第 54 卷第 2 期
2026 年 2 月

硅 酸 盐 学 报
JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY

Vol. 54，No. 2
February，2026

http://jccsoc.cbpt.cnki.net

DOI：10.14062/j.issn.0454-5648.20250219

混凝土裂缝的微生物自修复与氯离子扩散不同时序耦合过程数值模拟

邹 凯，王立成

(大连理工大学海岸与海洋工程全国重点实验室，辽宁 大连 116024)

摘 要：为揭示混凝土裂缝的微生物自修复对 Cl^-扩散速度的抑制机制，提出了包含裂缝闭合和 Cl^-扩散的多时序耦合数值模拟方法。基于开裂微生物试件格构网络模型，分别建立了裂缝自修复和 Cl^-扩散数值模块，并通过裂缝宽度–物质扩散系数关系模型实现了模块间的耦合作用。通过预测宽度为 0.4 mm 砂浆裂缝的闭合时间验证了模型的可行性。数值模拟结果表明，微生物自修复可显著降低试件中裂缝的渗透性，对 Cl^-扩散速度的抑制效果沿裂缝深度呈下降趋势，试件浅层区域(0~0.5 mm)的 Cl^-扩散系数可恢复至未开裂时的量值水平；裂缝持续动态扩展会降低微生物的自修复效果，裂缝尖端 Cl^-浓度由 10 d 时的 0.0062% (质量分数)增至 73 d 的 0.1396%。

关键词：微生物自修复；氯离子扩散；裂缝；混凝土；耦合时序

中图分类号：TU528　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)02–0602–09

网络出版时间：2025–12–26



在海洋环境与盐渍土地区，Cl^-通过扩散、对流和毛细作用等多种迁移机制侵入混凝土内部，引发钢筋钝化膜破坏、电化学腐蚀及锈胀应力累积，最终导致混凝土保护层开裂和结构性能退化[1–3]。尽管电沉积技术[4]、形状记忆合金[5]、嵌入式脉管系统[6]及矿物掺和料[7]等被动防护手段可延缓 Cl^-迁移进程，但其工程适用性仍面临外部干预依赖性强、时效窗口有限等难题的挑战。

近年来兴起的微生物诱导碳酸钙沉淀(MICP)技术可通过生物矿化机制实现混凝土裂缝的自主修复。已有试验证实，21 d 内 MICP 技术可实现宽度为 0.97 mm 裂缝的完全闭合[8]。尽管已有研究在室内静态条件下验证了 MICP 技术对裂缝闭合与力学性能恢复的效果[8–11]，但是这些试验研究大多在恒温恒湿或完全浸水的环境中开展，难以再现海洋结构在波浪侵蚀、干湿循环和持续荷载作用下裂缝宽度的动态演变。实际上，海洋服役条件下的混凝土结构往往要经历开裂、修复功能激活和 Cl^-传输三者间的多种时序耦合过程。也就是说，在持续荷载作用下，裂缝宽度的演变会直接影响微生物成矿的动力学过程，而生成的碳酸钙沉淀又会通过改变裂缝几何形态与传输路径调控 Cl^-传输行为。另一方面，现有研究通常将 Cl^-侵蚀试验和 MICP 技术矿化过程分别独立考察，尚缺乏对微生物诱导碳酸钙沉淀在裂缝几何形态演变与物质传输特性中双向调控机理的定量分析。具体而言，混凝土裂缝自修复引发的 Cl^-扩散速度衰减具有双重效应，既抑制 Cl^-对混凝土结构的侵蚀作用，又会阻碍 MICP 所需修复组分(如尿素、钙源)的输运效率。这种多物理场的耦合特性导致常用的试验手段很难准确、有效地表征三者间的相互作用和演变历程。

针对上述难题，本工作在 Wang 等[12]提出的格构网络模型基础上，考虑以上 3 个过程的时序耦合效应，建立了开裂微生物试件中的 Cl^-扩散模型。由于粗骨料的引入会影响试件内部裂缝扩展路径和 Cl^-浓度分布[13]，但几乎不会改变微生物修复裂缝的过程和速度，为减少外部因素的影响并重点关注 MICP 技术填充修复裂缝的效果，本工作决定以混凝土基质(即砂浆)为研究对象。利用所构建的格构模型，只需增加骨料和骨料–砂浆界面单元，就可以很容易地将数值模拟方法推广至混凝土试件。

收稿日期：2025–03–27。　修订日期：2025–04–23。

基金项目：辽宁省自然科学基金(2020-MS-100)；辽宁省“兴辽英才计划”项目(XLYC2211006)。

第一作者：邹 凯(1993—)，男，博士研究生。

通信作者：王立成(1975—)，男，博士，教授。

Received date: 2025–03–27.　**Revised date:** 2025–04–23.

First author: ZOU Kai (1993–), male, Doctoral candidate.

E-mail: zoukai812@gmail.com

Correspondent author: WANG Licheng (1975–), male, Ph.D., Professor.

E-mail: wanglich@dlut.edu.cn

模型包括 2 个核心模块：1) MICP 技术修复裂缝模块，通过引入矿化反应动力学方程，定量表征尿素水解速率、裂缝宽度修复率与 Cl^-扩散系数的演化规律；2) Cl^-扩散模块，采用 Fick 第二定律描述浓度梯度驱动的 Cl^-传输行为。通过建立裂缝宽度–物质扩散系数关系模型，实现裂缝修复进程与 Cl^-扩散速度耦合效应的量化表征。利用文献[14]中的试验结果验证了数值模型的可行性和可靠性，揭示了不同耦合时序下开裂微生物试件中的 Cl^-浓度分布规律。

1　开裂微生物试件中的 Cl^-扩散模型

1.1　开裂微生物试件格构网络模型

基于 Voronoi 几何剖分算法，生成了包含砂浆单元和裂缝单元的微生物试件格构网络模型，如图 1 所示。该方法获得的单元具有网格独立性，能够准确表征材料的连续响应行为[15]。以三角形区域△*imn* 内 Cl^-扩散过程为例，可采用长度为 *L*、横截面积为 *A* 以及扩散系数为 D_m 的格构单元 *ij* 进行等效模拟，实现二维传输问题的一维简化表征。

裂缝单元位于相邻 Voronoi 单元的公共边界，可通过受力分析或试验观察确定其位置[12]。给出的平直裂缝位于储存有尿素的胶囊左侧，目的是与文献[14]中的裂缝设置保持一致。在 MICP 自修复过程中，依据裂缝宽度的修复率，动态调整裂缝单元的横截面积和扩散系数，具体方法见 1.3 节。

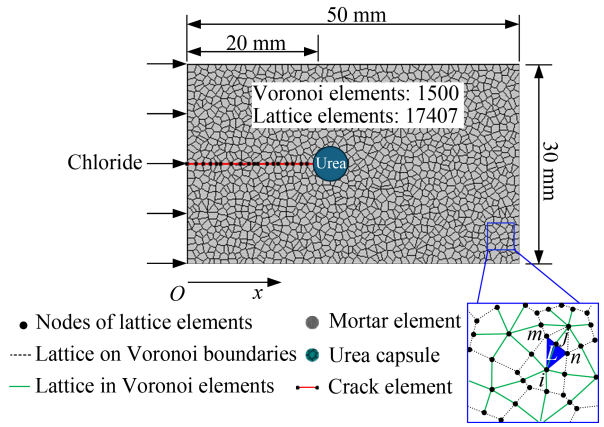


图 1　带平直裂缝的微生物试件数值模型

Fig. 1　Numerical model of microbial sample with a fixed parallel-wall crack

1.2　裂缝中的物质扩散系数

裂缝宽度的演化会直接影响其内部的物质传输效率[16]，为量化裂缝修复对 Cl^-扩散速度的影响，需建立裂缝宽度 *b* 与裂缝内物质扩散系数 D_{cr} 的关系模型。鉴于尿素(25 ℃时的扩散系数为 120.96 mm^2/d[17])与 Cl^-(在水中的扩散系数约 103.68 mm^2/d[18])的扩散速度相近，本工作统一采用 Djerbi 等[18]提出的裂缝中物质(离子)扩散系数与裂缝宽度关系的经验公式。

$$D_{cr}(\mathrm{mm^2/d}) = \begin{cases} 1728\times b - 34.56 & (0.03\ \mathrm{mm} \leqslant b \leqslant 0.08\ \mathrm{mm}) \\ 103.68 & (0.08\ \mathrm{mm} \leqslant b) \end{cases} \quad (1)$$

式中：D_{cr}为尿素或Cl^-在裂缝中的扩散系数(mm^2/d)；*b* 为裂缝宽度(mm)。对于修复后宽度小于 0.03 mm 的裂缝，假定此类裂缝中的物质扩散系数等于试件基体的扩散系数，研究表明，此时裂缝的存在不会显著提高物质传输系数[18]。

显然，微生物混凝土或砂浆中裂缝宽度 *b* 是随时间动态变化的，外部荷载或环境作用会造成裂缝宽度增大，而随着微生物的自修复又会减小。裂缝宽度的这一时变特性将在后续数值计算中被重点考虑。

1.3　脲解型 MICP 技术成矿动力学方程

在微生物自修复体系中，脲解型微生物因其高效的脲酶催化活性而备受关注。研究表明，脲酶催化尿素水解可使碳酸钙沉淀速率较常规化学沉积提升 3 个数量级[19]。在菌液浓度为 2.3×10^8 mL^{-1}、尿素浓度为 0.666 mol/L 和 Ca^{2+}浓度为 0.250 mol/L 的条件下，脲解型微生物日均可产生 13 mg 的碳酸钙沉淀，展现出显著的裂缝修复潜力[20]。

如图 2 所示，混凝土或砂浆开裂后，裂缝内微生物的自修复进程将在水分、氧气及营养物质共同作用下被激活，产生碳酸钙($CaCO_3$)沉淀[21]。随后，脲酶通过催化尿素[$CO(NH_2)_2$]水解生成铵离子(NH_4^+)与碳酸根离子(CO_3^{2-})，该反应过程将导致局

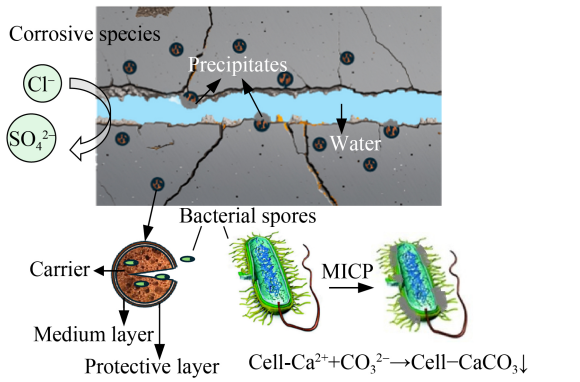


图 2　裂缝中微生物自修复行为激活并诱导生成碳酸钙沉淀示意图

Fig. 2　Schematic diagram for the activation of microbial self-healing behavior and formation of calcium carbonate

部微环境 pH 值升至 9~10，同时还会显著提升碳酸盐浓度[22]。以上考虑脲解消耗的传输过程，可通过含衰减项的 Fick 第二定律来描述。

$$\frac{\partial c_{\mathrm{ur}}}{\partial t}=D_{\mathrm{cr}}\times\nabla^2 c_{\mathrm{ur}}-\alpha\times k_1\times c_{\mathrm{ur}} \tag{2}$$

式中：c_{ur} 为尿素浓度(mol/m^3)；α 表示活化微生物的相对浓度(最大沉积深度处设为 0)；k_1 为综合考虑 pH、温度及反应底物浓度影响的脲解动力学参数(d^{-1})；t 代表传输时长。

然后，带正电的 Ca^{2+}通过静电作用吸附于带负电的菌体表面形成成核位点，与 CO_3^{2-}结合生成方解石型 $CaCO_3$ 晶体[23]。

$$\frac{\mathrm{d}c_{\mathrm{Ca}}}{\mathrm{d}t}=k_2\times c_{\mathrm{CO_3^{2-}}} \tag{3}$$

式中：c_{Ca} 为 $CaCO_3$ 的生成量(mol/L)；$c_{\mathrm{CO_3^{2-}}}$ 为 CO_3^{2-} 的浓度(mol/L)；k_2 为对应于 k_1 所在环境下的成核动力学参数(d^{-1})。

随着 $CaCO_3$ 的生成，初始裂缝宽度 b_{cr} 逐渐减小到 b，局部裂缝宽度的闭合方程可写成式(4)。

$$b=b_{\mathrm{cr}}-\frac{m}{\rho\times l\times\delta} \tag{4}$$

式中：m 为裂缝单元内 $CaCO_3$ 质量(g)；ρ=2.711×10^{-3} g/mm^3 为 $CaCO_3$ 密度；δ=1.0 mm 为模型厚度；l 为局部裂缝单元的长度(mm)。

定义无量纲参数 γ 来定量表征裂缝宽度修复率。

$$\gamma=\frac{V_{\mathrm{healed}}}{V}=\frac{c_{\mathrm{Ca}}\times M}{\rho}\times 100\% \tag{5}$$

式中：M=100.09 g/mol 是 $CaCO_3$ 的摩尔质量；V 和 V_{healed} 分别为修复前后裂缝单元体积(mm^3)。

1.4 Cl^-扩散方程

在水饱和环境中，Cl^-主要以扩散形式侵入混凝土或砂浆内部，该过程可利用 Fick 第二定律描述。

$$\frac{\partial c_{\mathrm{Cl^-}}}{\partial t}=D\times\nabla^2 c_{\mathrm{Cl^-}} \tag{6}$$

式中：$c_{\mathrm{Cl^-}}$ 为 Cl^-浓度(mol/m^3)，取值为相对试件质量分数；D 为试件基体或裂缝内物质扩散系数。当缺少实测数据时，砂浆单元扩散系数 D_{m} 可根据水灰比(w/c)按文献[24]方法计算(例如 w/c=0.6 时，D_{m}=0.97 mm^2/d)，裂缝扩散系数 D_{cr} 由式(1)确定。

1.5 控制方程的空间离散和时域离散方法

采用 Galerkin 方法，并引入型函数 N_i(i=1, 2, 3, ⋯, n)，将式(2)和式(6)弱化为式(7)

$$\begin{cases}\displaystyle\int_0^L\left(N_i\times\frac{\partial c_{\mathrm{Cl^-}}}{\partial t}+D\times\frac{\partial c_{\mathrm{Cl^-}}}{\partial x}\times\frac{\partial N_i}{\partial x}\right)\times A\mathrm{d}x=0\\ \displaystyle\int_0^L\left(N_i\times\frac{\partial c_{\mathrm{ur}}}{\partial t}+D_{\mathrm{cr}}\times\frac{\partial c_{\mathrm{ur}}}{\partial x}\times\frac{\partial N_i}{\partial x}+\alpha\times k_1\times N_i\times c_{\mathrm{ur}}\right)\times\\ A\mathrm{d}x=0\end{cases} \tag{7}$$

式中：x 表示格构单元内部的空间坐标。当使用线性形状函数 $N_1(x)$=1–x/L 和 $N_2(x)$=x/L，得到空间离散后的矩阵形式。

$$\begin{cases}\boldsymbol{M}\times\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{c}_{\mathrm{Cl^-}}}{\mathrm{d}t}+D\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{diff}}\boldsymbol{c}_{\mathrm{Cl^-}}=\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{M}\times\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{c}_{\mathrm{ur}}}{\mathrm{d}t}+(D_{\mathrm{cr}}\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{diff}}+\boldsymbol{K}_{\mathrm{decay}})\times\boldsymbol{c}_{\mathrm{ur}}=\boldsymbol{0}\end{cases} \tag{8}$$

式中：$\boldsymbol{M}=\dfrac{1}{\omega}\times\dfrac{A\times L}{6}\times\begin{bmatrix}2&1\\1&2\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{K}_{\mathrm{diff}}=\dfrac{A}{L}\times\begin{bmatrix}1&-1\\-1&1\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{K}_{\mathrm{decay}}=\dfrac{\alpha\times k_1\times A\times L}{6}\times\begin{bmatrix}2&1\\1&2\end{bmatrix}$；$\boldsymbol{c}_{\mathrm{ur}}$ 和 $\boldsymbol{c}_{\mathrm{Cl^-}}$ 为节点浓度列向量；ω 为体积校正因子(取值为 2.0)，用于将 Voronoi 单元体积等效为格构单元体积[24]。

采用 Crank-Nicolson 有限差分法对式(8)进行时域离散，可得到迭代方程[式(9)]。

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\Delta t}{2}\times D\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{diff}}+\boldsymbol{M}\right)\times\boldsymbol{c}_{\mathrm{Cl^-}}^{n+1}=\\ \left(-\dfrac{\Delta t}{2}\times D\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{diff}}+\boldsymbol{M}\right)\times\boldsymbol{c}_{\mathrm{Cl^-}}^{n}\\ \left(\dfrac{\Delta t}{2}\times D_{\mathrm{cr}}\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{diff}}+\dfrac{\Delta t}{2}\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{decay}}+\boldsymbol{M}\right)\times\boldsymbol{c}_{\mathrm{ur}}^{n+1}=\\ \left[-\left(\dfrac{\Delta t}{2}\times D_{\mathrm{cr}}\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{diff}}+\dfrac{\Delta t}{2}\times\boldsymbol{K}_{\mathrm{decay}}\right)+\boldsymbol{M}\right]\times\boldsymbol{c}_{\mathrm{ur}}^{n}\end{cases} \tag{9}$$

式中：Δt 是空间步长；$\boldsymbol{c}_{\mathrm{Cl^-}}^{n}$ 和 $\boldsymbol{c}_{\mathrm{Cl^-}}^{n+1}$ 分别表示第n和第n+1 个时间步的 Cl^-浓度向量；$\boldsymbol{c}_{\mathrm{ur}}^{n}$ 和 $\boldsymbol{c}_{\mathrm{ur}}^{n+1}$ 分别表示第n和第n+1 个时间步的尿素浓度向量。

2 基于 MICP 的裂缝自修复数值模型验证

Algaifi 等[14]开展了脲解型微生物修复砂浆裂缝的试验研究，并建立了裂缝自修复过程的数值模型。试验中采用掺有 333 mol/m^3 尿素、150 mol/m^3 钙源及 1×10^7 mL^{-1} 菌液的砂浆圆柱试件(ϕ30.0 mm×50.0 mm)，通过预埋铜板形成尺寸为 20.0 mm×0.4 mm 的平行裂缝，水中养护后每 14 d 测量 1 次裂缝宽度。在数值建模中，作者假定裂缝右边界存在固定尿素源[c_{ur}(x=20, t>0)=333 mol/m^3]，其余 3 条边界为 Neumann 零通量边界。

为了验证本工作开发的裂缝自修复数值模型

的可靠性，将预测结果与 Algaifi 等[14]的试验数据及数值结果进行对比分析。依据原文描述所建立的开裂微生物试件模型如图 1 所示，模型中采用的相关参数见表 1。由于 Algaifi 等[14]未明确给出微生物矿化动力学参数(k_1、k_2)取值，通过溯源其引用的原始试验数据[25]，设定了 2 组参数组合进行试算：1) k_1=1.35 d^{-1}，k_2=1.29 d^{-1}(对应 pH=8、T=30 ℃、尿素 20 g/L)，模拟起始时间为 0 d；2) k_1=1.53 d^{-1}，k_2=1.96 d^{-1}(对应 pH=9、T=20 ℃、尿素 20 g/L)，模拟起始时间为 14 d。根据文献[26]报道的沉淀产物分布特征，矿化反应被限定在距裂缝表面 5.0 mm 范围内(即最大沉积深度)。

表 1　模型参数

Table 1　Model parameters

Symbol	k_1/d^{-1}	k_2/d^{-1}	c_{ur}/(mol·m^3)	b_{cr}/mm	l_{cr}/mm
Value 1	1.53	1.96	333	0.4	20
Value 2	1.35	1.29	333	0.4	20

k_1 is kinetic parameter of urea decomposition; k_2 is kinetic parameter of calcite precipitation; c_{ur} is concentration of urea; b_{cr} is width of parallel-walled crack; l_{cr} is length of parallel-walled crack.

图 3 给出了模型预测的裂缝宽度修复率 γ 与文献[14]中数据的对比。本工作中模型预测宽度为 0.4 mm，裂缝完全闭合的时间为 73 d (k_1=1.35 d^{-1}，k_2=1.29 d^{-1}) 或 68 d (k_1=1.53 d^{-1}，k_2=1.96 d^{-1})，与 Algaifi 试验中的观测值 70 d 基本吻合。与文献[14]中数值模拟得出完全闭合时间为 60 d 的差异可能源于原作者未考虑裂缝闭合后修复介质扩散系数的降低。值得注意的是，本工作和文献[14]中数值模拟得到的修复速率均保持基本恒定，而试验中裂缝修复速率随时间呈递减趋势。表明实际修复过程中微生物成矿反应速率发生了改变，推测该现象是由实际环境中微生物活性的衰减引起的[27]。

3　数值模拟结果与讨论

海洋环境中，微生物混凝土的开裂、裂缝自修复与 Cl^-侵蚀是一个相互影响的复杂耦合过程。为反映三者之间的相互作用，本工作拟构建开裂、修复与 Cl^-扩散 3 种不同耦合时序下的典型模拟工况，即：1) 微生物自修复裂缝完成后再开展 Cl^-扩散过程的数值模拟(PHD)；2) 裂缝修复和 Cl^-扩散 2 个过程同步发生的数值模拟(SHD)；3) 裂缝以某一恒定速率持续动态扩展，在该过程中同步开展裂缝修复和 Cl^-扩散过程数值模拟(SCHD)；4) 无微生物修复裂缝中的 Cl^-扩散过程数值模拟(Ref)，设定为对照组。表 2 汇总了上述 3 种耦合时序下可能的适用场景和范围边界。

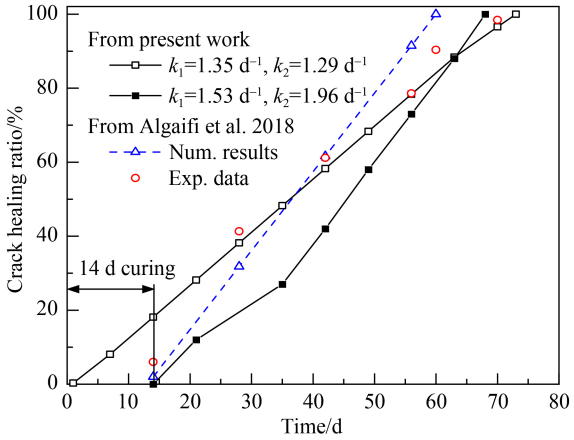


图 3　本工作数值模拟得到的裂缝宽度修复率随时间变化结果与文献[14]中的数据对比图

Fig. 3　Comparison of the crack width healing ratio over time between the current numerical results and data from literature [14]

通过分析裂缝宽度修复率 γ 与 Cl^-浓度分布规律，揭示不同耦合时序下微生物自修复对 Cl^-扩散速度的抑制机制。开裂微生物试件模型及其参数取值与上一节模型验证保持一致，其中成矿动力学参数取 k_1=1.35 d^{-1}，k_2=1.29 d^{-1}，裂缝完全修复时间设定为 73 d，表面 Cl^-浓度为试件质量的 0.37%。

表 2　PHD、SHD 和 SCHD 3 种耦合工况的适用场景和范围边界

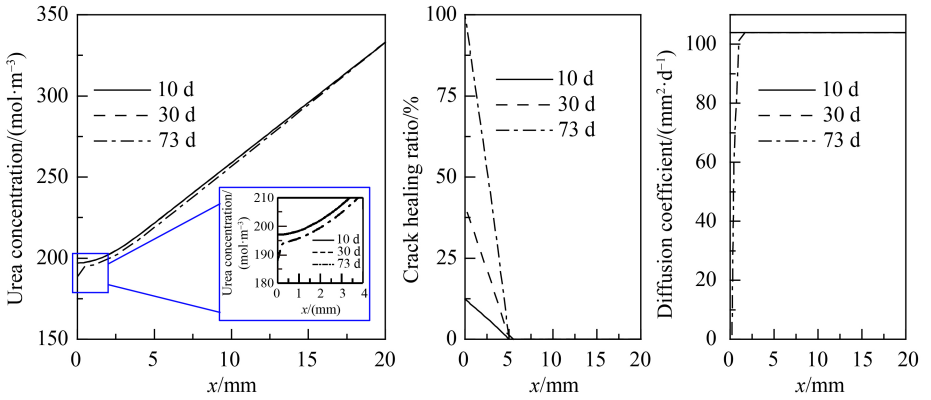
Table 2　Applicable scenarios and scope boundaries for PHD, SHD, and SCHD coupling conditions

Coupling method	Applicable scenarios	Scope boundaries
PHD (Post-healing diffusion)	Laboratory tests exposing MICP-healed specimens to chloride ingress	Only on healed samples
SHD (Simultaneous healing and diffusion)	Laboratory tests using pre-cracked, self-healing specimens subjected to chloride exposure Or structures where an external load suddenly generates a crack, followed immediately by simultaneous repair activation and chloride transport	No significant further crack propagation during the coupled process
SCHD (Sustained cracking with healing-diffusion)	Marine structures under sustained or cyclic loads (waves, currents) causing progressive cracking Or long-term service conditions with continuous damage–repair cycles	Crack growth with a known propagation rate

3.1　裂缝修复完成后的 Cl^-扩散过程数值模拟

研究表明，MICP 技术通过封堵裂缝可有效降低混凝土渗透性[11]。为定量评估裂缝修复对开裂试件耐久性的提升效果，通常对不同修复龄期的试件

开展 Cl^-渗透试验[28]，即本工作所研究的 PHD 工况。图 4 展示了尿素浓度、扩散系数与裂缝宽度修复率的演变规律。值得注意的是，修复前期(10 d 与 30 d)裂缝中的尿素浓度分布未出现显著变化(图 4a)，但经 73 d 修复后，距裂缝表面 0.5 mm 区域出现尿素浓度骤降。这表明在修复初期，尿素供给和矿化消耗处于动态平衡状态，反映了裂缝闭合对传输通道的阻滞效应。由图 4b 和图 4c 可见，0~5.0 mm 范围内裂缝宽度修复率的升高导致裂缝内传输速度下降。73 d 时，0~1.0 mm 范围内的裂缝首先达到式(1)所确定的 0.08 mm 阈值，其扩散系数随裂缝闭合线性减小；在 0~0.5 mm 区域修复率达 96.2%~99.9%，表明局部裂缝几乎完全闭合，这与图 4a 中试件表面一定深度范围内的尿素浓度骤降现象是一致的。



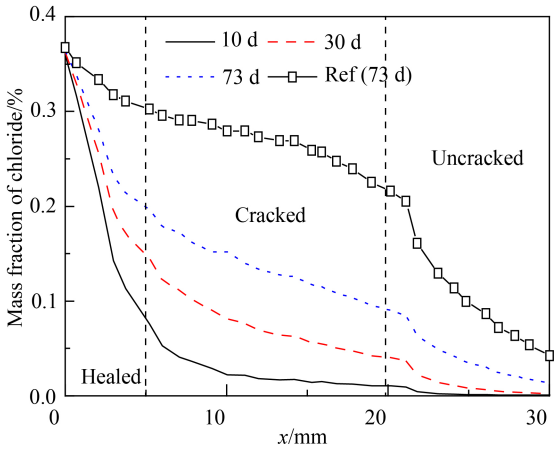
(a) Urea concentration profiles (b) Crack healing ratio (c) D_{cr} for crack elements

x is distance from crack surface; D_{cr} is diffusion coefficient.

图 4 PHD 工况下沿裂缝深度方向的裂缝修复计算结果

Fig. 4 Crack healing results along crack depth under PHD condition

图 5 展示了裂缝附近(距离约 0.5~1.0 mm)Cl^-浓度沿 x 轴方向的分布规律。Cl^-浓度沿裂缝方向呈阶梯状分布。距离裂缝表面 0~5.0 mm 范围内，Cl^-浓度因裂缝修复闭合呈现快速下降趋势，这一区间对应设定的矿化反应区；5.0~20.0 mm 范围内，Cl^-浓度梯度趋缓，可归因于裂缝内较大的扩散系数促使 Cl^-完成快速补充；超过 20.0 mm 后，Cl^-从裂缝区(扩散系数 D_{cr}=103.68 mm^2/d)侵入混凝土基质区(扩散系数 D_m=0.97 mm^2/d)，扩散系数的骤降导致 Cl^-浓度梯度再次增大。定量分析表明，经历 73 d 修复后，距表面 10.0 mm 和 20.0 mm 处的 Cl^-浓度较 Ref 组分别降低了 47.65%和 58.29%。Ling 等[28]在试验中发现了类似的现象，长×宽的尺寸为 20.0 mm×0.2 mm 的混凝土裂缝在修复后，10.0 mm 处 Cl^-浓度下降约 33.33%。以上数值模拟结果证实了 MICP 技术修复混凝土裂缝对 Cl^-侵蚀的显著抑制作用。



x is distance from crack surface.

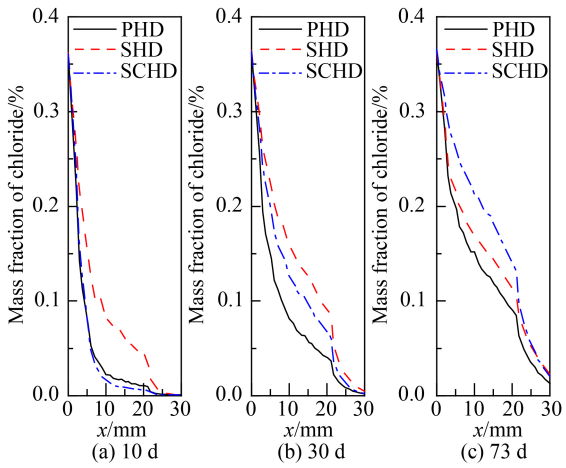
图 5 PHD 工况下 Cl^-浓度沿裂缝深度方向的分布规律

Fig. 5 Concentration profiles of chloride along crack depth under PHD condition

3.2 裂缝修复与 Cl^-扩散同步耦合过程的数值模拟

实际工程中，混凝土的裂缝修复与 Cl^-扩散通常是同步发生的。对此，本节开展 SHD (初始裂缝 0.4 mm、开裂速率 0 mm/d)和 SCHD (初始裂缝 0 mm、开裂速率 0.055 mm/d)工况下的裂缝修复–Cl^-扩散耦合过程的数值模拟。图 6 显示了以上 2 种工况下 Cl^-浓度的分布规律，并与 PHD 计算结果进行对比。由图 6 可见，修复初期，SHD 组因裂缝宽度大且修复率低，Cl^-浓度显著高于其他组；随着修复进程的推进，SHD 和 SCHD 工况下 Cl^-浓度呈现出不同的发展规律。SHD 组 Cl^-浓度曲线趋近 PHD 组，而 SCHD 组因裂缝持续扩展导致 Cl^-浓度快速上升。对比裂缝尖端处(距表面 20.0 mm 处)的 Cl^-浓度，在 10 d 时 SCHD 组的 Cl^-浓度为 0.0062% (质量分数，下同)，仅为 SHD 组同期值(0.0433%)的 14.36%；至 73 d 时，SCHD 组 Cl^-浓度升至 0.1396%，反超至 SHD 组该时段浓度(0.113 %) 123.49%。这表明裂缝持续动态扩展工况下微生物的自修复效果被明显削

弱。此外，3 种工况下 Cl^-浓度的分布差异也进一步表明修复过程的耦合时序的确会影响 Cl^-浓度的分布计算结果。

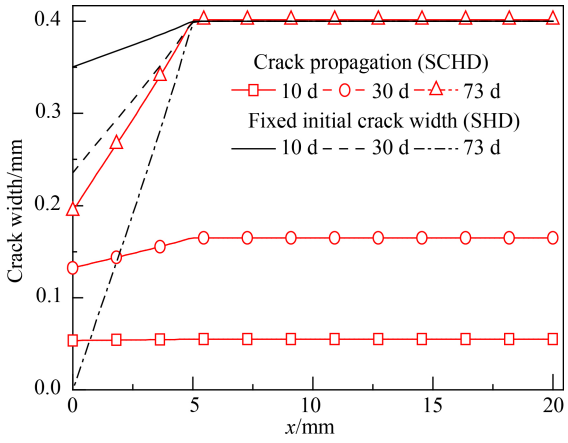


x is distance from crack surface.

图 6　3 种工况下 Cl^-浓度在 10、30 d 和 73 d 时沿裂缝深度方向分布规律

Fig. 6　Chloride concentration profiles versus crack depth at 10, 30 d and 73 d under three working conditions

图 7 从微生物自修复过程中裂缝宽度变化的角度进一步解释导致 SHD 和 SCHD 工况下 Cl^-浓度分布差异的原因。SCHD 组前期裂缝宽度较小，导致裂缝表面处的尿素无法得到有效供给，在图 7 中体现为裂缝闭合速率缓慢。与之相反，SHD 组由于尿素供应稳定，始终保持裂缝的快速修复进程。可见，试件持续开裂对发挥微生物修复混凝土效果及耐久性改善是不利的。这与《微生物自修复混凝土应用技术规程》(T/CECS 973—2021)[29]中给出的适用条件是一致的，即“该技术适用于由混凝土温度、湿度变化引起的非结构受力裂缝的自修复”，原因是这类裂缝在混凝土浇筑初期就已经基本完成，且受荷载作用的影响较小。



x is distance from crack surface.

图 7　SHD 和 SCHD 工况下微生物试件裂缝修复宽度的模拟结果

Fig. 7　Simulated crack width after healing in microbial sample under SHD and SCHD conditions

图 8 通过 Cl^-浓度等值线图显示了 3 种工况下 Cl^-扩散速度的差异。以 0.1%浓度等值线为例，在初期(10 d)，PHD 组和 SCHD 组的 Cl^-浓度分布均匀，而 SHD 组对应渗透深度已达 17.12 mm。至 73 d 时，3 种工况下的渗透深度分别为 20.09 mm (PHD)、21.10 mm (SHD)和 22.04 mm (SCHD)。上述发现同样证实了修复过程的耦合时序对 Cl^-扩散速度及其浓度分布的影响。值得注意的是，PHD 和 SHD 工况下，Cl^-等值线在试件中部出现下凹现象，这表明裂缝闭合后 Cl^-浓度峰值迁移并在裂缝空间内发生双向扩散；而在 SCHD 工况下，因试件的持续开裂而修复作用又无法及时进行补偿，使得 Cl^-在裂缝中保持快速扩散。

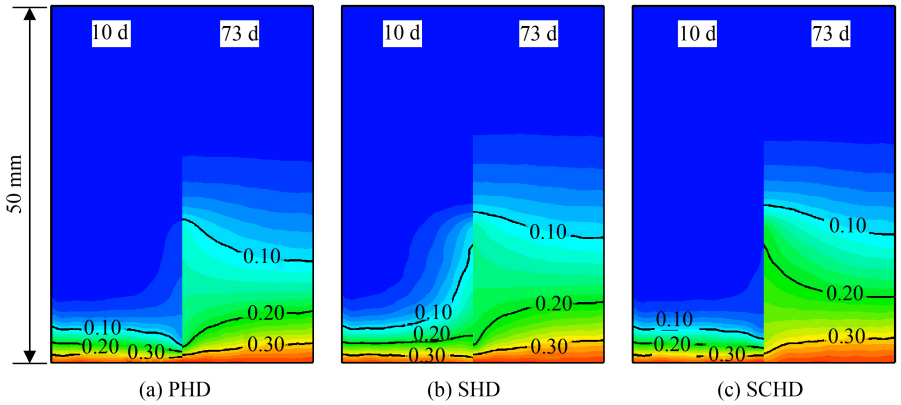


图 8　3 种工况下开裂试件在 10 d 和 73 d 的 Cl^-浓度分布等值线图

Fig. 8　Contour map of chloride concentration in cracked sample at 10 d and 73 d under three working conditions

4 结论

针对试验方法无法深入分析结构开裂、微生物修复功能激活与 Cl^-传输同步耦合的局限性，本文提出了包含裂缝闭合和 Cl^-扩散的多时序耦合数值模拟方法。基于格构网络模型，建立了裂缝自修复数值模块和 Cl^-扩散分析模块，采用裂缝宽度–物质扩散系数关系模型实现了模块间的耦合作用。通过定义 PHD、SHD 以及 SCHD 3 种典型工况，揭示了微生物试件中裂缝修复对 Cl^-扩散的抑制机制，得出的主要结论如下：

1) 微生物自修复在抑制 Cl^-扩散速度上与裂缝深度关系密切。PHD 工况下Cl^-浓度沿裂缝深度呈阶梯状下降趋势，距表面 10.0 mm 与 20.0 mm 处 Cl^-浓度较 Ref 组分别降低 47.65%与 58.29%；浅层区域(0~0.5 mm)修复率达 96.2%~99.9%，区域内 Cl^-扩散系数恢复至未开裂基体水平。

2) 试件持续开裂会影响裂缝内物质扩散速度。SHD 组初期因裂缝宽度大、修复率低，导致 Cl^-浓度显著高于其他组；SCHD 工况下，裂缝的持续动态扩展导致 Cl^-浓度快速上升，裂缝尖端 Cl^-浓度由 10 d 时 SHD 组的 14.36%增至 73 d 时的 123.49%，表明 MICP 技术适用于由环境温度、湿度变化引起的非结构型裂缝修复。

参考文献:

[1] 王元战, 袁良智. 竖向毛细吸附对海洋水位变动环境混凝土 Cl^-传输影响[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(1): 47–59.
WANG Yuanzhan, YUAN Liangzhi. J Chin Ceram Soc, 2025, 53(1): 47–59.

[2] 孙佳, 金祖权, 秦一琦. 钢筋非均匀锈蚀与混凝土开裂试验及数值模拟[J]. 建筑材料学报, 2024, 27(4): 309–319.
SUN Jia, JIN Zuquan, QIN Yiqi. J Build Mater, 2024, 27(4): 309–319.

[3] 鲍玖文, 魏佳楠, 张鹏, 等. 海洋环境下混凝土抗 Cl^-侵蚀的相似性研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2020, 48(5): 689–704.
BAO Jiuwen, WEI Jianan, ZHANG Peng, et al. J Chin Ceram Soc, 2020, 48(5): 689–704.

[4] SHIROLE D, VOLPATTI G, GUERINI A, et al. Effects of electrodeposition in concrete mediated by electric currents of variable polarity[J]. Cem Concr Res, 2023, 172: 107254.

[5] LIU Z Q, ZHU H, ZENG Y H, et al. Study on the flexural properties of T-shaped concrete beams reinforced with iron-based shape memory alloy rebar[J]. Eng Struct, 2024, 306: 117792.

[6] SHIELDS Y, DE BELIE N, JEFFERSON A, et al. A review of vascular networks for self-healing applications[J]. Smart Mater Struct, 2021, 30(6): 063001.

[7] 蔡景顺, 李华, 舒鑫, 等. 提升结构混凝土耐久性的外加剂研究进展[J]. 硅酸盐学报, 2025, 53(3): 553–573.
CAI Jingshun, LI Hua, SHU Xin, et al. J Chin Ceram Soc, 2025, 53(3): 553–573.

[8] WANG J Y, SOENS H, VERSTRAETE W, et al. Self-healing concrete by use of microencapsulated bacterial spores[J]. Cem Concr Res, 2014, 56: 139–152.

[9] WANG X Z, XU J, WANG Z P, et al. Use of recycled concrete aggregates as carriers for self-healing of concrete cracks by bacteria with high urease activity[J]. Constr Build Mater, 2022, 337: 127581.

[10] LIU C, ZHANG R F, LIU H W, et al. Self-healing concrete with recycled coarse aggregate: The performance of biochemical-chloride ion transport[J]. J Build Eng, 2022, 57: 104925.

[11] SIDDIQUE R, NANDA V, KADRI E H, et al. Influence of bacteria on compressive strength and permeation properties of concrete made with cement baghouse filter dust[J]. Constr Build Mater, 2016, 106: 461–469.

[12] WANG L C, BAO J W, UEDA T. Prediction of mass transport in cracked-unsaturated concrete by mesoscale lattice model[J]. Ocean Eng, 2016, 127: 144–157.

[13] 刘清风. 基于多离子传输的混凝土细微观尺度多相数值模拟[J]. 硅酸盐学报, 2018, 46(8): 1074–1080.
LIU Qingfeng. J Chin Ceram Soc, 2018, 46(8): 1074–1080.

[14] ALGAIFI H A, ABU BAKAR S, SAM A R M, et al. Numerical modeling for crack self-healing concrete by microbial calcium carbonate[J]. Constr Build Mater, 2018, 189: 816–824.

[15] GRASSL P. A lattice approach to model flow in cracked concrete[J]. Cem Concr Compos, 2009, 31(7): 454–460.

[16] AL-AMEERI A S, RAFIQ M I, TSIOULOU O. Combined impact of carbonation and crack width on the chloride penetration and corrosion resistance of concrete structures[J]. Cem Concr Compos, 2021, 115: 103819.

[17] GOSTING L J, AKELEY D F. A study of the diffusion of urea in water at 25° with the gouy interference Method1[J]. J Am Chem Soc, 1952, 74(8): 2058–2060.

[18] DJERBI A, BONNET S, KHELIDJ A, et al. Influence of traversing crack on chloride diffusion into concrete[J]. Cem Concr Res, 2008, 38(6): 877–883.

[19] HAGER M D, GREIL P, LEYENS C. Self-healing materials[M]. Switzerland: Springer, 2016: 345–385.

[20] OKWADHA G D O, LI J. Optimum conditions for microbial carbonate precipitation[J]. Chemosphere, 2010, 81(9): 1143–1148.

[21] ZHU X J, MIGNON A, NIELSEN S D, et al. Viability determination of Bacillus sphaericus after encapsulation in hydrogel for self-healing concrete *via* microcalorimetry and *in situ* oxygen concentration measurements[J]. Cem Concr Compos, 2021, 119: 104006.

[22] SIDDIQUE R, CHAHAL N K. Effect of ureolytic bacteria on concrete properties[J]. Constr Build Mater, 2011, 25(10): 3791–3801.

[23] PEI R T, LIU J, WANG S S, et al. Use of bacterial cell walls to improve the mechanical performance of concrete[J]. Cem Concr Compos, 2013, 39: 122–130.

[24] ZOU K, WANG L C, UEDA T. Time-varying modeling of microbial-induced calcite precipitation in cracked concrete and its inhibitory effect on chloride diffusion[J]. J Mater Civ Eng, 2024, 36(6): 04024118.

[25] XU J, WANG X Z, WANG B B. Biochemical process of ureolysis-based microbial $CaCO_3$ precipitation and its application in self-healing concrete[J]. Appl Microbiol Biotechnol, 2018, 102(7): 3121–3132.

[26] QIAN C X, ZHANG Y, XIE Y D. Effect of ion concentration in crack zone on healing degree of microbial self-healing concrete[J]. Constr Build Mater, 2021, 286: 122969.
[27] BAŞARAN BUNDUR Z, BAE S, KIRISITS M J, et al. Biomineralization in self-healing cement-based materials: Investigating the temporal evolution of microbial metabolic state and material porosity[J]. J Mater Civ Eng, 2017, 29(8): 04017079.
[28] LING H, QIAN C X. Effects of self-healing cracks in bacterial concrete on the transmission of chloride during electromigration[J]. Constr Build Mater, 2017, 144: 406–411.
[29] 中国工程建设标准化协会. T/CECS 973—2021 微生物自修复混凝土应用技术规程[S]. 北京: 中国计划出版社, 2021.

Numerical Simulation of Temporal Coupling Between Microbially Induced Crack Self-Healing and Chloride Diffusion in Concrete

ZOU Kai, *WANG Licheng*
(State Key Laboratory of Coastal and Offshore Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, Liaoning, China)

Extended Abstract

Introduction Chloride-induced corrosion of steel reinforcement can severely damage the reinforced concrete in marine and saline environments, specifically accelerating steel depassivation, electrochemical corrosion, and structural weakening. To deal with these challenges, the microbially induced calcium carbonate precipitation (MICP) technique emerges as a promising self-healing solution for concrete. The existing experimental investigations are predominantly limited to post-healing strength recovery and durability enhancement. However, the chloride ingress mechanism under working conditions remains insufficiently explored, particularly regarding the temporal coupling between crack closure and crack propagation process. Furthermore, a dual inhibitory effect induced by crack closure is also identified, which simultaneously impedes chloride penetration and restricts the transport of healing agents (*e.g.*, urea, calcium sources). In this work, two numerical modules were proposed. The crack self-healing behavior as well as chloride diffusion process were simulated by a lattice network model. The inter-module coupling was implemented by a diffusion coefficient model dependent on crack width. The inhibition effect of crack healing on chloride diffusion within microbial sample was quantitively analyzed by the proposed model.

Methods A lattice network model discretized by Voronoi diagram was adopted to simulate the diffusion of self-healing component (*i.e.*, urea) and chloride in microbial samples. The governing equation for urea hydrolysis kinetics could follow Fick's second law with an extended term of ureolysis rate. The calculated mass of calcium carbonate was obtained from urea concentration profiles and then used to iteratively update crack healing ratios. Based on this foundation, chloride diffusion was subsequently simulated by means of the dynamically adjusted diffusion coefficients that could correspond to the changing crack widths. For numerical implementation, a cylindrical microbial mortar specimen (ϕ 30.0 mm×50.0 mm) containing a parallel crack (20.0 mm×0.4 mm) was modeled. To systematically evaluate the chloride inhibition effects of MICP and reproduce the chloride concentration distribution under temporal coupling issues, three working conditions were defined, *i.e.*, post-healing chloride diffusion (PHD), simultaneous healing-diffusion (SHD), and sustained cracking with healing-diffusion (SCHD).

Results and discussion During the early healing period (*i.e.*, 10 d and 30 d), no significant variation in urea concentration distribution appears within cracks. This is generally believed to originate from the dynamic equilibrium between urea supply and mineralization consumption during the initial healing stage. However, after 73 d healing, a sharp decline in urea concentration occurs in the 0–0.5 mm region near the crack surface. The MICP-driven crack closure is likely a primary mechanism for the inhibition of chloride diffusion. The results of crack healing ratio and diffusion coefficient along crack depth show that the increase in crack healing ratio within the 0–5.0 mm range results in a reduced diffusion coefficient. At 73 d, cracks within the 0–1.0 mm range reach the 0.08 mm threshold defined in diffusion coefficient versus crack width model, leading to a linearly decreased diffusion coefficient as crack closure develops. In the 0–0.5 mm region, the numerical results of crack healing ratio ranging from 96.2% to 99.9% indicate that the surface crack is nearly closed. The MICP-based crack healing is able to inhibit the ingress of Cl^-. Under the PHD condition at 10, 30, and 73 d, a stepwise decline in Cl^- concentration distribution occurs along the crack depth, even for the Ref group at 73 d. Within the 0–5.0 mm range, MICP-induced crack healing causes a rapid decrease in Cl^- concentration reduction, and this range corresponds to the predefined mineralization reaction zone. For the zone ranging from 5.0–20.0 mm, the concentration gradient gradually flattens, which is attributed to accelerated Cl^- replenishment facilitated by high diffusion coefficients. At depths of exceeding 20.0 mm, the migration of Cl^- from the crack region to the concrete matrix leads to an abrupt reduction in diffusion coefficient, steepening the concentration gradient. The results of quantitative analysis reveal that after 73 d healing, Cl^- concentrations at 10 mm and 20 mm depths are reduced by 47.65% and 58.29%, respectively, compared to the Ref group. The sustained cracking also compromises the healing efficacy and hence elevates Cl^- concentration. At the initial healing stage, the SHD group exhibits significantly higher Cl^- concentrations than other groups due to wider cracks and lower healing ratios. As healing progresses, Cl^- concentration under SHD condition gradually approaches that in PHD group. Despite the smaller initial crack width for SCHD

condition, the sustained cracking greatly increases the diffusion coefficient in crack. At the crack tip (*i.e.*, 20.0 mm depth), Cl^- concentration in SCHD group increases from 0.0062% at 10 d to 0.1396% at 73 d, exceeding the final concentration in SHD group (0.1131%) by 123.49%.

Conclusions This work proposed a numerical framework *via* integrating crack healing and chloride diffusion modules to address the experimental limitations in analyzing temporally coupled processes of sample cracking, microbial self-healing activation, and chloride ingress. The permeability of cracked microbial sample was significantly inhibited by MICP-driven crack closure. Under the PHD condition, Cl^- concentration distribution exhibited a progressive attenuation along the crack depth, with reductions of 47.65% (*i.e.*, 10.0 mm) and 58.29% (*i.e.*, 20.0 mm) compared to the Ref condition. Moreover, in shallow surface regions (0–0.5 mm), the chloride diffusion coefficient was restored to levels comparable to intact matrices. However, the sustained cracking could have a compromise microbial self-healing efficacy. Under the SCHD condition, Cl^- concentration at the crack tip increased from 0.0062 wt% (10 d) to 0.1396% (73 d). These results demonstrated that the MICP technique could be suitable for non-structural cracks induced by environmental stresses.

Keywords microbial self-healing; chloride diffusion; crack; concrete; temporal coupling