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.0454-5648.20250338

基于格子 Boltzmann–近场动力学耦合的混凝土锈胀开裂多尺度数值模拟

张 跃，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：为研究混凝土中氯离子扩散与锈胀裂缝扩展的耦合过程，建立了一个扩散–力耦合的格子 Boltzmann–近场动力学(LB–PD)模型。模型中采用生成–投放方法重建混凝土的细观结构，包括骨料、砂浆及界面过渡区。通过调整扩散–力耦合的格子 Boltzmann 粒子分布函数的松弛时间和定义多类型的近场动力学(PD)键，实现了氯离子扩散与锈胀裂缝扩展的跨尺度耦合模拟。在此基础上，结合近场动力学微分算子建立了基于应力的 PD 键断裂准则。为准确表征裂缝形态，引入 Zhang–Suen 细化算法提取锈胀裂缝骨架，并据此定量评估内部裂缝的长度与宽度。最后，采用该模型模拟了顶部带有 1 根及 3 根钢筋的混凝土保护层的锈胀开裂过程。模拟结果表明，该模型可有效捕捉多尺度锈胀裂缝的演化特征；骨料的存在不仅阻碍裂缝扩展，还延缓氯离子的渗透，从而减轻钢筋锈蚀程度并抑制裂缝萌生。

关键词：格子 Boltzmann 方法；近场动力学；锈胀裂缝；氯离子扩散
中图分类号：TU528　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2026)02–0742–12
网络出版时间：2026–01–06



在氯盐环境中服役的钢筋混凝土结构，其内部孔隙体系为氯离子的迁移提供了通道，随着氯离子的持续侵入，钢筋发生锈蚀膨胀并引起混凝土开裂的风险会持续增长[1, 2]。裂缝将加速氯离子的进一步渗透，加剧结构劣化。为了精确模拟锈胀裂缝演化，有必要建立一个氯离子扩散–锈胀开裂耦合模型，实现对锈胀裂缝长度与宽度的定量预测。

目前，已有大量数值模拟研究围绕上述问题展开。在氯离子传输方面，研究者基于有限元方法构建了混凝土细观模型，用于预测不同时间与空间位置的氯离子浓度分布[3]，并进一步发展了多离子耦合模型，综合考虑钙离子溶解、硫酸盐侵蚀和氯盐侵蚀之间的相互作用[4]。此外，有研究者提出了化学–热–损伤–传输耦合的多场模型，以探讨温度变化与钙离子溶解对离子迁移路径及孔隙结构演化的影响[5]。在混凝土锈胀开裂方面，已有研究采用刚体弹簧元模型[6]、有限元法[7]、扩展有限元[8]以及相场[9]等方法，模拟钢筋非均匀锈蚀引起的保护层开裂过程，并揭示了保护层厚度、锈蚀分布等因素对混凝土保护层锈胀开裂的影响。

尽管上述研究取得了重要进展，现有模型仍多聚焦于单一物理过程，缺乏对氯离子传输与力学开裂的耦合建模；且有限元法、扩展有限元法及相场法等传统方法基于局部理论，难以有效处理裂缝演化过程中的位移非连续性，尤其在裂缝长度和宽度的定量预测方面仍存在挑战。近年兴起的近场动力学(PD)作为非局部理论，其平衡方程不含空间导数，可自然模拟裂缝形成与扩展过程中的非连续位移[10, 11]。然而，PD 在描述多孔介质中微观结构演化对渗流或物质传输行为的影响方面仍显不足。相比之下，格子 Boltzmann 方法(LBM)从介观尺度出发，具备复杂边界适应性与多尺度建模能力，已广泛应用于多孔介质中的多尺度扩散与渗流模拟[12, 13]。

收稿日期：2025–04–29。　修订日期：2025–05–17。
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：张 跃(1994—)，男，博士研究生。
通信作者：王立成(1975—)，男，博士，教授。

Received date: 2025–04–29.　**Revised date:** 2025–05–17.
First author: ZHANG Yue (1994–), male, Doctoral candidate.
E-mail: zhangyuekobe@foxmail.com
Correspondent author: WANG Licheng (1975–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: wanglich@dlut.edu.cn

鉴于此，本工作提出了考虑混凝土细观结构的扩散–力学耦合的格子 Boltzmann–近场动力学(LB–PD)模型。该模型无需对界面过渡区(ITZ)进行细化网格建模处理，即可实现混凝土中氯离子扩散与锈胀裂缝扩展的跨尺度耦合。在此基础上，结合近场动力学微分算子(PDDO)，构建了基于应力的 PD 键断裂准则。通过对比 2 个经典解析算例，验证了模型在模拟混凝土物质传输和力学响应方面的准确性。此外，引入 Zhang–Suen 细化算法[14, 15]用于裂缝骨架提取，实现了对裂缝长度和宽度的定量评价。最后，采用该模型模拟了顶部布置单根或多根钢筋的混凝土保护层锈胀开裂过程。

1　理论和数值方法

1.1　氯离子传输理论方程

在忽略对流影响的情况下，饱和混凝土内部氯离子的扩散过程可由 Fick 第二定律描述[式(1)]。

$$\frac{\partial c}{\partial t}=D_e\times\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right) \tag{1}$$

式中：t 表示时间；x、y 分别表示二维空间坐标位置；c 为混凝土中自由氯离子的浓度(%)，表示氯离子占混凝土的质量分数；D_e 为氯离子的有效扩散系数(m^2/s)，可以表示为式(2)。

$$D_e=\begin{cases}D_i & \text{Intact area}\\ D_c & \text{Crack area}\end{cases} \tag{2}$$

式中：D_i 和 D_c 分别表示混凝土中完好区域与裂缝区域的氯离子扩散系数；完好区域的扩散系数 D_i 表达式如式(3)所示[16, 17]。

$$D_i=D_0\left\{\left(\frac{t_0}{t}\right)^{n_t}\times\left(\frac{1}{1+a}\right)\times\exp\left[\frac{U}{R}\times\left(\frac{1}{T_0}-\frac{1}{T}\right)\right]\right\} \tag{3}$$

式中：D_0 为氯离子初始扩散系数；t_0 为混凝土的参考龄期，一般取为 28 d；a 为吸附系数，对普通混凝土，a=0.1597；n_t 为时间衰减指数；U 为氯离子扩散过程中的活化能，取值 41.8 kJ/mol；R 为气体常数，取值 8.314 J/(mol·K)；T 为混凝土内部温度(K)；T_0 为参考温度，取值 296 K。根据 Cai 等[18]通过试验得到了不同裂缝宽度下的氯离子扩散系数 D_c。

$$D_c=\begin{cases}2\times10^{-11}l-4\times10^{-10} & 30\ \mu\text{m}\leqslant l<80\ \mu\text{m}\\ 14\times10^{-10} & l\geqslant 80\ \mu\text{m}\end{cases} \tag{4}$$

式中：l 为裂缝宽度(μm)。

1.2　格子 Boltzmann 方法

在本研究中，采用二维九速(D2Q9)单松弛 LBM 模型模拟氯离子在混凝土内部的扩散过程，对应的演化方程可以表示为式(5)[12, 19]。

$$f_i(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_i\Delta t,t+\Delta t)-f_i(\boldsymbol{x},\Delta t)=\frac{1}{\tau(\boldsymbol{x},t)}\times\left[f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{x},t)-f_i(\boldsymbol{x},t)\right] \tag{5}$$

式中，$f_i(\boldsymbol{x},t)$和 $f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{x},t)$分别表示 t 时刻，$\boldsymbol{x}$ 位置处沿着 i 方向演化的粒子分布函数和平衡分布函数，如图 1 所示；Δt 分别为计算网格间距和模拟时间步长；$\tau(\boldsymbol{x},t)$为 t 时刻，$\boldsymbol{x}$ 位置处的无量纲松弛时间；离散速度 $\boldsymbol{e}_i$ 定义了 LB 粒子在相邻晶格节点之间的迁移方向与速度大小，在 D2Q9 模型中，9 个离散速度分量可具体表示为式(6)。

$$\boldsymbol{e}_i=e\begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1\end{bmatrix} \tag{6}$$

式中：e 表示格子速度，$e=\Delta x/\Delta t$，其中 Δx 表示网格间距。

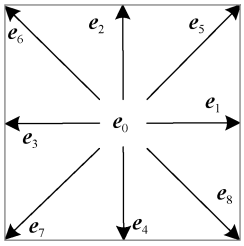


图 1　LBM D2Q9 速度模型

Fig. 1　LBM D2Q9 velocity model

D2Q9 模型的平衡分布函数 $f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{x},t)$可以表示为式(7)。

$$f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{x},t)=\omega_i c(\boldsymbol{x},t) \tag{7}$$

式中：$c(\boldsymbol{x},t)$为 t 时刻、$\boldsymbol{x}$ 位置处的氯离子浓度；ω_i 为不同离散速度方向的权函数，分别取值：ω_0=4/9，ω_{1-4}=1/9 以及 ω_{5-8}=1/36。

通过对离散 LBM 方程[式(5)]进行 Chapman-Enskog 展开，可恢复至宏观扩散方程[式(1)]。由此便可建立氯离子浓度与分布函数，以及扩散系数与无量纲松弛系数之间的联系。

$$\begin{cases}C(\boldsymbol{x},t)=\sum_{i=0}^{i=8}f_i(\boldsymbol{x},t)\\ D_e(\boldsymbol{x},t)=e_s^2\times\left[\tau_c(\boldsymbol{x},t)-\frac{1}{2}\right]\times\Delta t\end{cases} \tag{8}$$

式中：e_s 为格子声速，取值$\sqrt{\frac{1}{3}}$。

1.3　近场动力学理论

在近场动力学中，计算域被离散为一系列具有体积和密度的物质点。这些物质点通过与族域内其他物质点之间的键发生非局部相互作用，如图 2 所

示，相应的运动方程可表示为式(9)[10, 11]。

$$\rho\frac{\partial^2\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t^2}=\int_{H_x}\varphi(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},t)\times[\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x},t)-\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x}',t)]\mathrm{d}V_{x'}+\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x},t) \tag{9}$$

式中：$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$表示物质点 $\boldsymbol{x}$ 在 t 时刻的位移向量；$\varphi(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}, t)$为连接物质点 $\boldsymbol{x}'$和 $\boldsymbol{x}$ 的键状态函数；$\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x}', t)$和 $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x}, t)$分别表示作用于物质点 $\boldsymbol{x}'$和 $\boldsymbol{x}$ 的 PD 键力向量；$V_{x'}$为物质点 $\boldsymbol{x}'$的体积；$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}, t)$为体力向量。

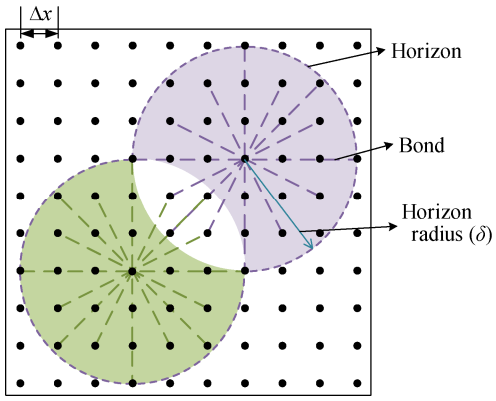


图 2 近场动力学非局部作用示意图

Fig. 2 Schematic diagram of the non-local interaction in Peridynamic

在近场动力学的常规状态基模型中，PD 键力向量可表示为式(10)。

$$\begin{cases}\boldsymbol{T}(\boldsymbol{x},t)=\dfrac{1}{2}A\dfrac{\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{y}|}\\ \boldsymbol{T}(\boldsymbol{x}',t)=\dfrac{1}{2}B\dfrac{\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'}{|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'|}\end{cases} \tag{10}$$

式中：$\boldsymbol{y}'$和 $\boldsymbol{y}$ 分别表示变形构型中物质点 $\boldsymbol{x}'$和 $\boldsymbol{x}$ 的变形向量，可通过物质点的位置向量与其位移向量之和得到 $\boldsymbol{y}'=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}', t)+\boldsymbol{x}'$和 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)+\boldsymbol{x}$；辅助参数 A 和 B 的表达式如式(11)所示。

$$\begin{cases}A=4\delta d\dfrac{\Lambda}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}a\theta(\boldsymbol{x},t)+4\delta bs\\ B=4\delta d\dfrac{\Lambda}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}a\theta(\boldsymbol{x}',t)+4\delta bs\end{cases} \tag{11}$$

式中：δ 表示近场族域半径；s 表示键的伸长率；近场动力学键参数 a、b 和 d 计算由式(12)给出。

$$\begin{cases}a=\dfrac{1}{2}(K-2G)\\ b=\dfrac{6G}{\pi h\delta^4}\\ d=\dfrac{1}{\pi h\delta^3}\end{cases} \tag{12}$$

式中：K、G 分别表示材料的体积模量和剪切模量；h 为计算模型厚度。物质点的体积应变(θ)可通过式(13)计算。

$$\begin{cases}\theta(\boldsymbol{x},t)=\displaystyle\int_{H_x}d\delta\frac{|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{y}|-|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}\Lambda\mathrm{d}V_{x'}\\ \theta(\boldsymbol{x}',t)=\displaystyle\int_{H_{x'}}d\delta\frac{|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{y}|-|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}\Lambda\mathrm{d}V_{x}\end{cases} \tag{13}$$

式中：H_x 及 $H_{x'}$分别表示物质点 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}'$的族域；形状参数 Λ 可通过式(14)计算。

$$\Lambda=\left(\frac{\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{y}}{|\boldsymbol{y}'-\boldsymbol{y}|}\right)\times\left(\frac{\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}}{|\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}|}\right) \tag{14}$$

在 PD 理论中，内力通过对物质点邻域内的 PD 键力进行积分获得，如式(9)所示。传统的断裂准则通常基于键的临界伸长率，表达式中包含与网格尺寸相关的参数，使得裂缝扩展过程对离散尺度具有显著敏感性。为建立一种基于应力的 PD 键断裂准则，本工作引入近场动力学微分算子(PDDO)，该算子以积分形式替代传统微分运算，可在无连续位移场梯度的条件下实现应力张量求解，其表达式如式(15)所示。

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x},t)=\int_{H_x}[\lambda\times\mathrm{tr}(\boldsymbol{\eta}\otimes\boldsymbol{g})\boldsymbol{I}+\mu\boldsymbol{\eta}\otimes\boldsymbol{g}+\mu\boldsymbol{g}\otimes\boldsymbol{\eta}]\mathrm{d}V_{x'} \tag{15}$$

式中：λ 和 μ 表示材料的 Lame 常数；$\boldsymbol{\eta}$ 为 PD 键的相对位移向量，定义为 $\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}', t)-\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$；tr 表示对矩阵取迹；⊗ 表示张量积运算；$\boldsymbol{g}$ 为近场动力学微分算子矩阵，其具体构造过程可参考文献[20]。

在式(9)中，键状态函数 $\varphi(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}, t)$为标量函数，用于表征物质点 $\boldsymbol{x}'$和 $\boldsymbol{x}$ 连接的 PD 键是否发生断裂。在节点应力已知的情况下，可采用最大主应力准则作为断裂判据，其表达式见式(16)。

$$\varphi(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x},t)=\begin{cases}0, & \dfrac{\left[\sigma_1(\boldsymbol{x}',t)+\sigma_1(\boldsymbol{x},t)\right]}{2}\geqslant f\\ 1, & \text{Others}\end{cases} \tag{16}$$

式中：f_t 为材料的抗拉强度；$\sigma_1(\boldsymbol{x}', t)$和 $\sigma_1(\boldsymbol{x}, t)$分别为物质点 $\boldsymbol{x}'$和 $\boldsymbol{x}$ 的第一主应力。

当 PD 键两端物质点的应力状态满足式(16)的断裂准则时，该键将发生不可逆断裂。为表征物质点局部损伤程度，定义其族域内已断裂键数与总键数之比作为该点的局部损伤(dmg)。

$$\mathrm{dmg}=1-\frac{\int_{H_x}\phi(\boldsymbol{\xi},t)\mathrm{d}V_{x'}}{\int_{H_x}\mathrm{d}V_{x'}} \tag{17}$$

2　混凝土锈胀开裂跨尺度模拟

2.1　混凝土细观模型生成方法

采用生成–投放法构建混凝土多边形骨料组成的细观模型：首先，基于 Fuller 级配曲线[21][式(18)]，采用蒙特卡罗方法生成符合分布规律的骨料粒径集合；随后，根据生成的粒径数据构建多边形骨料，并将其随机投放至计算域中，直至满足设定的骨料体积分数要求。

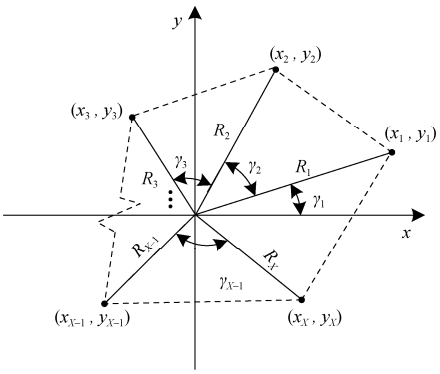
$$P(L)=100\left(\frac{L}{L_{\max}}\right)^{n} \tag{18}$$

式中：$P(L)$表示通过尺寸为 L 的筛孔的骨料累积分数；$L_{\max}$ 表示骨料集配内最大骨料粒径；指数 n 的范围通常为 0.45~0.70，在本工作中定义为 0.5。

将生成的骨料粒径集合记为 $L=\{L_1, L_2, L_3, \ldots, L_p, \ldots, L_{nn}\}$。随后，从该集合中随机选取粒径 d_p，用于构建相应多边形骨料的顶点坐标，具体计算方法如式(19)所示。

$$\begin{cases} x_j = R_j \times \cos\left(\sum_{k=1}^{j} \gamma_k\right) \\ y_j = R_j \times \sin\left(\sum_{k=1}^{j} \gamma_k\right) \end{cases} \tag{19}$$

式中：(x_j, y_j)表示所生成某一骨料的第 j 个顶点坐标；R_j 为该顶点对应的随机半径，定义为 $R_j=(R_n \cdot d_p)/2$，R_n 为范围在[0.5, 1.0]内的随机数；γ_k 表示相邻 2 条半径之间的夹角，如图 3 所示，X 表示当前多边形骨料的边数。



Note: (x_j, y_j) denote the coordinates of the j-th vertex of the generated aggregate; R_j is the random radius associated with this vertex; γ_k represents the angle between two adjacent radii.

图 3　单颗粒骨料生成示意图

Fig. 3　Schematic diagram of a single polygonal aggregate generation

在生成所有骨料后，按照粒径对骨料从大到小排序，即优先投放粒径较大的骨料。在此过程中，采用节点标记方法来检测当前投放的骨料是否与已投放的骨料发生重叠。具体实施方法可以参见文献[22]。

2.2　氯离子扩散跨尺度模拟方法

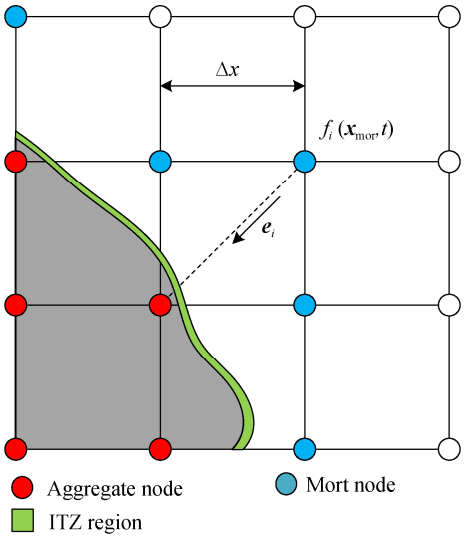
混凝土中骨料和砂浆间的界面过渡区(ITZ)的尺寸通常处于微米级，远小于砂浆和骨料的特征尺度。因此，在模拟混凝土中氯离子的传输过程时，传统的网格方法往往需要对 ITZ 进行细化建模，这会显著增加计算成本。相比之下，LBM 提供了一种有效的替代方案。该方法无需额外的网格细化，而是通过调整跨越 ITZ 区域的粒子分布函数的无量纲松弛时间，便可实现氯离子的跨尺度扩散模拟。如图 4 所示，分布函数 $f_i(\boldsymbol{x}_{\mathrm{mor}}, t)$沿离散速度 $\boldsymbol{e}_i$ 方向迁移，并在此过程中穿越 ITZ，其相应的松弛系数调整方式如式(20)所示。

$$\tau_{\mathrm{si}}(\boldsymbol{x},t)=\frac{D_{\mathrm{si}}(\boldsymbol{x},t)}{\boldsymbol{e}_s^2\Delta t}+\frac{1}{2} \tag{20}$$

式中：τ_{si} 表示分函数 $f_i(\boldsymbol{x}_{\mathrm{arr}}, t)$的无量纲松弛系数，其对应的氯离子扩散系数$D_{\mathrm{si}}$可以采用麦克斯韦模型计算。

$$D_{\mathrm{si}}=\left[1+\frac{3(r_D-1)(1-h_{\mathrm{ITZ}}/\Delta x)}{(r_D+2)-(r_D-1)(1-h_{\mathrm{ITZ}}/\Delta x)}\right]D_{\mathrm{mor}} \tag{21}$$

式中：r_D 表示氯离子在 ITZ 和砂浆区域的扩散系数之比，即 $r_D=D_{\mathrm{ITZ}}/D_{\mathrm{mor}}$；$h_{\mathrm{ITZ}}$ 表示 ITZ 厚度。



Note: Δx denotes the grid spacing; $\boldsymbol{e}_i$ is the discrete velocity in the i direction; f_i represents the distribution function along the i direction within the mortar region.

图 4　ITZ 区域 LB 粒子演化示意图

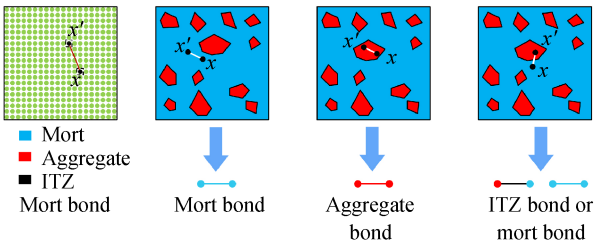
Fig. 4　Schematic diagram of LB particle evolution in ITZ region

2.3　PD 键分类方法

在模拟混凝土锈胀变形与开裂过程中，计算域内的 PD 键被划分为 3 类：骨料键、砂浆键和 ITZ

键，如图 5 所示。键的类型由其两端节点的材料属性决定：若两端节点类型相同，则该键与节点类型一致；若节点类型不同，则根据其长度进行判定。当键长大于 1.5 倍的网格间距(Δx)时，定义为砂浆键；反之，则定义为 ITZ 键。

键类型一经确定，其对应的键参数 a、b 和 d 可通过式(12)计算获得。此外，不同类型 PD 键的抗拉强度不同，这些强度参数将被用于判定 PD 键是否发生断裂。



Note: ITZ is the interface transition zone of concrete.

图 5 混凝土细观结构模型中 PD 键分类示意图

Fig. 5 Schematic diagram for classification of PD bonds in the concrete microscopic model

2.4 锈胀位移计算方法

目前，混凝土中钢筋锈蚀膨胀效应的模拟方法有等效力加载、等效位移加载和等效温度加载等方法。由于钢筋的膨胀形态比较容易通过试验观测到，等效位移加载方法在建模过程中更易根据试验结果确定加载参数，应用更为广泛。本工作选用该方法模拟钢筋的非均匀锈蚀膨胀，膨胀位移(μ_{corr})采用式(22)计算[23]。

$$u_{\mathrm{corr}}=\sqrt{\beta R_{\mathrm{st}}^2-(\beta-1)\left(R_{\mathrm{st}}-\delta_{\mathrm{corr}}\right)^2}-R_{\mathrm{st}} \tag{22}$$

式中：β 为钢筋锈蚀产物与原钢筋消耗的体积比，取值范围一般为 2~6；R_{st} 为钢筋锈蚀前的原始半径；钢筋锈蚀量 δ_{corr} 可通过式(23)计算。

$$\delta_{\mathrm{corr}}=4.2384\times10^{6}t_{\mathrm{corr}}\times\exp\left(2.890c_{\mathrm{cl}}-0.0112H_p+0.027\mathrm{RH}\right) \tag{23}$$

式中：t_{corr} 表示氯离子侵蚀时间(s)；c_{Cl} 表示钢筋表面氯离子浓度，%(表示占混凝土的质量分数)；H_{p} 为混凝土保护层厚度；RH 为混凝土内部相对湿度。

2.5 数值模拟流程

在本工作中提出的 LB–PD 耦合模型中，LBM 用于模拟氯离子在混凝土内部的跨尺度扩散过程，而 PD 则用于模拟由钢筋锈蚀引起的混凝土膨胀变形及其内部裂缝演化。模型采用统一的网格结构，并通过共节点策略实现 LBM 与 PD 模块之间的信息传递。具体而言，LBM 计算得到的氯离子浓度通过式(22)和式(23)转换为膨胀位移，并作为加载边界条件施加于 PD 力学场，模拟锈蚀膨胀引起的混凝土变形与裂缝扩展。在裂缝生成后，采用 Zhang-Suen 算法提取裂缝骨架并计算裂缝宽度；随后，根据式(4)对裂缝区域的氯离子扩散系数进行修正。整个耦合过程的计算流程如图 6 所示。

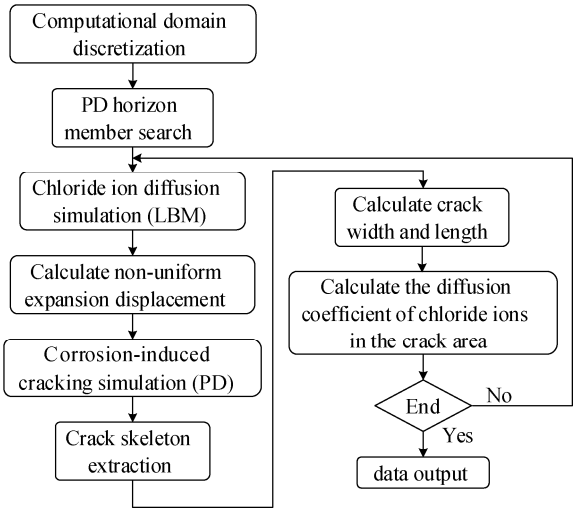


图 6 扩散–力耦合的格子 Boltzmann–近场动力学模型计算流程

Fig. 6 Flow chart for the numerical procedure of coupled LB–PD mechanical–diffusion coupled model analysis

鉴于氯离子浓度场的演化时间尺度主要受扩散系数控制，而 PD 力学场的响应时间尺度则由应力波的传播速度决定，二者在数量级上存在显著差异。为协调这一时间尺度差异，本工作引入了多时间步长积分策略：在 LBM 模块中，采用显式时间积分对扩散过程进行求解；在 PD 模块中，则通过自适应动力松弛法(ADR)实现时间积分。相关实现细节可参考文献[22]。

3 混凝土锈胀裂缝宽度和长度计算方法

3.1 裂缝骨架提取方法

为定量化计算混凝土因锈胀引起的裂缝长度与宽度，采用 Zhang–Suen 细化算法[14, 15]提取裂缝骨架。该算法可有效去除冗余的裂缝边缘节点，保留裂缝主干结构，实现对裂缝几何特征的精确表征。具体步骤如下：

1) 根据计算域内节点的局部损伤值识别裂缝边缘节点，获取裂缝初始轮廓。具体而言，当某节点的损伤值超过设定阈值时，该节点被定义为裂缝边缘节点，并赋予标记值 1，其余节点标记为 0。Yang 等[24]采用扩展离散元方法(EDEM)模拟了岩石

类材料在单轴压缩作用下的裂纹扩展行为。研究表明，当节点损伤值超过 0.38 时，材料中便出现了可见宏观裂缝，揭示了微观损伤积累与宏观裂纹形成之间的临界联系。基于此，本工作将裂缝边缘节点的损伤阈值(d_{cr})设定为 0.38。

2) 通过迭代剔除冗余边缘节点，仅保留裂缝骨架。具体过程为：判断每个裂缝边缘节点是否为骨架节点，若是则予以保留，否则予以剔除。该过程不断重复，直至所有冗余节点被移除，最终提取出结构清晰、连通性良好的裂缝骨架(图 7)。

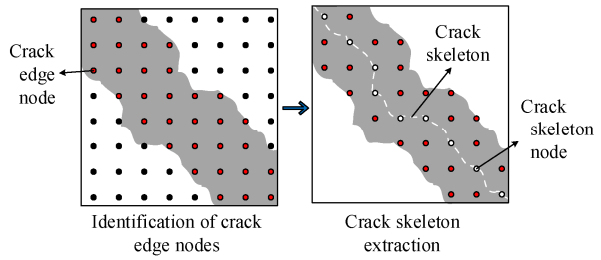


图 7　裂缝边缘节点标记与骨架提取示意图

Fig. 7　Crack edge nodes identification and skeleton extraction

在迭代过程中，通过对裂缝边缘节点周围的 8 个邻近节点进行顺时针“扫描”(图 8)，判断该节点是否仍属于裂缝边缘。当节点满足式(24)所示的条件时，即可将其识别为裂缝边缘节点并予以剔除。

$$\begin{cases} 2\leqslant\sum_{l=1}^{8}n_l\leqslant 6 \\ q=1 \\ n_1\cdot n_3\cdot n_5=0 \\ n_3\cdot n_5\cdot n_7=0 \end{cases} \quad \text{or} \quad \begin{cases} 2\leqslant\sum_{l=1}^{8}n_l\leqslant 6 \\ q=1 \\ n_1\cdot n_5\cdot n_7=0 \\ n_1\cdot n_3\cdot n_7=0 \end{cases} \tag{24}$$

式中：n_l 表示第 l 个节点的节点标记值；q 表示顺时针扫描过程中节点标记值在 0~1 之间的切换次数。

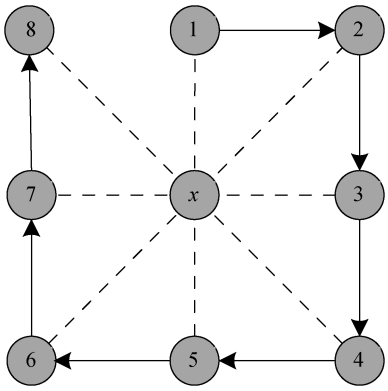


图 8　8 节点领域顺时针扫描示意图

Fig. 8　Schematic illustration of clockwise scanning in an eight-neighborhood

为验证 Zhang–Suen 细化算法在提取裂缝骨架方面的有效性，本工作通过 LB-PD 模型模拟了混凝土的锈胀开裂过程，得到的内部损伤分布如图 9 所示。随后，采用 Zhang–Suen 细化算法根据该损伤分布提取裂缝骨架，提取过程中设置了两个损伤阈值，分别为 d_{cr}=0.38 和 d_{cr}=0。提取后的裂缝骨架如图 10 所示，Zhang-Suen 细化算法能够有效地提取裂缝骨架，并准确反映裂缝的真实分布。

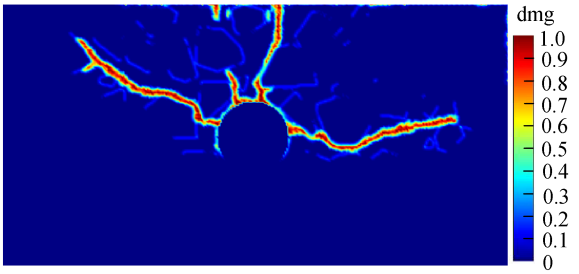
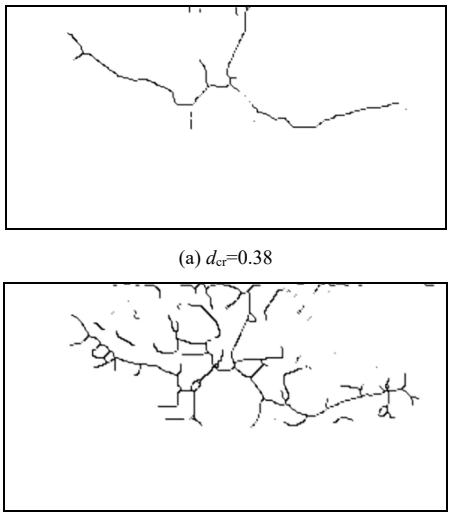


图 9　锈胀引起的混凝土内部损伤分布

Fig. 9　Concrete internal damage caused by rust expansion



(a) d_{cr}=0.38

(b) d_{cr}=0

图 10　不同损伤阈值(d_{cr})下的混凝土锈胀裂缝骨架

Fig. 10　Concrete rust expansion crack skeleton at different damage thresholds (d_{cr})

3.2　裂缝宽度和长度计算方法

裂缝宽度通过累加骨架节点 $\boldsymbol{x}_{cs}$ 与其周围 8 个邻近节点之间的相对合位移来确定(图 11)。

$$l(\boldsymbol{x}_{cs},t)=\frac{1}{8}\left|\sum_{j=1}^{8}\left[\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_j,t)-\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_{cs},t)\right]\cdot\boldsymbol{n}_u\right| \tag{25}$$

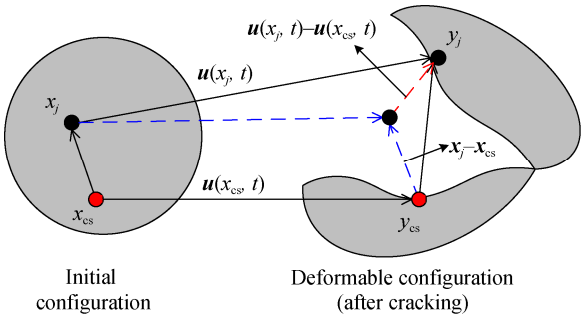
式中：$l(\boldsymbol{x}_{cs},t)$表示节点 $\boldsymbol{x}_{cs}$ 处的裂缝宽度；$\boldsymbol{n}_u$ 表示单位变形向量，可通过式(26)计算。

$$\boldsymbol{n}_u=\frac{\boldsymbol{x}_j+\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_j,t)-\boldsymbol{x}_{cs}-\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_{cs},t)}{\left\|\boldsymbol{x}_j+\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_j,t)-\boldsymbol{x}_{cs}-\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_{cs},t)\right\|} \tag{26}$$

裂纹长度可通过计算相邻裂纹骨架节点间的间距并进行累加来确定。具体计算如式(27)所示

$$L_t=\sum_{q=2}^{N_{cs}}\left\|\boldsymbol{x}_q-\boldsymbol{x}_{q-1}\right\| \tag{27}$$

式中：L_t表示裂缝骨架长度；N_{cs}为裂缝骨架节点总数。



Note: $\boldsymbol{x}$ and $\boldsymbol{y}$ denote the relative position vector and the deformation vector of a material point, respectively; $\boldsymbol{u}$ represents the displacement vector; the subscripts *cs* and *j* refer to the crack skeleton node and its neighboring nodes, respectively.

图 11 裂缝骨架节点及其邻近节点的位置向量与位移向量

Fig. 11 Position and displacement vectors of crack skeleton nodes and their neighboring nodes

4. 模型验证

4.1 半无限区域氯离子扩散问题

在考虑氯离子扩散系数随时间衰减的影响下，半无限区域内的氯离子扩散控制方程可表述为式(28)。

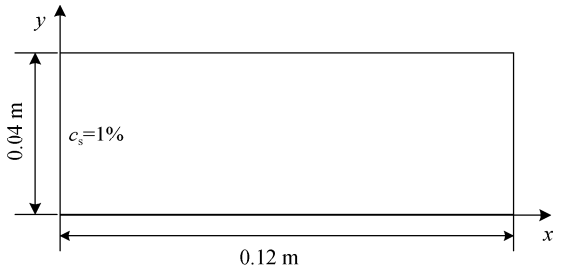
$$\frac{\partial c}{\partial t}=D_0\left(\frac{t_0}{t}\right)^n\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \tag{28}$$

对于如图 12 所示左边界为恒定浓度条件的扩散问题，其解析解可表示为式(29)。

$$c=c_s\left[1-\mathrm{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{\dfrac{g(t)}{1-n}D_0\left(\dfrac{t_0}{t}\right)^n t}}\right)\right] \tag{29}$$

式中：erf 表示误差函数；c_s为左边界氯离子浓度；$g(t)$为时间相关函数。

$$g(t)=\left[\left(1+\frac{t_0}{t}\right)^{1-n}-\left(\frac{t_0}{t}\right)^{1-n}\right] \tag{30}$$



Note: c_s is the concentration at the left boundary.

图 12 半无限区域内氯离子扩散计算模型

Fig. 12 Calculation model of chloride ion diffusion in a semi-infinite region

采用所提出的模型模拟了上述半无限区域内的氯离子扩散过程，其中左边界的氯离子浓度设定为c_s=1%。图 13 展示了不同时刻的氯离子浓度分布的数值解与解析解的对比。结果表明，所建立的数值模型能够较为准确地模拟氯离子的扩散过程。

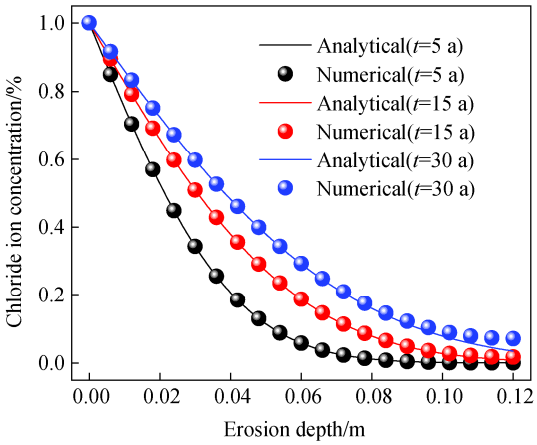


图 13 半无限区域中氯离子扩散问题的数值解与解析解对比

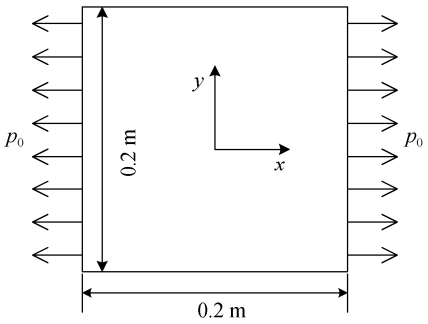
Fig. 13 Comparison between numerical and analytical solutions for chloride diffusion in a semi-infinite domain

4.2 弹性平板拉伸测试

采用所提出的模型模拟了图 14 所示的各向同性平板在拉伸荷载作用下的弹性响应过程。该平板的弹性模量为 E=30 GPa，泊松比 υ=0.3，密度ρ=1800 kg/m^3，施加的拉伸荷载为p_0=2 MPa。对于该问题，在竖向中线(x=0 m)和水平中线(y=0 m)处的位移与应力具有如下解析解：

$$\begin{cases}u_x\left(y=0\right)=\dfrac{p_0}{E}\\ u_y\left(x=0\right)=-\upsilon\dfrac{p_0}{E}\end{cases} \tag{31}$$

$$\begin{cases}\sigma_{xx}=p_0\\ \sigma_{yy}=\sigma_{xy}=0\end{cases} \tag{32}$$

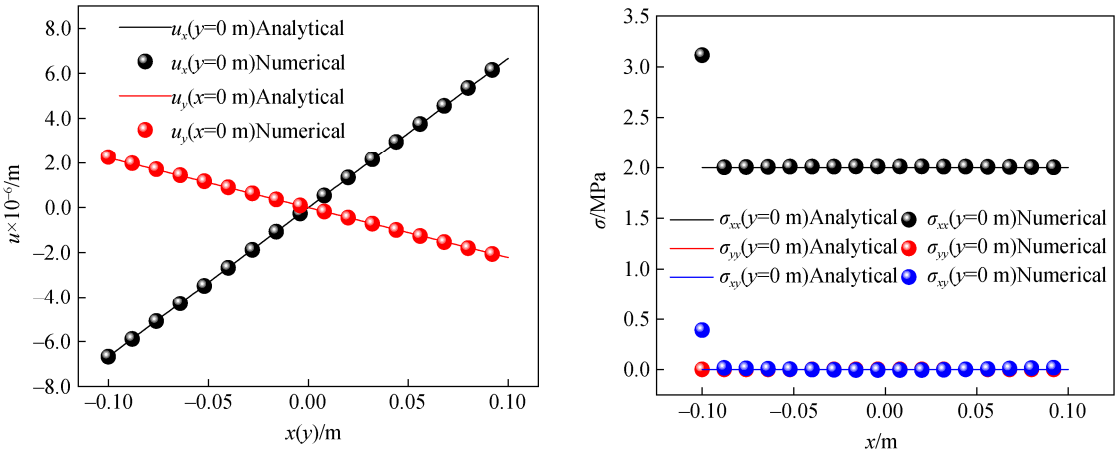


p_0 is the horizontal tensile load.

图 14 弹性平板拉伸示意图

Fig. 14 Schematic diagram of tensile loading on an elastic plate

图 15 对比平板在竖向中线(x=0)和水平中线(y=0)处的位移与应力的数值结果与解析结果。结果表明，数值模拟所得的位移与应力分布均与解析解保持较好的一致性。需要指出的是，由于近场动力学方法的非局部特性，加载边界附近的应力结果与解析结果之间存在一定偏差。



(a) Displacement　　(b) Stress

u_x and u_y denote the horizontal and vertical displacements, respectively, while x and y denote the horizontal and vertical coordinates along the model centerline; σ denotes stress.

图 15　弹性平板问题中位移与应力的解析解与数值解对比

Fig. 15　Comparison between analytical and numerical solutions for displacement and stress in the elastic plate problem

5　混凝土锈胀开裂数值模拟结果

采用本工作提出的 LB–PD 模型对顶部带有 1 根钢筋和 3 根钢筋的混凝土构件的锈蚀胀裂过程进行数值模拟。模拟中，混凝土内部骨料、砂浆以及 ITZ 的 E、v 和 f_t 的参数设置如表 1 所示[25]。

表 1　混凝土各细观组分的力学参数[25]

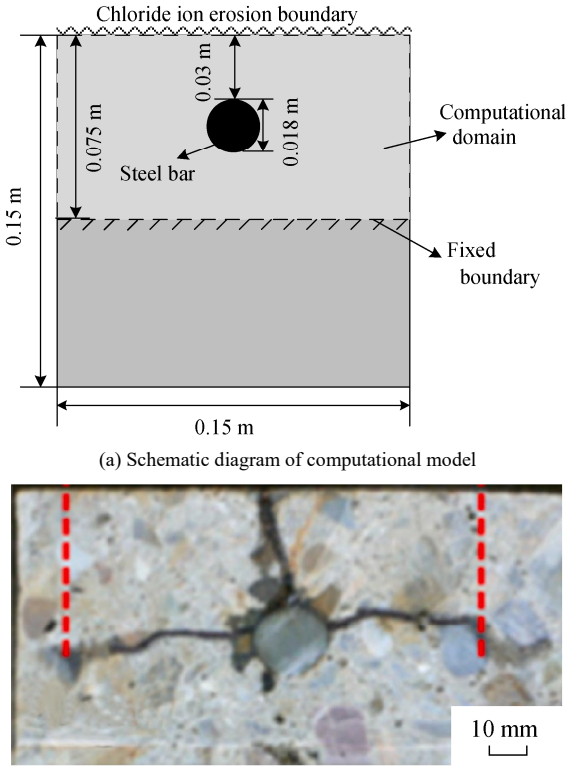
Table 1　Mechanical parameters of material phases in concrete[25]

Component	E/GPa	v	f_t/MPa
Mortar	30	0.22	1.43
Aggregate	70	0.22	15
ITZ	25	0.22	1.2

Note: E is elastic modulus; v is Poisson's ratio; f_t is tensile strength.

5.1　顶部单根钢筋

Tran 等[26]开展了关于氯离子侵蚀作用下钢筋混凝土锈蚀开裂的试验，试件几何尺寸如图 16a 所示。试验中，试件顶部暴露于氯离子溶液中，其余三面采用密封处理。图 16b 为锈胀裂缝的试验观测结果，裂缝主要集中于试件的上部区域。基于该试验现象，为提高计算效率，本工作在数值模拟中仅对试件的上半部分(即图 16a 中虚线框内区域)进行建模，虚线框下部边界施加固定边界条件，顶部边界则设定氯离子浓度为 c_u=3%。



(a) Schematic diagram of computational model

(b) Crack distribution from experimental observations

图 16　计算模型及裂缝观测结果[26]

Fig. 16　Numerical model and experimental crack observations[26]

图 17 展示了氯离子侵蚀过程中混凝土内部裂缝的演化过程。在侵蚀初期(约 15 个月)，混凝土

内部开始出现微裂缝，主要集中分布于钢筋周围。随着侵蚀的进行，裂缝逐渐扩展，最终形成由 1 条竖向和 2 条水平主裂缝构成的裂缝网络。其中，竖向裂缝通常优先由混凝土上表面向内部扩展，并最终贯穿保护层，这一现象也在 Mirzaee 等[8]的数值模拟中被观察到。可以看出，整个裂缝扩展路径主要沿骨料与基体之间的 ITZ 发展。将模拟结果与图 16b 中试验观测到的裂缝分布进行对比，可发现两者具有较高的一致性，进一步验证了模型的有效性。

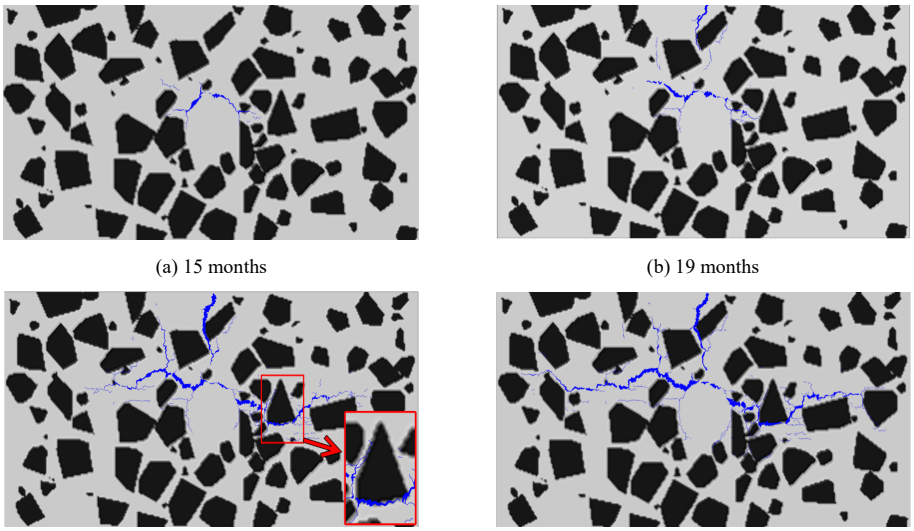
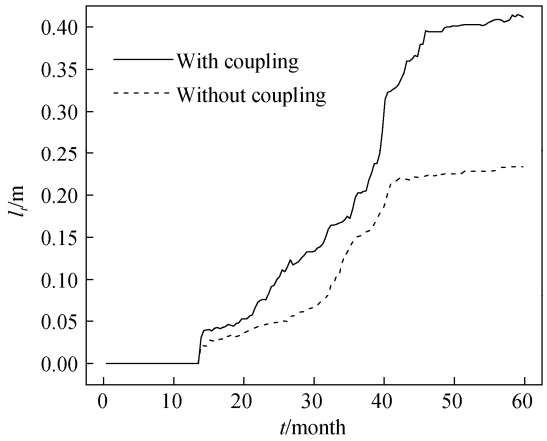


图 17 不同侵蚀时间下的混凝土内部裂缝形态

Fig. 17 Internal crack morphology of concrete under varying chloride exposure durations

为研究氯离子扩散与钢筋锈蚀引起的混凝土膨胀开裂之间的耦合效应，采用所提出的模型分别模拟了考虑与不考虑二者耦合作用下的混凝土锈胀开裂过程。图 18 展示了 2 种情况下裂缝长度随时间的演化趋势。结果表明：尽管 2 种条件下的起裂时间一致，但在耦合情形下，由于氯离子扩散速度更快，裂缝长度的增长明显加快，说明耦合效应显著加速了裂缝的发展过程。



l_r is crack length; t is time.

图 18 裂缝长度随时间的变化曲线

Fig. 18 Time-dependent curves of crack length

5.2 顶部 3 根钢筋

顶部带有 3 根钢筋模型的几何尺寸如图 19 所示，其中上边界设为氯离子侵蚀边界，氯离子浓度为 3%。图 20 展示了氯离子侵蚀持续 68 个月后，混凝土内部的裂缝形态及氯离子浓度分布。从图 20 中可以看出，裂缝主要在钢筋周围起始并向外扩展，形成一条贯穿混凝土保护层的水平主裂缝，以及多条由钢筋周边向四周发散的次生裂缝。浓度云图进一步表明，由于裂缝区域和骨料周围的 ITZ 扩散速率较高，这些区域的氯离子浓度显著高于其他部位。

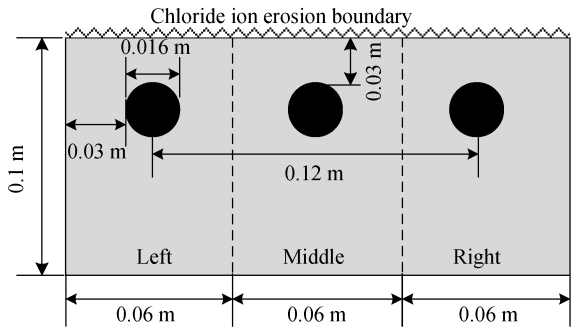
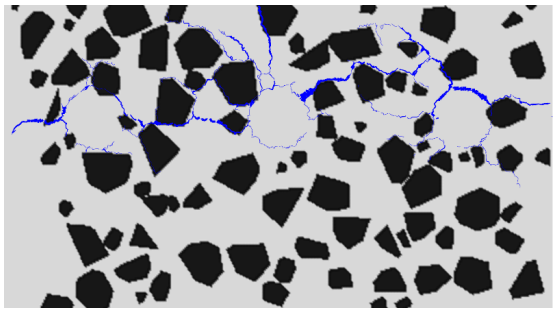
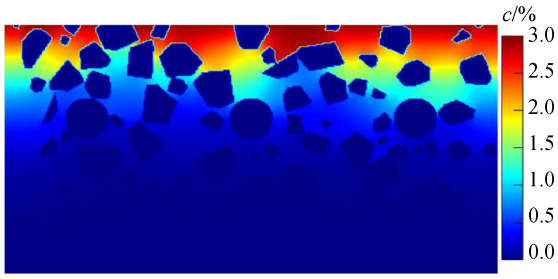


图 19 顶部布置 3 根钢筋的混凝土保护层示意图

Fig. 19 Schematic diagram of the concrete cover with three reinforcing bars arranged at the top



(a) Crack patterns



(b) Distribution of chloride ion concentration

c is chloride ion concentration.

图 20　氯离子侵蚀 68 个月后混凝土内部的裂缝形态与氯离子浓度分布

Fig. 20　Crack patterns and chloride ion concentration distribution in concrete after 68 months of chloride exposure

为分析不同区域裂缝的发展特征，将模型沿水平方向划分为左部、中部和右部 3 个区域，分界线如图 19 中的虚线所示。图 21 显示了各区域裂缝总长度随侵蚀时间的变化。结果表明，中部和右部区域的裂缝起裂时间早于左部区域，且在相同的侵蚀时段内，其裂缝扩展速度明显较快。这一现象可归因于左部区域钢筋周围骨料的较为密集分布，限制了裂缝的扩展。此外，图 22 记录了 3 根钢筋表面氯

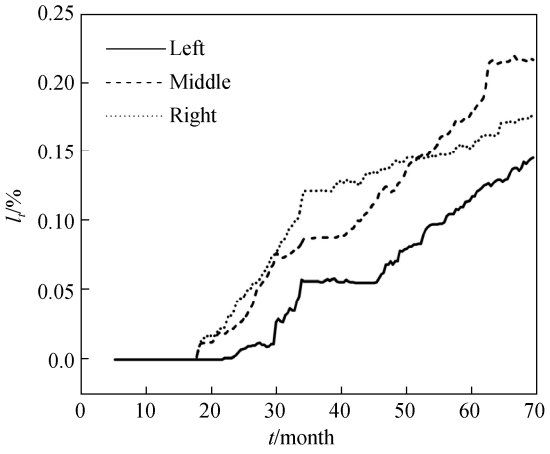
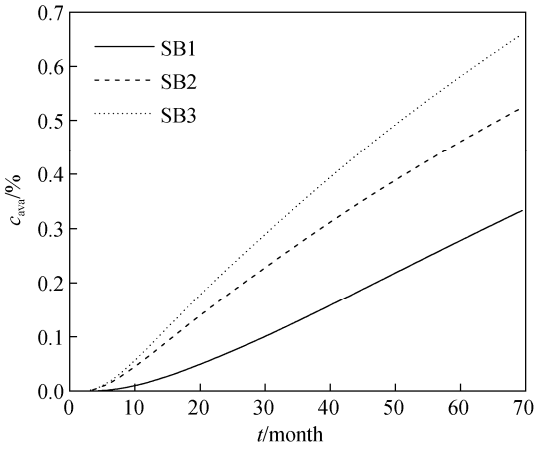


图 21　不同区域内裂缝长度随时间的变化曲

Fig. 21　Time-dependent curves of crack length in different regions



c_{ava} is average chloride concentration on the rebar surface; SB1, SB2, and SB3 denote the left, middle, and right reinforcing bars in Fig. 19, respectively.

图 22　钢筋表面氯离子平均浓度随时间的变化曲线

Fig. 22　Time-dependent curves of average chloride concentration on the rebar surface

离子平均浓度随时间的变化过程。由于中部和右部区域骨料分布相对稀疏，这些区域钢筋表面的氯离子浓度明显高于左部区域，导致钢筋锈蚀程度较为严重，进一步加剧了锈胀裂缝的发展。

6　结论

本工作提出了一种 LB–PD 数值模型，用于模拟混凝土中氯离子扩散与锈胀裂缝扩展的耦合演化过程。模型通过生成–投放法构建细观混凝土结构，结合 PDDO，建立了基于应力的 PD 键断裂准则。模型被用于模拟包含 1 根与 3 根钢筋的混凝土保护层的锈胀开裂过程。主要结论如下：

1) 所提出的模型实现了氯离子扩散与锈胀裂缝扩展的耦合模拟，明确揭示了耦合机制对裂缝演化的加速作用。

2) 模型无需对 ITZ 区域精细建模，便可实现氯离子扩散与混凝土锈胀开裂耦合过程的跨尺度模拟，展示出良好的适应性。

3) 引入 Zhang–Suen 细化算法提取裂缝骨架，并实现了裂缝长度与宽度的定量预测。

4) 仿真结果进一步验证了骨料对裂缝扩展及氯离子扩散的双重阻滞作用，为钢筋锈蚀与裂缝萌生机制提供了细观层面的解释。

需要指出的是，本工作模型目前仅考虑氯离子的扩散行为，尚未涵盖多离子耦合及其化学反应过程。未来可在此基础上发展 LB–PD 数值模型，以便能够更准确评估混凝土结构的耐久性能，并优化相应的防护策略。

参考文献:

[1] 刘镇. 海洋环境下混凝土氯离子渗透性评价[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(11): 2846–2856.
LIU Zhen. J Chin Ceram Soc, 2023, 51(11): 2846–2856.

[2] 元强, 王玉曼, 张凯, 等. 盐雾湿润–干燥循环作用下水泥砂浆氯离子扩散特性[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(11): 2805–2813.
YUAN Qiang, WANG Yuman, ZHANG Kai, et al. J Chin Ceram Soc, 2023, 51(11): 2805–2813.

[3] 王学礼, 李坤洋, 张峰. 混凝土材料的氯离子迁移细观数值模拟[J]. 公路交通科技(应用技术版), 2011(10): 68–71.
WANG Xueli, LI Kunyang, ZHANG Feng. J Hig Tran Rese Devel, 2011(10): 68–71.

[4] 计洌, 刘清风. 硫–氯耦合侵蚀和钙溶蚀作用下混凝土中物质传输与反应机理的数值研究[J]. 硅酸盐学报, 2024, 52(5): 1486–1498.
JI Lie, LIU Qingfeng. J Chin Ceram Soc, 2024, 52(5): 1486–1498.

[5] WANG P G, MO R, ZHOU X M, et al. A chemo-thermo-damage-transport model for concrete subjected to combined chloride-sulfate attack considering the effect of calcium leaching[J]. Constr Build Mater, 2021, 306: 124918.

[6] 梁永钦, 王立成. 混凝土保护层锈胀开裂过程分析的细观刚体弹簧元模型[J]. 计算力学学报, 2017, 34(5): 541–546.
LIANG Yongqin, WANG Licheng. Chin J Comput Mech, 2017, 34(5): 541–546.

[7] CHEN E, LEUNG C K Y. Finite element modeling of concrete cover cracking due to non-uniform steel corrosion[J]. Eng Fract Mech, 2015, 134: 61–78.

[8] MIRZAEE M J, ALAEE F J, HAJSADEGHI M, et al. Numerical modeling of concrete cover cracking due to steel reinforcing bars corrosion[J]. Struct Eng Mech, 2017, 61(6): 693–700.

[9] FANG X R, PAN Z C, CHEN A R, et al. Phase-field method for modeling non-uniform corrosion-induced cracking in concrete[J]. Eng Fract Mech, 2023, 281: 109131.

[10] SILLING S A, EPTON M, WECKNER O, et al. Peridynamic states and constitutive modeling[J]. J Elast, 2007, 88(2): 151–184.

[11] SILLING S A. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces[J]. J Mech Phys Solids, 2000, 48(1): 175–209.

[12] CHEN S Y, DOOLEN G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. Annu Rev Fluid Mech, 1998, 30: 329–364.

[13] 王志良, 张跃, 申林方, 等. 考虑微观结构影响的混凝土界面过渡区裂隙渗流-溶蚀耦合模型[J]. 工程力学, 2021, 38(6): 133–142.
WANG Zhiliang, ZHANG Yue, SHEN Linfang, et al. Eng Mech, 2021, 38(6): 133–142.

[14] DONG J W, CHEN Y M, YANG Z J, et al. A parallel thinning algorithm based on stroke continuity detection[J]. Signal Image Video Process, 2017, 11(5): 873–879.

[15] 华涛, 申林方, 王志良, 等. 基于近场动力学的岩石水力压裂数值模拟及裂隙网络定量分析[J]. 岩土力学, 2024, 45(2): 612–622.
HUA Tao, SHEN Linfang, WANG Zhiliang, et al. Rock Soil Mech, 2024, 45(2): 612–622.

[16] TRUONG Q C, EL SOUEIDY C P, HAWCHAR L, et al. Modelling two-dimensional chloride diffusion in repaired RC structures for sustainable maintenance management[J]. Structures, 2023, 51: 895–909.

[17] 张跃, 申林方, 王志良, 等. 考虑温度时变效应氯离子侵蚀混凝土的格子 Boltzmann 数值模型[J]. 材料导报, 2021, 35(16): 16035–16041.
ZHANG Yue, SHEN Linfang, WANG Zhiliang, et al. Mater Rep, 2021, 35(16): 16035–16041.

[18] CAI Z, ZHANG H, LI Z Y, et al. Peridynamic modeling of seepage in multiscale fractured rigid porous media[J]. Num Anal Meth Geomechanics, 2024, 48(8): 2216–2236.

[19] ZHOU F, CHENG G X. Lattice Boltzmann model for predicting effective thermal conductivity of composite with randomly distributed particles: Considering effect of interactions between particles and matrix[J]. Comput Mater Sci, 2014, 92: 157–165.

[20] 李树忱, 马鹏飞, 王修伟, 等. 基于非局部微分算子的近场动力学及固体材料应力数值模拟[J]. 工程力学, 2022, 39(11): 42–51.
LI Shuchen, MA Pengfei, WANG Xiuwei, et al. Eng Mech, 2022, 39(11): 42–51.

[21] WRIGGERS P, MOFTAH S O. Mesoscale models for concrete: Homogenisation and damage behaviour[J]. Finite Elem Anal Des, 2006, 42(7): 623–636.

[22] ZHANG Y, WANG L C. Mesoscale simulation on thermal cracking in concrete by using a coupled thermal–mechanical lattice Boltzmann-Peridynamic model[J]. Eng Fract Mech, 2025, 320: 111101.

[23] 张芹. 钢筋混凝土氯离子侵蚀与锈胀致裂过程耦合分析方法研究[D]. 南京: 东南大学, 2018.
ZHANG Qin. Study on coupling analysismethod of chloride erosion and steel corrosion expansion in reinforced concrete [D]. Nanjing: Southeast University, 2018.

[24] YANG L, JIANG Y J, LI B, et al. Application of the expanded distinct element method for the study of crack growth in rock-like materials under uniaxial compression[J]. Front Struct Civ Eng, 2012, 6(2): 121–131.

[25] PAL B, RAMASWAMY A. A Meso-scale study to predict high-temperature behavior of concrete structures in a hygral-thermal-chemical-mechanical framework[J]. Constr Build Mater, 2024, 421: 135671.

[26] TRAN K K, NAKAMURA H, KAWAMURA K, et al. Analysis of crack propagation due to rebar corrosion using RBSM[J]. Cem Concr Compos, 2011, 33(9): 906–917.

Multiscale Numerical Simulation of Corrosion-Induced Cracking in Concrete Using a Coupled Lattice Boltzmann–Peridynamic Model

ZHANG Yue, *WANG Licheng*

(State Key Laboratory of Coastal and Offshore Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, Liaoning, China)

Extended Abstract

Introduction In reinforced concrete (RC) structures exposed to chloride salt environments, the internal pore system provides

pathways for chloride ion transport. Chloride ions that penetrate the concrete induce reinforcement corrosion and subsequent expansion, thus leading to concrete cracking. The newly formed cracks further accelerate chloride penetration and exacerbate structural deterioration. Numerical approaches provide an effective way for analyzing these coupled processes. However, conventional methods such as the finite element method, the extended finite element method, and the phase-field method are based on local theories, which makes it difficult to accurately capture displacement discontinuities during crack evolution. Consequently, the quantitative prediction of crack length and width remains a considerable challenge. Moreover, despite the development of numerous models, the most existing approaches are limited to individual physical processes and cannot fully represent their interactions. To address these limitations and investigate the corrosion-induced cracking behavior of concrete, it is essential to establish a coupled model of chloride diffusion and corrosion-induced cracking, enabling the quantitative prediction of the length and width of internal corrosion-induced cracks.

Methods In this study, a diffusion–mechanics coupled lattice Boltzmann–peridynamic (LB–PD) model was proposed to simulate corrosion-induced cracking in concrete during chloride ion diffusion. A generation–placement method was employed to construct the concrete meso-structure, incorporating aggregates, mortar, and the interfacial transition zone (ITZ). Chloride ion transport within cracked concrete was simulated by using the lattice Boltzmann method (LBM), where cross-scale transport between the concrete matrix and ITZ was achieved *via* adjusting the LBM particle distribution functions. Meanwhile, corrosion-induced cracks at different scales were captured *via* categorizing the bonds in the peridynamic (PD) model into three distinct types, namely mortar bonds, aggregate bonds, and ITZ bonds. The processes both were accomplished without the need for additional mesh refinement. A stress-based PD bond failure criterion was further established based on the Peridynamic differential operator (PDDO). To accurately characterize the crack morphology, the Zhang–Suen thinning algorithm was introduced to extract the skeleton of corrosion cracks, and the crack length and width were quantitatively evaluated based on the crack skeleton.

Results and discussion The proposed LB–PD model is employed to simulate corrosion-induced cracking in concrete cover for specimens containing single and three reinforcing bars. In the single-reinforcement case, the simulations are conducted with and without considering the coupling between chloride diffusion and reinforcement corrosion. The results indicate that the coupling significantly accelerates crack propagation, although the crack initiation time remains largely unaffected. Cracks initiate predominantly around the reinforcement and extend outward along ITZ between aggregates and the matrix, highlighting a key role of microstructural heterogeneity in controlling crack paths.

For the specimen with three reinforcements, cracks similarly initiate near the reinforcements and propagate to form a network of primary and secondary cracks. The simulations reveal that the spatial distribution of aggregates affects crack evolution. The regions with sparse aggregate distribution exhibit a faster crack growth and a more severe reinforcement corrosion, whereas denser aggregate arrangements constrain crack propagation and reduce corrosion severity. This heterogeneity also leads to a non-uniform chloride concentration on reinforcement surfaces, further affecting the initiation and development of corrosion-induced cracks.

Conclusions The results demonstrated that the proposed model could effectively capture the coupled processes of chloride transport and reinforcement corrosion, reproducing the multi-scale evolution of cracks in reinforced concrete. The model also provided insights into the interactions between microstructural features, chloride diffusion, and mechanical cracking, which were critical for understanding the degradation mechanisms of concrete structures under chloride attack. Cross-scale simulation of chloride transport and corrosion-induced cracking could be achieved without detailed modeling of ITZ, indicating a good adaptability of the model. Furthermore, the Zhang–Suen thinning algorithm was employed to extract crack skeletons, enabling a quantitative prediction of crack length and width. The simulations also confirmed the dual restraining effect of aggregates on both crack propagation and chloride diffusion, providing a mesoscopic-level explanation for reinforcement corrosion and crack initiation mechanisms. Noted that the current model could consider only chloride diffusion and did not account for multi-ion interactions or associated chemical reactions. Future work could extend the model to a diffusion–chemical–mechanical multi-physics framework to more accurately evaluate the durability of concrete structures and optimize protective strategies.

Key words lattice Boltzmann method; peridynamic; corrosion-induced cracking; chloride diffusion