al. Characterizing the interfacial transition zone in ultra-high performance concrete: Comparison of multiple nanoscale characterization methods. Measurement, 2025, 250: 117165
129 Nuruzzaman M, Sarker P K, Shaikh F U A. The interfacial transition zone microstructure of ground ferronickel slag incorporated self-compacting concrete investigated by nanoindentation. J Building Eng, 2023, 71: 106437
130 Sathiparan N, Jeyananthan P, Subramaniam D N. A comparative study of machine learning techniques and data processing for predicting the compressive strength of pervious concrete with supplementary cementitious materials and chemical composition influence. Next Mater, 2025, 9: 100947
131 Pan H R, Chen X X, Lu X Q. Research advances of scanning electrochemical microscopy on instrumentation methods in China (in Chinese), 2025, 53: 1050–1063 [潘浩然, 陈星星, 卢小泉. 我国扫描电化学显微镜仪器技术方面的研究进展. 分析化学, 2025, 53: 1050–1063]
132 Reddy Y A K, Pallapothu S N R G, Pancharathi R K, et al. Image based analysis for optimising coarse aggregate gradation and comparison with particle packing theories. Construction Building Mater, 2025, 486: 141917
133 Yucel A O. Aggregate packing and interlock evaluation utilizing 2-dimensional synthetic asphalt concrete sections. Construction Building Mater, 2024, 416: 135222
134 Chen C, Dong B, Dai J G, et al. Microstructure and micromechanical properties of the interfacial transition zone in concrete incorporating lime mud-based artificial aggregates. J Building Eng, 2025, 108: 112979
135 Kamboj R, Debbarma S. Nano-indentation and SEM analysis of the interfacial transition zone in RAP-concrete. Construction Building Mater, 2025, 492: 142854
136 Jiang J Y, Liu Z Y, Xu W X, et al. Multi-Performance Prediction and Intelligent Design System of Concrete (in Chinese). Nanjing: Southeast University Press, 2024 [蒋金洋, 刘志勇, 许文祥, 等. 混凝土多目标性能预测与智能设计系统. 南京: 东南大学出版社, 2024]

Digital multi-scale reconstruction of concrete's nano-micro-meso structure

JIANG JinYang[1], ZHANG Yu[2], XU WenXiang[3] & LIN JunLin[1]

[1] *School of Materials Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China*
[2] *College of Civil Engineering and Architecture, Shandong University of Science and Technology, Qingdao 266590, China*
[3] *College of Mechanics and Engineering Sciences, Hohai University, Nanjing 211100, China*

As one of the most widely used materials in the world, concrete is an important support for modern infrastructure construction. The macroscopic mechanical and durability properties of concrete are essentially derived from its internal multi-scale structural characteristics. It is a major scientific challenge and frontier research direction in this field to analyze the multi-scale structure and establish a cross-scale correlation mechanism. This paper systematically reviews the digital reconstruction methods of concrete from nano-scale, micro-scale to meso-scale, including the molecular configuration and nano-scale properties of hydrated calcium silicate gel, cement hydration process and dynamic evolution of microstructure, as well as the reconstruction technology of meso-scale aggregate distribution and interface transition zone. The applicability and limitations of existing methods at different scales are summarized, and the multi-scale digital twin of concrete integrated with artificial intelligence technology is prospected, which provides theoretical basis and method support for the design and performance optimization of concrete materials.

concrete, multi-scale, digital reconstruction, digital twinning, structural evolution

doi: 10.1360/SST-2025-0408