文章编号:1007－6735(2026)05－0598－10　DOI: 10.13255/j.cnki.jusst.20250804001

混凝土构件中氯离子宏观扩散过程的近场动力学模拟

吉兆瑞，　彭　斌，　郭文东，　孙鸣洋
（上海理工大学 环境与建筑学院，上海 200093）

摘要： 为定量分析氯离子在既有混凝土构件中的宏观扩散过程，基于近场动力学微分算子(peridynamic differential operator, PDDO)建立数值模型。首先，引入PDDO建立Fick第二定律的离散求解格式，并验证求解结果的可靠性。然后，通过调整总体矩阵系数来反映混凝土材料中已知或随机缺陷的影响，通过基于点集的空间离散方式来构建复杂混凝土构件的几何模型，通过对不同边界条件的处理来反映工程实际中的复杂侵蚀工况，进而对自然环境下混凝土氯离子扩散试验进行模拟和结果验证。最后，分析缺陷、扩散系数、边界条件、构件几何形状等因素对宏观扩散过程的影响。研究表明，基于PDDO的数值模型可有效量化氯离子在既有混凝土构件内的宏观扩散过程，为混凝土结构耐久性评估和寿命预测提供数据支撑。

关键词： 氯离子；宏观扩散；混凝土构件；近场动力学微分算子；模拟
中图分类号： TU 528　　**文献标志码：** A

Peridynamic simulation of the macroscopic diffusion process of chloride ions in concrete members

Ji Zhaorui,　Peng Bin,　Guo Wendong,　Sun Mingyang
(*School of Environment and Architecture, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China*)

Abstract: To quantitatively analyze the macroscopic diffusion process of chloride ions in existing concrete members, a numerical model was established based on the peridynamic differential operator (PDDO). Firstly, the PDDO was introduced to construct a discrete solution scheme for Fick's second law, and the reliability of the solution results was verified. Then, the influence of deterministic or

收稿日期: 2025−08−04
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51978401)
第一作者: 吉兆瑞(2002—)，男，硕士研究生．研究方向：结构工程．E-mail：242291859@st.usst.edu.cn
通信作者: 彭　斌(1977—)，男，教授．研究方向：既有结构性能评价与修复、工程计算机仿真．E-mail：BinPeng@usst.edu.cn

引文格式: 吉兆瑞，彭斌，郭文东，等．混凝土构件中氯离子宏观扩散过程的近场动力学模拟[J]．上海理工大学学报，2026，48(5)：598-607.
Citation: Ji Zhaorui, Peng Bin, Guo Wendong, et al. Peridynamic simulation of the macroscopic diffusion process of chloride ions in concrete members[J]. Journal of University of Shanghai for Science and Technology, 2026, 48(5): 598-607.

random defects in concrete materials was reflected by adjusting the coefficients of the global matrix.The geometric models of complex concrete members were constructed through the point-set-based spatial discretization method, and complex erosion conditions in practical engineering were reflected by processing different boundary conditions. Furthermore, the chloride ion diffusion test of concrete under natural environments was simulated, and the simulation results were verified. Finally, the effects of defects, diffusion coefficients, boundary conditions, and member geometric shapes on the macroscopic diffusion process were analyzed. The results show that the numerical model based on PDDO can effectively quantify the macroscopic diffusion process of chloride ions in existing concrete members, providing data support for the durability evaluation and service life prediction of concrete structures.

Keywords: *chloride ions*; *macroscopic diffusion*; *concrete members*; *peridynamic differential operator*; *simulation*

氯离子在既有混凝土构件中传输至钢筋表面导致锈蚀发生，是结构耐久性下降的重要原因[1-4]。我国海岸沿线的盐雾环境、西部大面积的盐渍土环境和广泛使用过除冰盐的工程实际，为发生氯离子侵蚀提供了充分条件，对量大面广的沿海和高原建筑、高铁线路、码头、跨海大桥、防波堤以及海底隧道等重要基础设施的耐久性不利[5-6]。因此，需要定量分析氯离子在既有混凝土构件中的传输过程，为结构耐久性分析与寿命预测提供基础数据。

表观扩散是氯离子在混凝土中传输的宏观机制，可用 Fick 第二定律及其修正模型描述[7-11]。其形式简单、意义明确，可通过模型中的参数反映其他传输机制的耦合影响，能够有效地解决工程问题[12-14]。但进行定量分析时，混凝土材料中固有的孔隙和微裂缝（统称缺陷）导致求解域不连续，混凝土构件的不同形式导致求解域几何形状多变，环境的不同作用导致边界条件复杂，这些宏观特征使该定律的解析解无法适用，需要通过数值方法求解，包括有限差分法、有限体积法[12]、有限元法[15-16] 等。这些方法应用时需将求解域等效为连续介质或在指定位置具有少量缺陷的介质，与既有混凝土材料和构件差别较大；另外，这些方法将求解域离散为网格，对于复杂的几何形状较难适应，求解结果具有明显的网格依赖性，差分方法也较难满足以积分形式表达的守恒原理[17]。

在介质（求解域）非连续的条件下，采用非局部的数值方法求解微分方程具有优势[18-19]；在求解域几何形状和边界条件复杂的情况下，基于点云的离散格式非局部数值方法比基于网格的离散式局部方法具有更好的适应性[20]。已有学者采用非局部的键基近场动力学（bond-based peridynamics, BBPD）方法，在细观尺度对于饱和混凝土中氯离子的扩散过程进行了深入分析[21-23]。基于近场动力学微分算子（peridynamic differential operator, PDDO）的方法[24]，具有上述近场动力学（peridynamics, PD）方法的特征和优势：不需要介质连续性的假定；引入物质点之间的非局部（非接触）作用，用邻域内差分的加权平均表示微分，从而将微分方程转化为积分方程；能够以统一的格式计算域内光滑、连续或不连续处的导数值。另外，该方法还比其他 PD 的实现方式更为灵活：允许不规则的近场范围，对边界不需要专门修正处理；计算过程保留原宏观参数及其物理意义，不引入难以标定的细观参数[25-26]。

本文尝试应用 PDDO 方法，基于修正后的 Fick 第二定律量化氯离子的宏观扩散过程。首先简要介绍 PDDO 的构造方法，然后在理想条件下模拟三维扩散过程，并通过与解析解对比验证基于 PDDO 方法的可靠性。在此基础上，考虑混凝土材料非连续、扩散区域几何形状复杂和扩散边界条件多样等工程因素，量化工程实际中混凝土构件氯离子的宏观扩散过程。最后，基于 PDDO 模拟结果，分析混凝土构件中氯离子扩散的特点。结果说明，本文的方法能够为解决工程问题提供一种有效的量化分析手段。

1 Fick第二定律的近场动力学微分算子离散求解格式

1.1 近场动力学微分算子

如图1所示，求解域可以离散为PD点集。PD点$\boldsymbol{x}(x_1,x_2,x_3)$在其影响域$\boldsymbol{H_x}$（灰色阴影区域）内有多个成员点，$\boldsymbol{x}$与任意一个成员点$\boldsymbol{x}'(x_1',x_2',x_3')$之间无论是否接触，都通过键相互作用。键的初始长度为两点之间的初始相对位置矢量$\boldsymbol{\xi}=(\xi_1,\xi_2,\xi_3)=(x_1'-x_1,x_2'-x_2,x_3'-x_3)$的模，影响域$\boldsymbol{H_x}$的特征长度（半径）$\delta$称为近场范围。

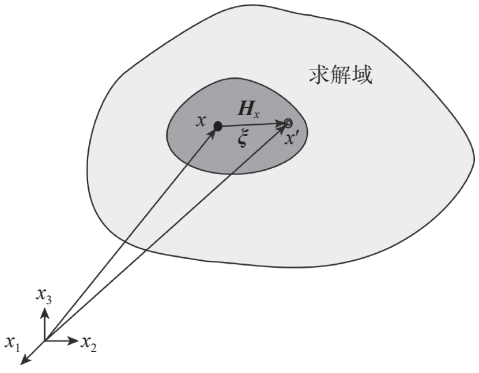


图1 求解域的PD离散

Fig. 1 PD discretization of the solution domain

为了构造场函数$f(\boldsymbol{x})$微分算子的PD形式，先将其在点$\boldsymbol{x}$处进行n阶Taylor展开并忽略余项，可得：

$$f(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\xi})=\sum_{n_1=0}^{n}\sum_{n_2=0}^{n-n_1}\sum_{n_3=0}^{n-n_1-n_2}\frac{1}{n_1!n_2!n_3!}\xi_1^{n_1}\xi_2^{n_2}\xi_3^{n_3}\cdot\frac{\partial^{n_1+n_2+n_3}f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1^{n_1}\partial x_2^{n_2}\partial x_3^{n_3}} \tag{1}$$

式中：$f(\boldsymbol{x})$为场函数；$\boldsymbol{x}$为空间位置坐标；n_1、n_2、n_3分别是忽略余项后在x_1、x_2、x_3维度上展开的最高阶数。

再构造一个PD函数$g_n^{p_1p_2p_3}(\boldsymbol{\xi})$，使其具有如下正交性：

$$\frac{1}{n_1!n_2!n_3!}\int_{\boldsymbol{H_x}}\xi_1^{n_1}\xi_2^{n_2}\xi_3^{n_3}g_n^{p_1p_2p_3}(\boldsymbol{\xi})\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_3=\delta_{n_1p_1}\delta_{n_2p_2}\delta_{n_3p_3} \tag{2}$$

式中：$g_n^{p_1p_2p_3}(\boldsymbol{\xi})$为PD函数；$p_1$、$p_2$、$p_3$为微分算子在$x_1$、$x_2$、$x_3$方向上的阶数，且$0\leqslant p_1+p_2+p_3\leqslant n$；$\delta_{np}$为Kronecker符号。

将式(1)左右两边同时乘以PD函数，并在影响域内积分，由正交性可得到：

$$\frac{\partial^{p_1+p_2+p_3}f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1^{p_1}\partial x_2^{p_2}\partial x_3^{p_3}}=\int_{\boldsymbol{H_x}}f(x_1',x_2',x_3')g_n^{p_1p_2p_3}(\boldsymbol{\xi})\mathrm{d}V \tag{3}$$

式中，$\mathrm{d}V=\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_3$表示成员点$(x_1',x_2',x_3')$代表的微体积。

式(3)中将微分算子以积分的形式表达，称为PDDO。当$\boldsymbol{H_x}$内成员点的数量增加，同时近场范围δ减少时，算子收敛于一般的局部形式。PDDO将场函数在其定义域内任意点处的微分表示为该点近场范围内成员点函数值的加权组合。因此，PDDO能够以统一的方式求得连续或不连续场函数的微分，对于求解非匀质、非连续的混凝土中的扩散问题提供了便利；由于其引入非局部作用，还能够以统一方式求解微观和宏观尺度的问题。

PD函数可构造为多项式形式：

$$g_n^{p_1p_2p_3}(\boldsymbol{\xi})=\sum_{q_1=0}^{n}\sum_{q_2=0}^{n-q_1}\sum_{q_3=0}^{n-q_1-q_2}a_{q_1q_2q_3}^{p_1p_2p_3}\cdot\omega_{q_1q_2q_3}(|\boldsymbol{\xi}|)\xi_1^{q_1}\xi_2^{q_2}\xi_3^{q_3} \tag{4}$$

式中：$a_{q_1q_2q_3}^{p_1p_2p_3}$为待定系数；$|\boldsymbol{\xi}|$为相对位置矢量$\boldsymbol{\xi}$的模；$\omega_{q_1q_2q_3}(|\boldsymbol{\xi}|)$为权函数。

权函数是材料物理特征参数，反映了物质点间相互作用的强度，为处理求解域的不连续提供了理论基础。根据其统计力学意义和需要满足的非负性、归一性条件，本文选取的形式为[24]

$$\omega(|\boldsymbol{\xi}|)=\pi^{-\frac{l}{2}}\left(\frac{s}{\delta}\right)^{l}\exp\left(-\frac{s^2}{\delta^2}|\boldsymbol{\xi}|^2\right) \tag{5}$$

式中：l为问题的维度数，l=1、2或3；$s>0$为形状参数。

为求得待定系数$a_{q_1q_2q_3}^{p_1p_2p_3}$，可将式(4)代入式(2)，整理后得到以下的线性方程组：

$$\sum_{q_1=0}^{n}\sum_{q_2=0}^{n-q_1}\sum_{q_3=0}^{n-q_1-q_2}A_{(n_1,n_2,n_3)(q_1,q_2,q_3)}a_{q_1q_2q_3}^{p_1p_2p_3}=b_{n_1n_2n_3}^{p_1p_2p_3} \tag{6}$$

式中：形状系数$A_{(n_1,n_2,n_3)(q_1,q_2,q_3)}=\int_{\boldsymbol{H_x}}\omega_{q_1q_2q_3}(|\boldsymbol{\xi}|)\cdot\xi_1^{n_1+q_1}\xi_2^{n_2+q_2}\xi_3^{n_3+q_3}\mathrm{d}\xi_1\mathrm{d}\xi_2\mathrm{d}\xi_3$；右端项$b_{n_1n_2n_3}^{p_1p_2p_3}=n_1!n_2!n_3!\cdot\delta_{n_1p_1}\delta_{n_2p_2}\delta_{n_3p_3}$。

求解式(6)得到所有待定系数$a_{q_1q_2q_3}^{p_1p_2p_3}$后，和式(5)一起代入式(4)中可确定PD函数，进而由式(3)可确定微分算子的PDDO形式。应注意，当求导阶数n增加时，式(6)定义的形状系数矩阵将趋于病态，舍入误差显著。为在合理的计算时间内实现收敛和足够的精度，应保证近场范围大小合适。

1.2 Fick定理的PDDO空间离散格式

描述氯离子在饱和混凝土中瞬态扩散过程的Fick第二定律为

$$\frac{\partial c(x_1,x_2,x_3,t)}{\partial t}=D\left[\frac{\partial^2 c(x_1,x_2,x_3,t)}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2 c(x_1,x_2,x_3,t)}{\partial x_2^2}+\frac{\partial^2 c(x_1,x_2,x_3,t)}{\partial x_3^2}\right] \tag{7}$$

式中：c 为氯离子质量分数；D 为氯离子在混凝土中的表观扩散系数；$x_i(i=1,2,3)$为空间坐标；t 为时间。

其定解条件包括初始条件和边界条件。初始条件为

$$c(x_1,x_2,x_3,0)=c_0 \tag{8}$$

边界条件为

$$c(\bar{x}_1,\bar{x}_2,\bar{x}_3,t)=\bar{c}(t) \tag{9}$$

式中：c_0 为初始质量分数；$\bar{x}_i(i=1,2,3)$为求解域边界的空间坐标；$\bar{c}(t)$为边界上测定的氯离子质量分数。

取 3 阶 Taylor 展开将式 (7) 中的空间微分算子表示为 PDDO 形式，则对域内任一位置$\boldsymbol{x}(x_1,x_2,x_3)$可得到如下微分–积分方程：

$$\frac{\partial c(x_1,x_2,x_3,t)}{\partial t}=D\int_{\boldsymbol{H}_x} c(x_1',x_2',x_3',t)[g_3^{200}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)+g_3^{020}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)+g_3^{002}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)]\mathrm{d}V \tag{10}$$

将空间域离散为 PD 点集，则式 (10) 离散为

$$\frac{\partial c(x_1,x_2,x_3,t)}{\partial t}=D\sum_{i=1}^{N} c(x_{i1},x_{i2},x_{i3},t)\cdot[g_3^{200}(\xi_{i1},\xi_{i2},\xi_{i3})+g_3^{020}(\xi_{i1},\xi_{i2},\xi_{i3})+g_3^{002}(\xi_{i1},\xi_{i2},\xi_{i3})]V_i \tag{11}$$

式中：N 为 PD 点 $\boldsymbol{x}$ 近场范围内成员点的总数；x_{i1}、x_{i2}、x_{i3}为其第 i 个成员点的坐标；ξ_{i1}、ξ_{i2}、ξ_{i3}为其与第 i 个成员点间初始相对位置矢量的分量；V_i 为第 i 个成员点的代表体积。

每个空间离散的 PD 点均可建立式 (11)，将对应所有离散点的方程联立可得

$$\frac{\partial}{\partial t}c=\boldsymbol{T}c \tag{12}$$

式中：c 为各离散点上氯离子质量分数组成的 $M\times1$阶列向量；$\boldsymbol{T}$ 为式 (11) 右端计算结果组成的 $M\times M$阶系数矩阵；M 为离散点的总数。

1.3　时域差分求解

在时间域对式 (12) 进行差分，可得

$$\frac{c^{t+\Delta t}-c^t}{\Delta t}=\boldsymbol{T}c^{t+\Delta t}$$

即

$$(\boldsymbol{I}-\Delta t\boldsymbol{T})c^{t+\Delta t}=c^t \tag{13}$$

式中：$c^{t+\Delta t}$、c^t分别为$t+\Delta t$、t时刻的氯离子质量分数列向量，Δt为时间步长；$\boldsymbol{I}$为$M\times M$阶单位矩阵。

采用拉格朗日乘子法引入边界条件，再根据式 (8)，可逐步求解式 (13)。在每时步的计算中，本文采用 Intel 数学核心函数库（Intel math kernel library, MKL）实现共享内存或分布式内存上的异构并行计算，有效提高求解式 (6) 和式 (13) 的效率。图 2 为求解氯离子宏观扩散问题的流程。

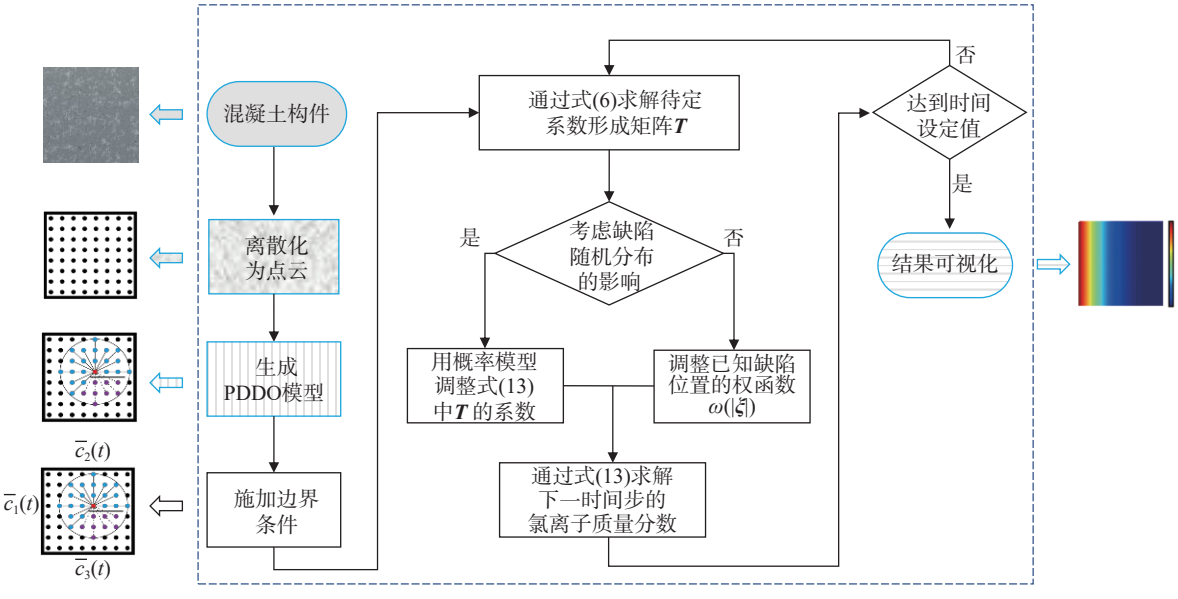


图 2　氯离子宏观扩散过程的 PDDO 模拟

Fig. 2　PDDO simulation of the macroscopic diffusion process of chloride ions

2 PDDO 离散求解格式的验证

2.1 近场范围的确定

近场范围δ综合反映了材料微观特征和所求解问题的特点，其确定的积分范围代表了微观特征对于宏观性能的跨尺度影响[27-28]。

在空间离散求解时，δ过小将导致邻域内成员点过少，式 (6) 定义的形状系数矩阵病态，还可能产生不真实的零能变形模式；δ过大将导致计算量大幅增加而精度未必改善。根据文献 [29] 的研究，由物理问题或材料特性初步确定δ，然后根据所需的精度，选择一个合适的离散点距离，使得倍数在 3～4 的范围内。对于扩散微分方程，经过试算校正，可取δ为 4 倍的离散点间距。

2.2 理想条件下基于 PDDO 的扩散分析

图 3(a) 为三面（左侧面、底面和背面）暴露在氯盐环境中的立方体试块，其尺寸为 150 mm×150 mm×150 mm，暴露面氯离子质量分数为 5.0%，扩散系数为 3.00×10^{-6} mm^2/s。将试件离散为间距 6 mm 的 PD 点，每个点的代表体积为 216 mm^3，如图 3(b) 所示。

本例形状规则、边界条件简单，如假定求解域连续，易得到扩散方程式 (7) 的解析解为[12]

$$c(x_1,x_2,x_3,t)=c_0\left(1-\mathrm{erf}\left(\frac{x_1}{2\sqrt{Dt}}\right)\mathrm{erf}\left(\frac{x_2}{2\sqrt{Dt}}\right)\mathrm{erf}\left(\frac{x_3}{2\sqrt{Dt}}\right)\right) \tag{14}$$

式中，$\mathrm{erf}(\cdot)=\dfrac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\cdot}\mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t$为误差函数。

原点取在模型左下角，在 $x=75$ mm、$y=75$ mm 处沿 z 轴方向的计算结果如图 3 (c) 所示。

实际上，可以证明随近场范围缩小（同时成员点数量不变或增加），PD 解收敛于一般局部理论的解析解[24, 30]。因此，用基于 PDDO 的方法模拟混凝土中氯离子的扩散过程具有可靠的理论基础。

3 基于 PDDO 的混凝土中氯离子宏观扩散过程模拟

工程实际中，混凝土表观扩散系数随时间变化，构件形状和侵蚀工况复杂，且内部存在孔隙、微裂缝等缺陷。这些因素使扩散过程明显偏离上节的定解条件，因而难以获得解析解，但此

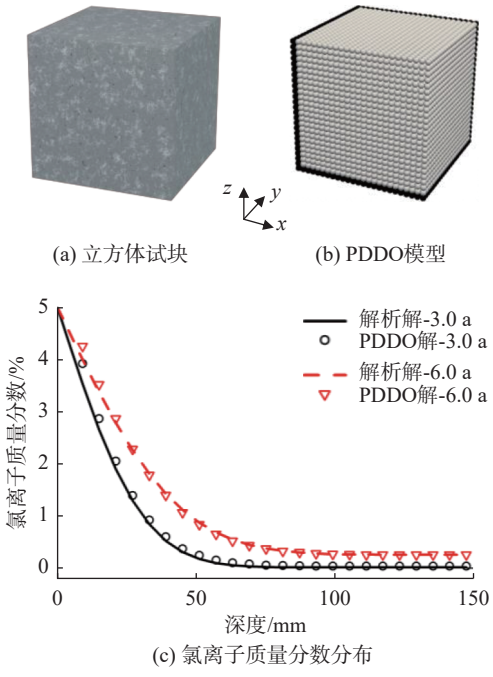


图 3 氯离子扩散的三维模型及计算结果

Fig. 3 3D model for chloride ions diffusion and the calculation results

时 PDDO 模型仍能对实际工程进行模拟。以暴露在氯盐环境中的混凝土板为例来说明。如图 4 所示，忽略板厚方向的影响，板侧边以不同方式暴露在氯盐环境中。氯离子（初始）表观扩散系数为 3.00×10^{-6} mm^2/s。将板离散为间距 2 mm 的 PD 点，每个点的代表面积为 4 mm^2。

3.1 扩散系数时变规律的影响

表观扩散系数是多种传输机制的宏观表达，具有明显的时变特性，可用式 (15) 表示[31]。

$$D=D_{\mathrm{R}}\left(\frac{t_{\mathrm{R}}}{t}\right)^m \tag{15}$$

式中：D_{R} 为初始（参考）表观扩散系数；t_{R} 为参考龄期，t_{R} 取 1.0 a。

根据文献 [31] 的研究，劣化系数采用经验（误差补函数）模型根据氯离子分布曲线进行评估，m=0.19。该值通过现场测量进行校准，并已包含缺陷的影响。图 5 为按式 (15) 考虑表观扩散系数时变规律的计算结果。$c(0,y,t)=0.5\%$为指定 $x=0$ mm 处的氯离子质量分数等于 0.5%。

3.2 复杂边界条件的影响

由于环境条件、构件暴露于侵蚀环境中的方式和侵蚀保护措施的不同，工程实际中存在不同的侵蚀表面。对于表面氯离子质量分数已知或按已知规律变化的情况，可抽象为 Fick 第二定理的 Dirichlet 边界条件；对于穿越表面的氯离子通量按

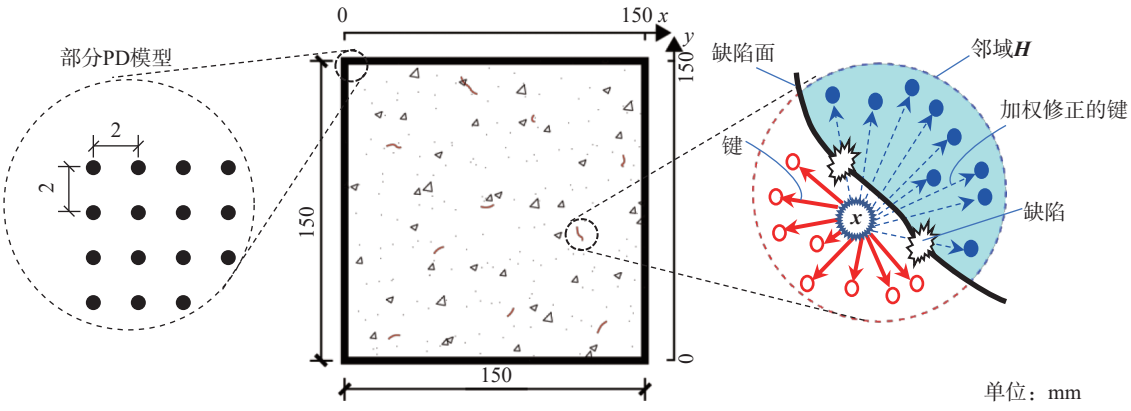
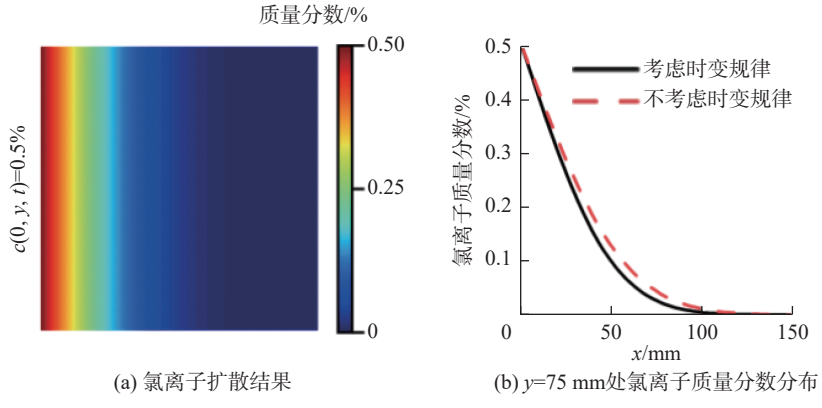


图 4　混凝土板的 PD 模型

Fig. 4　PD model of a concrete slab



(a) 氯离子扩散结果　　(b) y=75 mm处氯离子质量分数分布

图 5　扩散系数时变的影响（t=10 a）

Fig. 5　Influence of time-varying diffusion coefficient (t = 10 a)

已知规律变化的情况，可抽象为 Fick 第二定理的 Neumann 边界条件。在基于 PDDO 计算模型式 (13) 中，可基于拉格朗日乘子法，以统一的格式引入上述两类边界条件[24]。图 6 为考虑多种边界条件的计算结果。边界条件 1 为 Fick 第二定理的 Dirichlet 边界条件；边界条件 2 为 Fick 第二定理的 Neumann 边界条件。$c(150,y,t)=0.5\%$为指定 x=150 mm 处的氯离子质量分数等于 0.5%；$c(x,0,t)=0.5\%$为指定 y=0 mm 处的氯离子质量分数等于 0.5%；$\dfrac{\partial c}{\partial y}(x,150,t)=0$为氯离子质量分数在 y=150 mm 方向上的变化率等于 0。

3.3　几何形状的影响

PDDO 将求解域离散为点云而非网格，对于求解域有良好的适应性，几乎不受其几何形状复杂性的影响，可以有效模拟凹、凸多面体和单、复连通域。同时，PDDO 放松了一般 PD 模型中近场范围必须绕成员点中心对称的限制，也无需像部分无网格方法一样需要对边界点进行特殊处理，进一步提高了建模的灵活性。图 7 为对非规则区域的计算结果。

3.4　缺陷的影响

在模拟氯离子扩散问题时，孔隙和微裂缝等缺陷可统一抽象为求解域的不连续。不连续在整个求解域内多处存在，该特征可通过调整 PDDO 中权函数或式 (13) 中矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的系数来反映。

讨论少量已知位置缺陷的影响时，可在模型中相应位置设置缺陷面。如图 8 所示：当 PD 点和其成员点之间的键穿越缺陷时，根据缺陷中溶液或空气对扩散的阻断、延缓或加速作用，修改该键对应的权函数值。

讨论缺陷的随机分布规律对于宏观扩散过程的影响时，可直接利用 PDDO 离散得到的式 (13) 中的矩阵 $\boldsymbol{T}$。根据宏观扩散方程的物理意义，$\boldsymbol{T}$ 中的每个系数 t_{ij} 表示了物质点 i 和其第 j 个成员点之间的扩散影响强度[12]。因此，可根据缺陷的随机分布规律指定概率模型，抽样生成系数以调整 t_{ij}。对质量正常的混凝土，缺陷体积与构件相比不

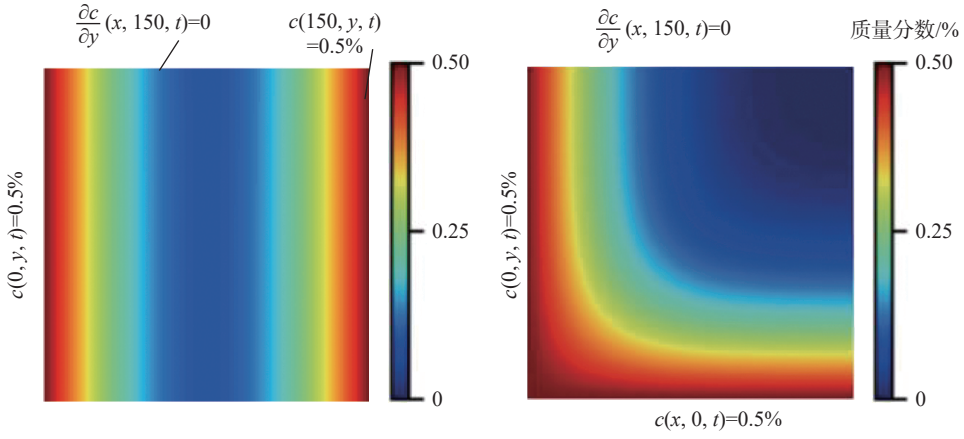


图 6 复杂边界条件的影响 (t = 10 a)

Fig. 6 Influence of complex boundary conditions (t = 10 a)

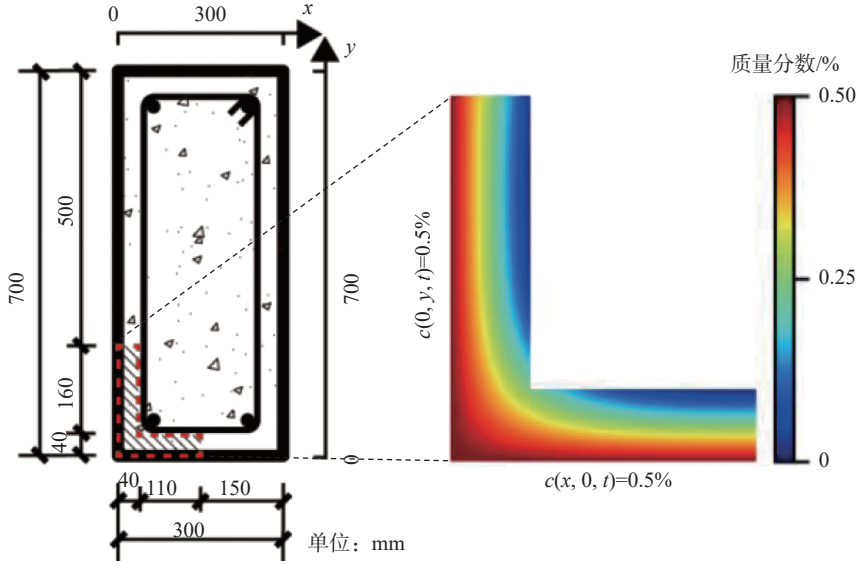


图 7 几何形状的影响 (t = 10 a)

Fig. 7 Influence of geometry (t = 10 a)

大，因此调整幅度不会导致 $\boldsymbol{T}$ 病态。

以上两种方式，均不会提高模型离散的复杂性，不需要随计算过程重新进行离散，也不会增加计算次数，因此不增加整体累积误差。

图 8(a)、(b) 分别为指定缺陷位置和考虑缺陷随机分布影响的计算结果。对于材料均匀的理想混凝土介质，其内部扩散路径通畅，因此，调整系数的基准均值应设为 1.0。标准差量化了混凝土不均匀性的程度，标准差的值越大，表示材料内部缺陷的随机波动越剧烈，对扩散过程的影响也越显著。均值和标准差是根据不同环境条件下的混凝土利用正态分布概率模型调整计算得到的。采用均值为 1、标准差为 5×10^{-5} 的正态分布概率模型抽样生成系数以调整 t_{ij}。

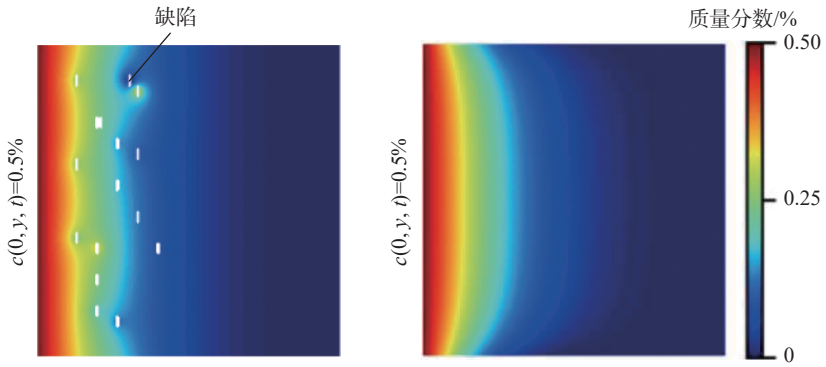
4 自然环境下混凝土构件中氯离子宏观扩散的模拟与预测

4.1 试验模拟

按第 3 节方法考虑工程实际的影响，对文献 [31] 中的试验结果进行模拟。综合考虑计算精度和计算规模，离散点间距为 10 mm。侵入面按现场测定结果，施加强制边界条件。表观扩散系数采用该文献中的计算方法，即式 (15)，D_{R} 取 2.96×10^{-6} mm^2/s，t_{R} 取 1.3 a，m 取 0.19。时变的边界氯离子质量分数采用式 (16) 计算。

$$c(\bar{x}_1,\bar{x}_2,\bar{x}_3,t)=c_0t^k \tag{16}$$

式中，c_0 和 k 根据文献 [31] 中试验结果，剔除离



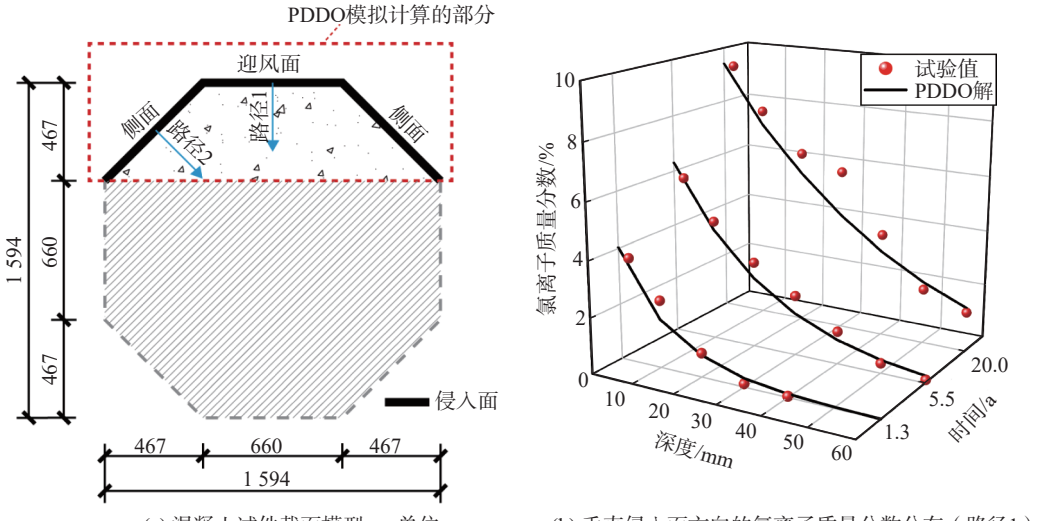
(a) 已知缺陷的影响　　(b) 随机缺陷的影响

图 8　缺陷的影响（t = 10 a）

Fig. 8　Influence of defects (t = 10 a)

群值后回归确定。c_0 取 3.7%，k 取 0.31，试验结果的决定系数 R^2 为 0.88。

图 9(a) 为计算模型，PDDO 模拟计算结果与试验结果的对比如图 9(b) 所示。



(a) 混凝土试件截面模型　　单位：mm　　(b) 垂直侵入面方向的氯离子质量分数分布（路径1）

图 9　PDDO 解与试验结果的对比

Fig. 9　Comparison of PDDO results with experimental results

图 5～9 的计算结果验证了基于 PDDO 模拟混凝土中氯离子扩散的灵活性和可靠性，说明该方法能够为解释扩散过程的机制提供量化数据，并可对扩散过程进行预测。

4.2　扩散边界条件的影响

在 4.1 节的基础上，考虑迎风面和侧面氯离子质量分数的差异，对侧面上的氯离子质量分数进行折减，令 $c = 0.037\ 2t^{0.31}|\cos\theta|$，其中 θ 为迎风面和侧面的夹角，本例中为 120°。

计算结果如图 10 所示：折减后垂直侵入面方向上氯离子质量分数变化速率明显减缓。

4.3　混凝土浇筑质量的影响

在 4.1 节的基础上，考虑缺陷的随机分布，在均值为 1、标准差为 0.004 的正态分布概率模型中抽样生成系数，以调整式 (13) 中的系数 t_{ij}。计算结果如图 11 所示：氯离子高质量分数区（深度 10 mm，

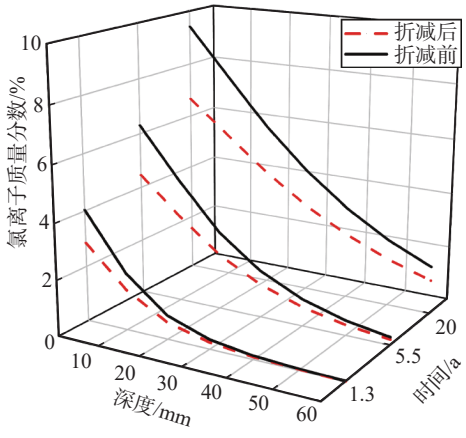


图 10　边界条件的影响 (路径 2)

Fig. 10　Influence of boundary conditions (Path 2)

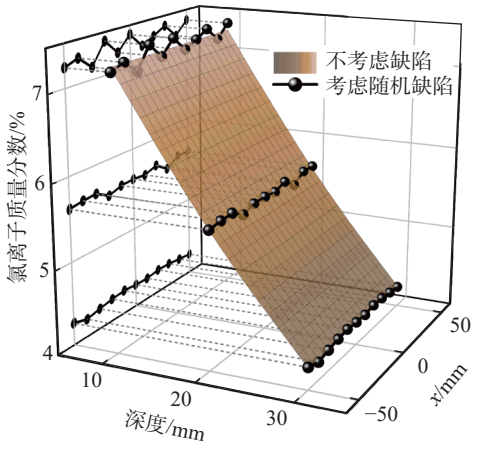


图 11 混凝土质量的影响（t=20 a）

Fig. 11 Influence of the quality of concrete (t=20 a)

标准差 0.09）的波动远大于低质量分数区（深度 30 mm，标准差 0.02）的波动。在深度 30 mm 处，随机缺陷的平均质量分数为 4.27%，高于理想值 4.26%，证明氯离子渗透前沿在缺陷影响下向深处移动。随机缺陷的影响使同一深度处氯离子质量分数的数值变化明显，氯离子质量分数峰值沿深度方向前移，且质量分数越高时此趋势越明显。

5 结 论

本文引入 PDDO 建立 PD 模型，考虑混凝土构件复杂几何形状、不同侵蚀工况和混凝土材料中随机缺陷的影响，对氯离子的扩散过程进行量化模拟。研究表明：

a. 基于 PDDO 的 PD 模型能够很好地模拟混凝土构件中氯离子宏观扩散过程，且该模型不依赖计算网格，方便应用于几何形状复杂、侵蚀工况多样的构件。

b. 基于 PDDO 的 PD 模型能够有效量化混凝土已知缺陷和随机缺陷的影响，且无需重新离散划分模型，也不增加计算次数和累积误差。

c. 混凝土的不均匀性导致同一深度处氯离子质量分数呈现出起伏，峰值沿深度方向前移，总体将加快氯离子扩散的影响；氯离子质量分数越高，此趋势越明显。

基于 PDDO 的 PD 模型可为混凝土构件中氯离子宏观扩散过程模拟提供有效的手段，从而为量大面广的既有混凝土结构的耐久性分析和寿命预测提供基础数据。

参考文献：

[1] 缪昌文, 顾祥林, 张伟平, 等. 环境作用下混凝土结构性能演化与控制研究进展 [J]. 建筑结构学报, 2019, 40(1): 1−10.

[2] 顾祥林, 张伟平, 姜超, 等. 混凝土结构的环境作用 [M]. 北京: 科学出版社, 2021.

[3] 付传清, 屠一军, 金贤玉, 等. 荷载和环境共同作用下混凝土中氯离子传输的试验研究 [J]. 水利学报, 2016, 47(5): 674−684.

[4] 罗大明, 李凡, 牛荻涛. 基于 Nernst-Plank 方程的氯盐环境内养护混凝土寿命预测 [J]. 工业建筑, 2022, 52(10): 131−138.

[5] 赵羽习, 王传坤, 金伟良, 等. 混凝土表面氯离子浓度时变规律试验研究 [J]. 土木建筑与环境工程, 2010, 32(3): 8−13.

[6] 罗大明, 牛荻涛. 基于钢筋锈蚀的混凝土结构耐久性评定 [J]. 工业建筑, 2022, 52(10): 1−8,70.

[7] Collepardi M, Marcialis A, Turriziani R. The kinetics of penetration of chloride ions into the concrete[J]. Il Cemento, 1970, 67(4): 157−164.

[8] Xi Y P, Bažant Z P. Modeling chloride penetration in saturated concrete[J]. Journal of Materials in Civil Engineering, 1999, 11(1): 58−65.

[9] 余红发, 孙伟. 混凝土氯离子扩散理论模型 [J]. 东南大学学报 (自然科学版), 2006, 36(S2): 68−76.

[10] Mangat P S, Molloy B T. Prediction of long term chloride concentration in concrete[J]. Materials and Structures, 1994, 27(6): 338-346.

[11] 张伟平, 张庆章, 顾祥林, 等. 环境条件和应力水平对混凝土中氯离子传输的影响 [J]. 江苏大学学报 (自然科学版), 2013, 34(1): 101−106.

[12] 周新刚, 李克非, 陈肇元. 氯离子在混凝土中扩散传输的有限体积法模拟分析 [J]. 工程力学, 2013, 30(7): 34−39.

[13] Engelund S, Mohr L, Edvardsen C, et al. General guidelines for durability design and redesign: DuraCrete, probabilistic performance based durability design of concrete structures[M]. Gouda: CUR, 2000.

[14] Samson E, Marchand J. Modeling the transport of ions in unsaturated cement-based materials[J]. Computers & Structures, 2007, 85(23/24): 1740−1756.

[15] Tian Y, Tian Z S, Jin N G, et al. A multiphase numerical simulation of chloride ions diffusion in concrete using electron microprobe analysis for characterizing properties of ITZ[J]. Construction and Building Materials, 2018, 178: 432−444.

[16] Liu Q F, Easterbrook D, Yang J, et al. A three-phase, multi-component ionic transport model for simulation of chloride penetration in concrete[J]. Engineering Structures,

2015, 86: 122−133.

[17] Hu H Y, Chen J S, Hu W. Error analysis of collocation method based on reproducing kernel approximation[J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 2011, 27(3): 554−580.

[18] Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R B, et al. Analysis and approximation of nonlocal diffusion problems with volume constraints[J]. SIAM Review, 2012, 54(4): 667−696.

[19] Du Q, Gunzburger M, Lehoucq R B, et al. A nonlocal vector calculus, nonlocal volume-constrained problems, and nonlocal balance laws[J]. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 2013, 23(3): 493−540.

[20] Yu H T, Sun Y Q. Bridging the gap between local and nonlocal numerical methods —a unified variational framework for non-ordinary state-based peridynamics[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2021, 384: 113962.

[21] Silling S A, Lehoucq R B. Peridynamic theory of solid mechanics[J]. Advances in Applied Mechanics, 2010, 44: 73−168.

[22] 李万金, 郭力, 周鑫, 等. 氯离子侵蚀混凝土及细观参数影响的近场动力学模拟 [J]. 东南大学学报 (自然科学版), 2021, 51(1): 30−37.

[23] Chen X D, Gu X, Liu P Y, et al. Peridynamic model for chloride diffusion–reaction in concrete reflecting mesostructure characteristic[J]. International Journal of Fracture, 2024, 245(3): 121−135.

[24] Madenci E, Barut A, Futch M. Peridynamic differential operator and its applications[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2016, 304: 408−451.

[25] Madenci E, Barut A, Dorduncu M. Peridynamic differential operator for numerical analysis[M]. Cham: Springer, 2019.

[26] Gu X, Madenci E, Zhang Q. Revisit of non-ordinary state-based peridynamics[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2018, 190: 31−52.

[27] Bažant Z P, Luo W, Chau V T, et al. Wave dispersion and basic concepts of peridynamics compared to classical nonlocal damage models[J]. Journal of Applied Mechanics, 2016, 83(11): 111004.

[28] Bessa M A, Foster J T, Belytschko T, et al. A meshfree unification: reproducing kernel peridynamics[J]. Computational Mechanics, 2014, 53(6): 1251−1264.

[29] Madenci E, Oterkus E. Peridynamic theory[M]// MADENCI E, OTERKUS E. Peridynamic Theory and Its Applications. New York: Springer, 2014.

[30] Silling S A, Lehoucq R B. Convergence of peridynamics to classical elasticity theory[J]. Journal of Elasticity, 2008, 93(1): 13−37.

[31] Kim J, Mccarter W J, Suryanto B, et al. Chloride ingress into marine exposed concrete: a comparison of empirical- and physically-based models[J]. Cement and Concrete Composites, 2016, 72: 133−145.

（编辑：何代华）