

ẢNH HƯỞNG CỦA ĐỘ RỖNG VI MÔ ĐẾN HỆ SỐ KHUẾCH TÁN ION CLO HỮU HIỆU CỦA ĐÁ XI MĂNG

Nguyễn Đình Hải^{a,*}, Trần Anh Tuấn^b, Nguyễn Tiến Dũng^a

^aKhoa Kỹ thuật Xây dựng, Trường Đại học Giao thông Vận tải,
số 3 đường Cầu Giấy, quận Đống Đa, Hà Nội, Việt Nam

^bKhoa Công Trình, Trường Đại học Giao thông Vận tải,
số 3 đường Cầu Giấy, quận Đống Đa, Hà Nội, Việt Nam

Nhận ngày 11/05/2020, Sửa xong 04/06/2020, Chấp nhận đăng 12/06/2020

Tóm tắt

Bài báo này được thực hiện với mục đích nghiên cứu ảnh hưởng của độ rỗng vi mô (độ rỗng hình thành bởi lỗ rỗng mao dẫn và lỗ rỗng khí kích thước μm) đến khả năng khuếch tán ion clo của đá xi măng. Để dự đoán hệ số khuếch tán ion clo hữu hiệu, đá xi măng có thể được mô phỏng bởi các phương pháp đồng nhất hoá cơ học vi mô dựa trên nghiệm của bài toán Eshelby coi đá xi măng bao gồm các pha hạt hình cầu không khuếch tán được phân bố trong các pha nền có khả năng khuếch tán. Kết quả của bài toán mô phỏng là hệ số khuếch tán hữu hiệu của đá xi măng là một hàm phụ thuộc vào tỷ lệ thể tích của vi lỗ rỗng và hệ số khuếch tán trong dung dịch lỗ rỗng. Các kết quả giải tích thu được sẽ được so sánh với các kết quả thực nghiệm đã được thực hiện trong các công bố trước đây.

Từ khoá: hệ số khuếch tán ion clo hữu hiệu; đá xi măng; đồng nhất hoá cơ học vi mô; nghiệm bài toán Eshelby; vi lỗ rỗng.

INFLUENCE OF MICROPOROSITIES ON EFFECTIVE CHLORIDE DIFFUSION COEFFICIENTS IN HARDENED PORTLAND CEMENT PASTE

Abstract

The present paper aims at investigating the effect of different water-cement ratios (related to different microporosities - capillary pores and air pores) on the chloride diffusivity of hardened Portland cement paste. For prediction of the effective diffusion coefficient of chloride ions, cement paste can be modeled by means of micromechanical homogenization approach based on Eshelby's solution involving non diffusive spherical inclusion in a diffusive matrix. As a result, effective chloride diffusivity of cement paste is obtained as a function of the volume fraction of the microporosity and the chloride diffusivity in the micropore solution. Comparisons between analytical results obtained by different models and experimental data from literature are presented.

Keywords: effective chloride diffusion coefficient; hardened cement paste; micromechanical homogenization; Eshelby's solution; microporosity.

[https://doi.org/10.31814/stce.nuce2020-14\(3V\)-07](https://doi.org/10.31814/stce.nuce2020-14(3V)-07) © 2020 Trường Đại học Xây dựng (NUCE)

1. Đặt vấn đề

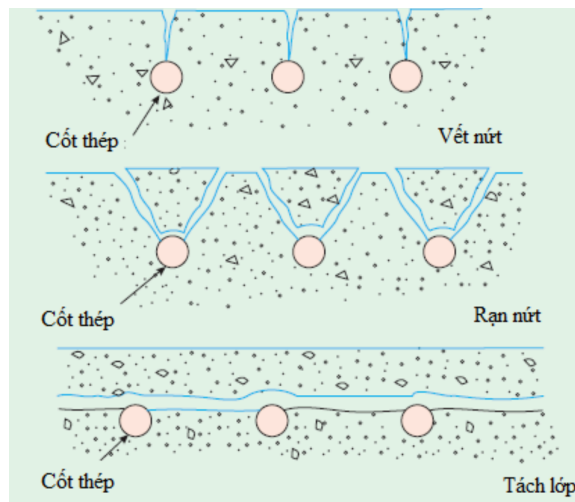
Khi kết cấu bê tông cốt thép tiếp xúc với môi trường có chứa ion clo thì các ion này sẽ xâm nhập qua lớp bê tông bảo vệ và dần tiến đến miền giáp ranh giữa bê tông và cốt thép thông qua cơ chế khuếch tán [1, 2]. Khi nồng độ ion clo trên bề mặt cốt thép đủ lớn cùng với sự xuất hiện của oxy nó

*Tác giả đại diện. Địa chỉ e-mail: nguyendinhhai.1986@gmail.com (Hải, N. Đ.)

sẽ phá huỷ lớp vỏ thụ động trên bề mặt cốt thép, tiếp theo đó cốt thép sẽ bị ăn mòn (gỉ) làm suy giảm cường độ và độ bền của kết cấu bê tông cốt thép (xem Hình 1 và Hình 2). Trong các nghiên cứu về độ bền của bê tông cốt thép chịu phơi nhiễm ion clo [1, 2] thì hệ số khuếch tán ion clo của vật liệu bê tông là một thông số quan trọng cho phép đánh giá được khả năng kháng thấm ion clo của bê tông, đồng thời dự đoán được thời gian khởi đầu ăn mòn cũng như tuổi thọ của kết cấu bê tông cốt thép [2].



Hình 1. Bê tông cốt thép chịu tác động của ion clo [2]



Hình 2. Cơ chế phá hoại của bê tông cốt thép khi chịu xâm thực ion clo [2]

Để xác định hệ số khuếch tán ion clo trong các loại bê tông thì đa phần những nghiên cứu trước đây tiến hành các phương pháp thực nghiệm đã được tiêu chuẩn hoá [3–6]. Các phương pháp thực nghiệm kể trên có độ chính xác tương đối cao tuy nhiên khá tốn kém và mất nhiều thời gian làm thí nghiệm.

Bên cạnh các nghiên cứu thực nghiệm để xác định hệ số này thì còn có nhóm các phương pháp giải tích dựa trên phép đồng nhất hoá đa cấp độ vật liệu [7–11] cho phép dự đoán được hệ số khuếch tán ion clo của vật liệu tổng hợp khi đã biết một số thông số đầu vào như: cấu trúc, hệ số khuếch tán của các vật liệu thành phần, tỷ lệ giữa các pha thành phần. Một bài toán đồng nhất hoá có thể được chia thành ba giai đoạn chính [11]:

- Bước đại diện: Tại bước này, cần cụ thể hoá các thông tin cơ bản của bài toán đồng nhất hoá: vật liệu được cấu thành từ các pha đồng nhất nào? sự bố trí không gian của các pha vật liệu? sự tương tác giữa các thành phần cấu thành các đặc trưng cơ lý nào của hệ cần được xác định.

- Bước định vị hoá: Tiếp theo cần phân tích những kết quả ứng xử của vật liệu (khuếch tán) khác nhau như: Trường dòng vi mô, trường mật độ nồng độ vi mô, ... cũng như là các dạng phương pháp để xác định.

- Bước đồng nhất hoá: Cuối cùng, cần tổng hợp các kết quả từ bước trước đó để đạt được các giá trị vĩ mô thông qua các phương pháp lấy trung bình, đề xuất các luật ứng xử vĩ mô, các phương pháp đánh giá độ chính xác.

Nghiên cứu này được thực hiện với mục đích xác định, dự báo hệ số khuếch tán ion clo hữu hiệu của vật liệu đá xi măng khi đã biết tỷ lệ nước/xi măng (có liên hệ với độ rỗng vi mô của đá xi măng) và hệ số khuếch tán ion clo trong dung dịch lỗ rỗng của đá xi măng (đã được xác định thực nghiệm ở các nghiên cứu trước đây [9, 12–17] bằng cách áp dụng một số mô hình mô phỏng được đề xuất như mô hình Mori–Tanaka, mô hình Tự tương hợp, mô hình Xấp xỉ vi phân [7, 8, 11].

Bài báo được trình bày thành bốn phần: phần hai dành để mô tả các phương trình cơ bản của bài toán, các lý thuyết xây dựng mô hình mô phỏng hệ số khuếch tán hữu hiệu của đá xi măng sẽ được trình bày ở phần ba, các kết quả áp dụng số của các mô hình giải tích đề xuất sẽ được so sánh với các kết quả thực nghiệm được thực hiện trong một số công bố của các nghiên cứu khác trong phần bốn.

2. Mô tả bài toán

Vật liệu đá xi măng xem xét trong nghiên cứu này được coi là cấu thành từ hai pha: pha rắn không cho phép khuếch tán có dạng hình cầu được phân bố trong pha nền là pha dung dịch trong các vi lỗ rỗng (lỗ rỗng ở cấp độ vi mô cỡ μm). Giả thiết rằng cả hai pha cấu thành nên đá xi măng đều là đồng nhất và khuếch tán đẳng hướng trong từng pha. Trong trường hợp khuếch tán là ổn định (không đổi theo thời gian), phương trình khuếch tán sẽ tuân theo định luật Fick thứ nhất [2, 7, 9]:

$$j^{(i)} = D^{(i)} \nabla c^{(i)} \quad (1)$$

trong đó $j^{(i)}$ là vec tơ dòng khuếch tán của pha i ; $D^{(i)}$ là ten xơ hệ số khuếch tán bậc hai của pha i với

$$D^{(i)} = \begin{cases} D^{(s)} = 0, & \text{trong pha rắn} \\ D^{(f)} = d_{pore} \mathbf{I}, & \text{trong dung dịch lỗ rỗng} \end{cases} \quad (2)$$

trong đó d_{pore} là một số vô hướng; $\mathbf{I}$ là ten xơ đơn vị bậc 2 và được trình bày dưới dạng ma trận như sau:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

và $c^{(i)}$ là nồng độ ion clo tại pha i ; đặt vec tơ gradient nồng độ

$$h^{(i)} = \nabla c^{(i)} \quad (3)$$

Phương trình cân bằng của bài toán được định nghĩa như sau:

$$\text{div } j^{(i)} = 0 \quad (4)$$

trong nghiên cứu này ta giả sử rằng mặt phân giới giữa hai pha rắn là lỏng là liên tục do vậy

$$[[\mathbf{j} \cdot \mathbf{n}]] = 0 \quad (5)$$

nghĩa là thành phần pháp tuyến của vec tơ dòng khuếch tán là liên tục khi đi qua mặt phân giới giữa hai lớp vật liệu cấu thành nên đá xi măng (với $\mathbf{n}$ là vec tơ pháp tuyến của mặt phân giới giữa hai pha). Theo lý thuyết đồng nhất hoá, ở cấp độ vĩ mô vec tơ dòng khuếch tán và gradient nồng độ ion clo được tính theo trung bình thể tích các trường tại các pha hợp thành composite [8, 11]:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_{\Omega^{(s)}} h^{(s)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\Omega^{(f)}} h^{(f)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right) \quad (6)$$

$$\mathbf{J} = \frac{1}{|\Omega|} \left(\int_{\Omega^{(s)}} \mathbf{j}^{(s)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \int_{\Omega^{(f)}} \mathbf{j}^{(f)}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right) \quad (7)$$

Ten xơ hệ số khuếch tán ion clo của đá xi măng $D^{(eff)}$ được xác định thông qua mối quan hệ giữa vec tơ dòng khuếch tán và gradient nồng độ clo ở cấp độ vĩ mô:

$$\mathbf{J} = D^{(eff)} \mathbf{H} \quad (8)$$

Hệ số khuếch tán ion clo hữu hiệu của vật liệu $D^{(eff)}$ sẽ được xác định khi các trường vec tơ gradient nồng độ, vec tơ dòng khuếch tán ở cấp độ vi mô được xác định.

3. Đồng nhất hoá xác định hệ số khuếch tán hữu hiệu của đá xi măng

Trong nghiên cứu này để đơn giản hoá bài toán ta coi pha rắn có dạng hình cầu với ten xơ hệ số khuếch tán bằng $\mathbf{0}$. Pha lỏng (dung dịch lỗ rỗng) có hệ số khuếch tán là $\mathbf{D}^{(f)} = \mathbf{d}_{pore} \mathbf{I}$, cả hai pha này đều được coi là khuếch tán đẳng hướng.

Theo lý thuyết đồng nhất hoá đa cấp độ [7, 8, 11] ten xơ hệ số khuếch tán hữu hiệu của đá xi măng được xác định theo công thức sau:

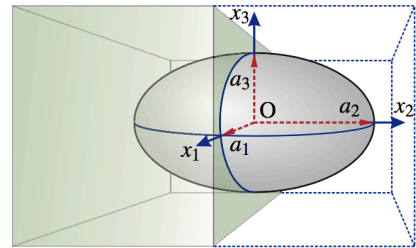
$$D^{(eff)} = \phi \mathbf{D}^{(f)} \mathbf{A}^{(f)} + (1 - \phi) \mathbf{D}^{(s)} \mathbf{A}^{(s)} \quad (9)$$

trong đó $\mathbf{A}^{(s)}$, $\mathbf{A}^{(f)}$ lần lượt là ten xơ định vị bậc hai của pha rắn và pha lỏng cho bài toán truyền dẫn, ϕ là tỷ lệ thể tích của vi lỗ rỗng. Các ten xơ định vị bậc hai của pha rắn được xác định thông qua ten xơ Eshelby [7, 8, 11] như sau:

$$\mathbf{A}^{(s)} = \left[\mathbf{I} + \mathbf{D}^{(f)-1} \mathbf{S}^{esh} (\mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{D}^{(f)}) \right]^{-1} \quad (10)$$

Khi pha rắn được giả sử được đặt trong pha nền vô hạn cho bài toán bão hoà. Ten xơ Eshelby phụ thuộc vào hình dạng và hướng của pha hạt, trong trường hợp tổng quát khi pha rắn có dạng hình elip tròn xoay với các kích thước và hướng được mô tả như Hình 3.

Ten xơ Eshelby bậc hai được viết dưới dạng chỉ số như sau [17]:



Hình 3. Pha hạt có dạng elip tròn xoay

$$S_{ij} = \frac{a_1 a_2 a_3}{4} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \int_0^\infty \left(\frac{x_1^2}{a_1^2 + s} + \frac{x_2^2}{a_2^2 + s} + \frac{x_3^2}{a_3^2 + s} \right) \frac{1}{\Delta(s)} ds \quad (11)$$

trong đó $\Delta(s) = \sqrt{(a_1^2 + s)(a_2^2 + s)(a_3^2 + s)}$, trong trường hợp đặc biệt pha rắn có dạng hình cầu và vật liệu là khuếch tán đẳng hướng thì ten xơ Eshelby có dạng đơn giản như sau [7, 8, 11]:

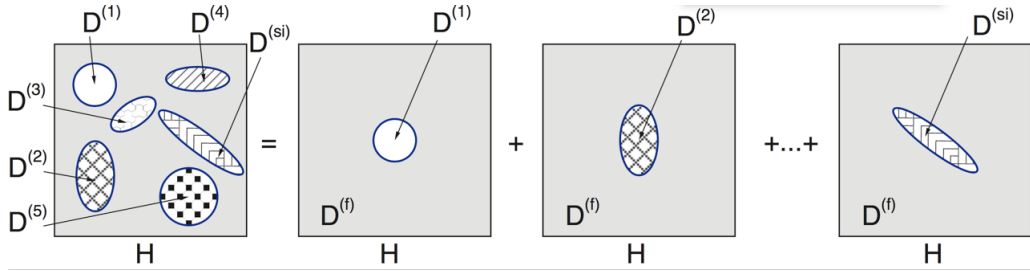
$$\mathbf{S}^{esh} = \frac{1}{3}\mathbf{I} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

Trong nghiên cứu này ta giả sử rằng pha rắn trong đá xi măng không cho phép khuếch tán do vậy $\mathbf{D}^{(s)} = 0$ phương trình (9) được rút gọn thành:

$$\mathbf{D}^{(eff)} = \phi \mathbf{D}^{(f)} \mathbf{A}^{(f)} \quad (13)$$

Để mô phỏng bài toán đặt ra ở đây ta sử dụng ba mô hình mô phỏng thông dụng cho vật liệu đá xi măng được trình bày dưới đây:

3.1. Mô hình Mori–Tanaka



Hình 4. Mô hình Mori–Tanaka

Mô hình này được đề xuất với các giả thuyết sau:

- Vật liệu có chứa một pha hạt rắn đồng nhất được nhúng trong pha nền là chất lỏng liên tục và đồng nhất.

- Quá trình đồng nhất hoá có tính tới tương tác giữa các pha hạt thể hiện ở việc đặt trường gradient nồng độ $\mathbf{H}$ ở biên của vật liệu bằng với trung bình của trường này ở trong pha nền.

Trong trường hợp tổng quát các giá trị $\mathbf{D}^{(1)}, \mathbf{D}^{(2)}, \dots, \mathbf{D}^{(si)}$ là hệ số khuếch tán ion clo trong các pha rắn 1, 2, ..., si. Đối với nghiên cứu này ta coi hệ số khuếch tán ion clo trong các pha hạt rắn là như nhau và $\mathbf{D}^{(1)} = \mathbf{D}^{(2)} = \dots = \mathbf{D}^{(si)} = \mathbf{0}$.

Theo mô hình Mori–Tanaka (Hình 4) ten xơ định vị của pha lỏng sẽ có dạng [5, 6, 17]

$$\mathbf{A}^{(f)} = \left[\mathbf{I} + \mathbf{D}^{(f)-1} \mathbf{S}^{esh} (\mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{D}^{(f)}) \right]^{-1} \mathbf{D}^{(f)} \quad (14)$$

thay các phương trình (2) và (12) vào phương trình (14) ta được

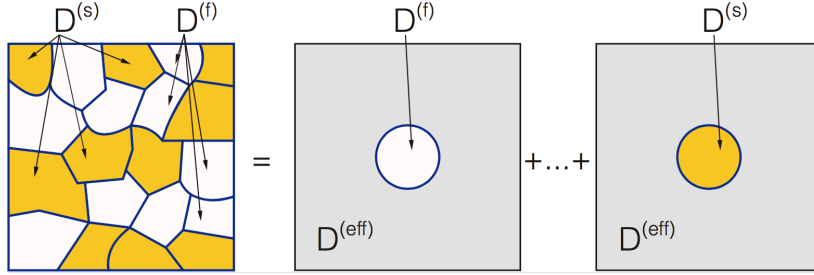
$$\mathbf{A}^{(f)} = \frac{2\mathbf{d}_{pore}}{3 - \phi} \mathbf{I} \quad (15)$$

Kết hợp các phương trình (15), (13) và (2) ta thu được nghiệm giải tích của ten xơ hệ số khuếch tán hữu hiệu của vật liệu đá xi măng:

$$\mathbf{D}_{MT}^{(eff)} = \frac{2\phi}{3 - \phi} \mathbf{d}_{pore} \mathbf{I} \quad (16)$$

3.2. Mô hình Tự tương hợp

Mô hình này đưa ra giả thuyết rằng mỗi pha trong vật liệu đá xi măng được đều được nhúng trong một vật liệu đã được đồng nhất hoá (môi trường đối chứng).



Hình 5. Mô hình Tự tương hợp

Ở đây hai pha rắn và lỏng đều được giả sử có dạng hình cầu và được nhúng vào pha nền chính là pha đã đồng nhất, ở đây được kí hiệu là AC như Hình 5. Sau đó ta sẽ áp dụng công thức xếp chồng (superposition) để xác định tính chất hữu hiệu của vật liệu tổng hợp).

Trong mô hình ten xơ định vị của pha lỏng được xác định theo công thức (7), (8) và (10)

$$\mathbf{A}^{(f)} = \left[\mathbf{I} + \mathbf{D}_{AC}^{(eff)-1} \mathbf{S}^{esh} (\mathbf{D}^{(f)} - \mathbf{D}_{AC}^{(eff)}) \right]^{-1} \mathbf{D}^{(f)} \quad (17)$$

Thay phương trình (17) vào phương trình (13) ta được

$$\mathbf{D}_{AC}^{(eff)} = \phi \mathbf{D}^{(f)} \left[\mathbf{I} + \mathbf{D}_{AC}^{(eff)-1} \mathbf{S}^{esh} (\mathbf{D}^{(f)} - \mathbf{D}_{AC}^{(eff)}) \right]^{-1} \mathbf{D}^{(f)} \quad (18)$$

Giải phương trình (18) ta được

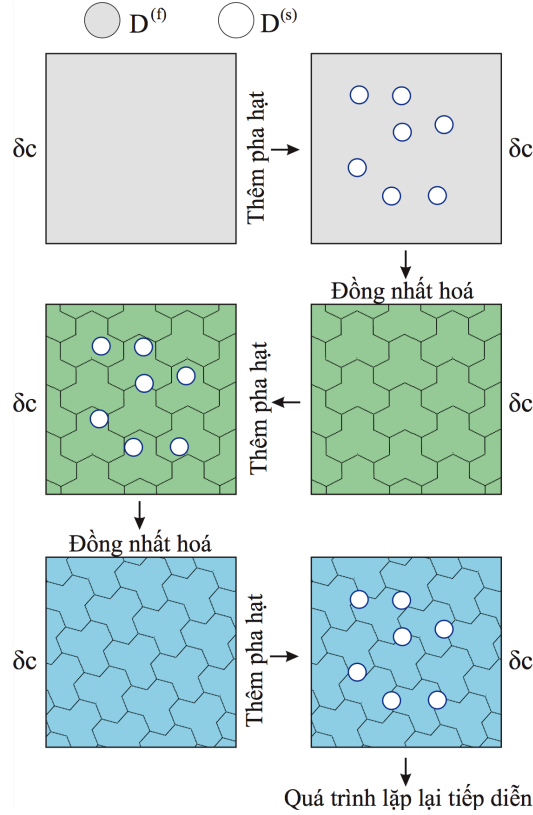
$$\mathbf{D}_{AC}^{(eff)} = \frac{3\phi - 1}{2} \mathbf{d}_{pore} \mathbf{I} \quad (19)$$

3.3. Mô hình Xấp xỉ Vi phân (Differential Schema)

Mô hình Xấp xỉ Vi phân được đề xuất bởi Mc Laughlin [7, 8, 11]. Mô hình này được xây dựng trên ý tưởng một vật liệu đa thành phần, vật liệu này được xây dựng trên nền tảng một vật liệu ban đầu sau đó được bổ sung gia cường dần dần từng bước một các pha hạt. Quá trình xây dựng lên vật liệu đa thành phần này được xác định duy nhất thông qua việc thông số hoá tỷ lệ thể tích của các pha hạt được thêm vào (như miêu tả ở Hình 6). Tính chất cuối cùng của vật liệu tổng hợp sẽ phụ thuộc cả vào cách thức đưa vật liệu gia cường vào chứ không chỉ phụ thuộc vào tỷ lệ thể tích cuối cùng của các pha trong vật liệu tổng hợp. Mô hình này được xây dựng dựa trên các giả thuyết sau:

- Vật liệu có pha cốt được phân bố ngẫu nhiên.
- Mô hình xét một thể tích cơ sở đơn vị được đặc trưng bởi ứng xử tương đương $\mathbf{D}^{(c)}$ và một tỷ lệ thể tích pha hạt rắn.
- Pha nền được gia cường thêm pha hạt với tỷ lệ thể tích là δc cho mỗi lần thêm.

Tính toán được bắt đầu với pha nền có thể tích là V_0 là một dung dịch lỏng có hệ số khuếch tán là $\mathbf{D}^{(f)}$. Giả sử rằng pha hạt rắn sẽ được nhúng vào pha nền 0 nhưng vẫn đảm bảo tổng thể tích vật liệu không đổi và luôn luôn là V_0 nghĩa là ta sẽ dần thay thế pha nền bởi pha cốt, tại mỗi bước này ta sẽ thực hiện một phép đồng nhất hoá vật liệu.



Hình 6. Mô hình xấp xỉ vi phân

Mô hình này coi một thể tích đơn vị của composite được đặc trưng bởi một hệ số khuếch tán $\mathbf{D}(c)$ tương đương với một tỷ lệ thể tích pha rắn là c (do vậy $\phi + c = 1$).

Tại thể tích này ta thêm một hàm lượng chất rắn δc , do vậy hệ số khuếch tán của vật liệu composite mới sau khi thêm một hàm lượng δc pha rắn sẽ được tính như sau:

$$\mathbf{D}(c + \delta c) = \mathbf{D}(c) + \frac{\delta c}{1 + \delta c} (\mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{D}(c)) : \mathbf{A}^{(s)} \quad (20)$$

Tại mỗi bước giả sử rằng c rất nhỏ phương trình (20) được rút gọn thành

$$\frac{d\mathbf{D}}{dc} = \frac{1}{1 - c} (\mathbf{D}^{(s)} - \mathbf{D}) : \mathbf{A}^{(s)} \quad (21)$$

do pha hạt rắn là hình cầu nên

$$\mathbf{A}^{(s)} = [\mathbf{I} - \mathbf{S}^{esh}]^{-1} = \frac{3}{2} \mathbf{I} \quad (22)$$

với tổng thể tích của hai pha rắn lỏng

$$\phi + c = 1 \quad (23)$$

thay hai phương trình (22) và (23) vào phương trình (21) ta rút ra:

$$\frac{d\mathbf{D}}{d\phi} = \frac{d\phi}{\phi} [\mathbf{I} - \mathbf{S}^{esh}]^{-1} = \frac{3d\phi}{\phi} \mathbf{I} \quad (24)$$

Giải phương trình (21) ta thu được

$$\mathbf{D}_{DS}^{(eff)} = \sqrt{\phi^3} \mathbf{D}^{(f)} = \sqrt{\phi^3} \mathbf{d}_{pore} \mathbf{I} \quad (25)$$

4. Kết quả số và so sánh

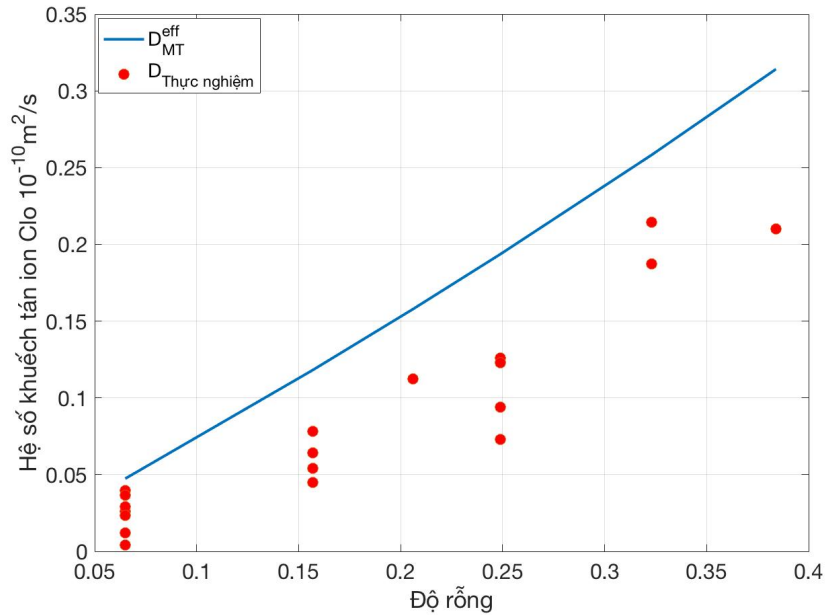
Các kết quả thực nghiệm xác định hệ số khuếch tán ion clo và độ rỗng vi mô trong pha rắn đã thực hiện trong các nghiên cứu [9, 12–17] được trình bày ở Bảng 1.

Bảng 1. Thực nghiệm xác định hệ số khuếch tán ion clo và độ rỗng vi mô của đá xi măng với các hàm lượng N/X khác nhau

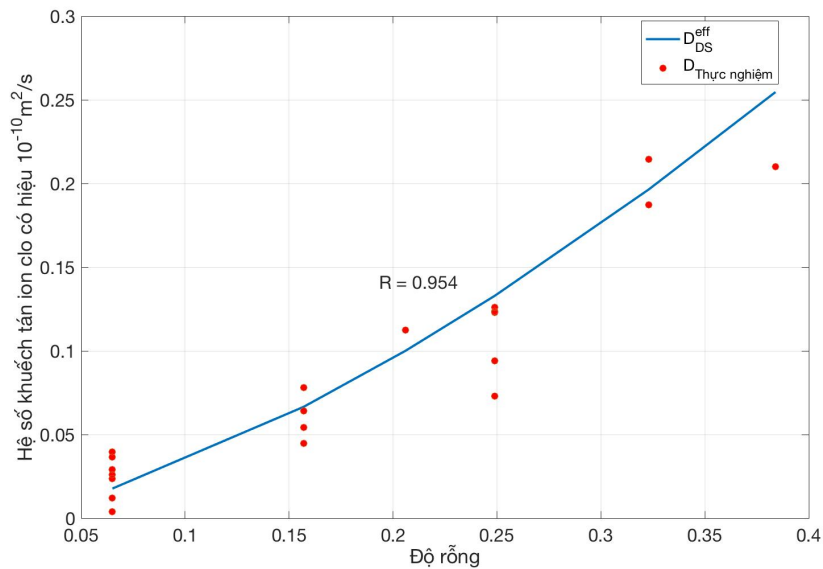
Số thứ tự	Tên	Tỷ lệ N/X	Độ rỗng vi mô ϕ	Hệ số khuếch tán thực nghiệm của đá xi măng $\mathbf{d}^{(exp)} \times 10^{-10}$ (m ² /s)
1	P81 [7]	0,4	0,065	2,6
2		0,5	0,157	4,47
3		0,6	0,249	12,35
4	Y91 [8]	0,5	0,065	1,2
5		0,5	0,157	5,43
6		0,6	0,249	7,3
8	N95 [9]	0,4	0,065	3,95
9		0,5	0,157	7,8
10		0,6	0,249	12,6
11		0,7	0,323	21,46
12	T92 [10]	0,4	0,065	2,9
13		0,6	0,249	9,4
14		0,8	0,384	21
15	Mc95 [11]	0,4	0,065	2,353
16		0,5	0,157	6,412
17		0,6	0,249	12,29
18		0,7	0,323	18,17
19	ACP01 [12]	0,35	0,065	0,4
20	C01 [13]	0,4	0,065	3,646
21	H95 [14]	0,55	0,206	11,25

Trong mô phỏng này ta sẽ lấy giá trị trung bình của hệ số khuếch tán của dung dịch nước lỗ rỗng $\mathbf{d}_{pore} = 1,07 \times 10^{-10}$ m²/s [15] được xác định thông qua thực nghiệm và tính toán mô phỏng. Các tính toán nhận được bằng phương pháp giải tích sẽ được so sánh với các kết quả thực nghiệm được trình bày trong Bảng 1. Các kết quả thể hiện ở biểu đồ Hình 7, Hình 8 và Hình 9 cho thấy khi độ rỗng vi mô tăng thì hệ số khuếch tán ion clo của đá xi măng cũng tăng, nghĩa là khả năng chống thấm ion clo giảm.

Thông qua các biểu đồ so sánh giữa các giá trị thực nghiệm và kết quả tính toán của các mô hình đồng nhất hoá (Hình 7, Hình 8 và Hình 9), ta thấy các kết quả đưa ra bởi mô hình Xấp xỉ Vi phân rất

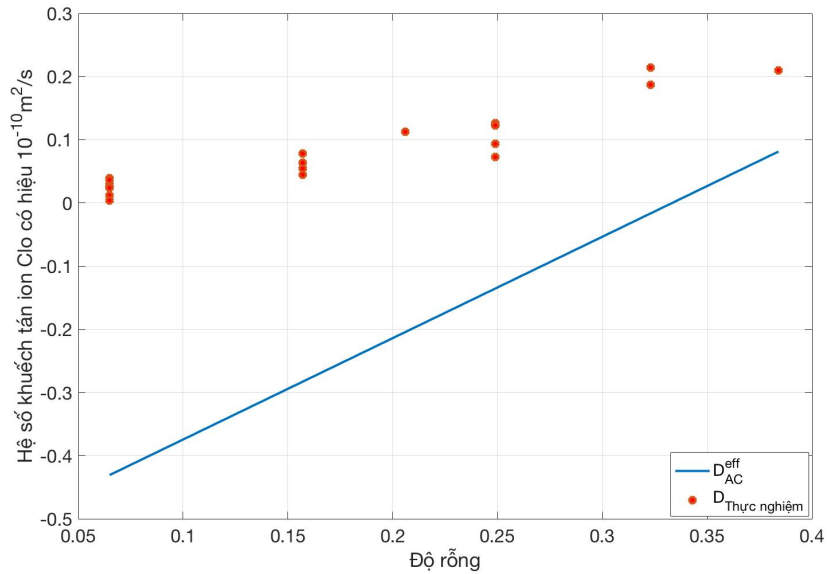


Hình 7. Ảnh hưởng của độ rỗng vi mô đến hệ số khuếch tán ion clo của đá xi măng:
So sánh mô hình Mori–Tanaka và thực nghiệm



Hình 8. Ảnh hưởng của độ rỗng vi mô tới hệ số khuếch tán ion clo của đá xi măng:
So sánh giữa mô hình Vi phân và thực nghiệm

sát so với thực nghiệm với hệ số tương quan lên đến 0,954. Các kết quả đưa ra bởi Mô hình Mori–Tanaka và Tự tương hợp thì không được sát so với các kết quả thực nghiệm. Điều này có thể được lý giải bởi tính hợp lý của mô hình đối với mô hình Xấp xỉ vi phân coi pha lỏng là pha gốc sau đó pha rắn liên tục được thêm vào với các tỷ lệ vô cùng nhỏ tại từng bước tính toán cho tới khi đạt được tỷ lệ thể tích của nó, do vậy mô sát với thực tế vật liệu hơn, trong khi đó mô hình Mori–Tanaka coi pha



Hình 9. Ảnh hưởng của độ rỗng vi mô tới hệ số khuếch tán ion clo của đá xi măng:
So sánh giữa mô hình Tự tương hợp và thực nghiệm

lỏng là pha nền là chưa sát với vật liệu do tỷ lệ thể tích của pha lỏng nhỏ hơn pha rắn, bên cạnh đó trong mô hình Tự tương hợp thì hai pha có vai trò tương tự nhau về mặt tỷ lệ thể tích trong khi thực tế thì thể tích của pha lỏng nhỏ hơn rất nhiều so với pha rắn. Với các phân tích nêu trên và các kết quả đạt được so với thực nghiệm có thể kết luận mô hình Xấp xỉ Vi phân là hoàn toàn tương thích trong việc dự báo hệ số Khuếch tán ion clo của đá xi măng.

5. Kết luận

Dựa trên các kết quả thực nghiệm hiện có với đá xi măng có tỷ lệ N/X trong khoảng 0,35–0,8 thì mô hình Xấp xỉ Vi phân cho kết quả gần với thực nghiệm hơn cả. Như vậy trong số 3 mô hình tính toán được đề xuất trong nghiên cứu này, mô hình Vi phân là phù hợp nhất trong việc dự báo hệ số Khuếch tán ion clo hữu hiệu của vật liệu đá xi măng.

Có thể tiếp tục tiến hành thực nghiệm xác định hệ số khuếch tán ion clo của đá xi măng cho các tỷ lệ N/X nhỏ hơn 0,35 đối với các loại bê tông HPC và UHPC sau đó so sánh với mô hình hiện hữu để có thể tiến hành cải tiến mô hình nhằm tổng quát hoá mô hình để có thể dự báo xác định hệ số khuếch tán ion clo hữu hiệu của đá xi măng cho mọi loại tỷ lệ N/X.

Nghiên cứu có thể được mở rộng ra trong trường hợp xác định hệ số khuếch tán của bê tông xi măng với định luật Fick thứ nhất và thứ hai và tiến tới mô phỏng dự đoán tuổi thọ của kết cấu bê tông cốt thép chịu xâm thực ion clo.

Mô hình này có thể tiếp tục phát triển thành mô hình đồng nhất hoá hai cấp độ: (i) Cấp độ meso cho phép xác định hệ số khuếch tán hữu hiệu của đá xi măng với tỷ lệ N/X cho trước, (ii) Cấp độ Vi mô cho phép xác định hệ số khuếch tán ion clo hữu hiệu của bê tông xi măng với mô phỏng các hạt cốt liệu được nhúng trong pha nền là đá xi măng đồng thời có kể đến miền phân giới giữa vật liệu đá xi măng và cốt liệu.

Lời cảm ơn

Tác giả chân thành sự hỗ trợ tài chính của Quỹ phát triển khoa học và công nghệ quốc gia (NAFOS-TED) cho đề tài “Mô hình hóa và mô phỏng hóa đa cấp độ mặt phân giới/bề mặt gỗ ghề trong vật liệu composite ở cấp độ nano”, mã số 107.02-2017.10.

Tài liệu tham khảo

- [1] Phạm, D. H., Đào, V. Đ., Phạm, D. A., Nguyễn, T. D., Nguyễn., Đ. H. (2018). *Vật liệu mới trong xây dựng công trình giao thông*. Nhà xuất bản Giao thông Vận tải, Hà Nội.
- [2] Phạm, D. H., Trần, T. T., Thái, K. C., Đào, V. D., Nguyễn, T. S. (2018). *Thiết kế kết cấu theo độ bền*. Nhà xuất bản Giao thông Vận tải, Hà Nội.
- [3] TCVN 9337:2012. *Bê tông nặng – Xác định độ thấm ion clo bằng phương pháp đo điện lượng*. Bộ Khoa học và Công nghệ, Việt Nam.
- [4] ASTM C1202:2012. *Standard Test Method for Electrical Indication of Concrete's Ability to Resist Chloride Ion Penetration*. ASTM International, West Conshohocken, USA.
- [5] Luping, T., Nilsson, L.-O. (1993). Rapid determination of the chloride diffusivity in concrete by applying an electric field. *Materials Journal*, 89(1):49–53.
- [6] MacDonald, K. A., Northwood, D. O. (1995). [Experimental measurements of chloride ion diffusion rates using a two-compartment diffusion cell: Effects of material and test variables](#). *Cement and Concrete Research*, 25(7):1407–1416.
- [7] Dormieux, L., Kondo, D., Ulm, F.-J. (2006). *Microporomechanics*. John Wiley & Sons.
- [8] Zaoui, A. (1997). [Structural morphology and constitutive behaviour of microheterogeneous materials](#). *Continuum micromechanics*, Springer, 291–347.
- [9] Page, C., Short, N. R., El Tarras, A. (1981). [Diffusion of chloride ions in hardened cement pastes](#). *Cement and Concrete Research*, 11(3):395–406.
- [10] Phương, N. H., Kiên, N. T. et al. (2019). [Xác định đặc trưng hữu hiệu của vật liệu đa tinh thể dị hướng bằng phương pháp đồng nhất hóa](#). *Tạp chí Khoa học Công nghệ Xây dựng (KHCNXD)-ĐH XD*, 13(4V): 129–138.
- [11] Trần, B. V., Nguyễn, T. K., Trần, A. T., Nguyễn, Đ. H. (2019). *Đồng nhất vật liệu nhiều thành phần - Ứng xử tuyến tính*. Nhà xuất bản Xây dựng, Hà Nội.
- [12] Yu, S. W., Page, C. L. (1991). [Diffusion in cementitious materials: 1. Comparative study of chloride and oxygen diffusion in hydrated cement pastes](#). *Cement and Concrete Research*, 21(4):581–588.
- [13] Ngala, V. T., Page, C. L., Parrott, L. J., Yu, S. W. (1995). [Diffusion in cementitious materials: 2. Further investigations of chloride and oxygen diffusion in well-cured OPC and OPC/30% PFA pastes](#). *Cement and Concrete Research*, 25(5):819–826.
- [14] Asbridge, A. H., Chadbourn, G. A., Page, C. L. (2001). [Effects of metakaolin and the interfacial transition zone on the diffusion of chloride ions through cement mortars](#). *Cement and Concrete Research*, 31(11): 1567–1572.
- [15] Castellote, M., Alonso, C., Andrade, C., Chadbourn, G. A., Page, C. L. (2001). [Oxygen and chloride diffusion in cement pastes as a validation of chloride diffusion coefficients obtained by steady-state migration tests](#). *Cement and Concrete Research*, 31(4):621–625.
- [16] Hornain, H., Marchand, J., Duhot, V., Moranville-Regourd, M. (1995). [Diffusion of chloride ions in limestone filler blended cement pastes and mortars](#). *Cement and Concrete Research*, 25(8):1667–1678.
- [17] Pivonka, P., Hellmich, C., Smith, D. (2004). [Microscopic effects on chloride diffusivity of cement pastes—a scale-transition analysis](#). *Cement and Concrete Research*, 34(12):2251–2260.