



# PHÂN TÍCH MÔ HÌNH CACBONAT CỦA BÊ TÔNG XI MĂNG BẰNG PHƯƠNG PHÁP PHẦN TỬ HỮU HẠN

**Ngô Việt Đức<sup>1</sup>**

**Tóm tắt:** Trong bài báo này, mô hình được đề xuất cho hiện tượng cacbonat của bê tông dưới tác động của các điều kiện khí hậu (chủ yếu là nhiệt độ, độ ẩm và khí CO<sub>2</sub>). Mục đích của nghiên cứu, để điều tra ảnh hưởng của một số thông số trong mô hình đến kết quả mô phỏng. Nghiên cứu tập trung vào sự chính xác cần thiết để mô phỏng các điều kiện khí hậu biến đổi bên ngoài và sự cần thiết của việc mô hình hóa sự truyền nhiệt trong vật liệu bê tông. Nghiên cứu cũng tập trung vào các phương trình cân bằng khối lượng, xem xét trạng thái cân bằng hóa học cục bộ của các ion canxi thay vì sử dụng một phương trình khuếch tán.

**Từ khóa:** Carbonat; mô hình; phần tử hữu hạn; điều kiện môi trường.

**Summary:** In this study a model is proposed for concrete carbonation under variable external conditions (temperature and relative humidity mainly). The aim of this study is to investigate the influence of the simulations results of certain parameters. The study focuses on the accuracy required to model the external conditions variations, and the necessity of modelling the heat transfer in the porous material during a time step. The study also focuses on the mass balance equation for calcium species, and the relevance of considering a local chemical equilibrium for calcium instead of a diffusive reactive equation.

**Keywords:** Carbonation; modeling; finite element analysis; weather condition.

Nhận ngày 13/5/2016, chỉnh sửa ngày 27/5/2016, chấp nhận đăng 20/8/2016



## 1. Tổng quan

Ăn mòn cốt thép là một trong số các nguyên nhân dẫn đến việc hư hỏng các cấu kiện bê tông cốt thép. Các tác nhân gây ăn mòn có thể khác nhau tùy thuộc vào điều kiện sử dụng công trình. Trong đó, hiện tượng cacbonat lớp bê tông bảo vệ là tác nhân phổ biến, nhất là với các công trình chịu tác động trực tiếp điều kiện khí hậu. Các dioxit cacbon (CO<sub>2</sub>) trong không khí phản ứng với các hydrat trong xi măng. Phản ứng này biến đổi các sản phẩm hydrat (portlandite và hydro silicat canxi) thành canxi cacbonat CaCO<sub>3</sub>. Cùng với những phản ứng này, độ pH trong dung dịch giảm xuống thấp, trong môi trường này các lớp oxit sắt bảo vệ thép chống ăn mòn là không ổn định. Quá trình ăn mòn sau đó có thể được bắt đầu phụ thuộc vào các điều kiện về độ ẩm và lượng oxy.

Để có thể dự báo được các hư hỏng của công trình do ăn mòn cốt thép gây ra, đặc biệt là các công trình chịu tác động trực tiếp của các điều kiện khí hậu tự nhiên, nghiên cứu về hiện tượng cacbonat đã được đặt ra từ lâu. Từ nhiều thập kỷ, mặc dù kết quả của các nghiên cứu này đã mang lại những thông tin quan trọng và có giá trị, nhưng một số vấn đề của hiện tượng này vẫn chưa được làm sáng tỏ một cách toàn diện. Một số câu hỏi còn tồn tại như: sự biến động liên tục của độ ẩm và nhiệt độ ngoài trời có ảnh hưởng như thế nào đến tốc độ hòa tan các hydrat trong xi măng, sự thay đổi khí hậu có tác động như thế nào đối với bê tông, sự khuếch tán của các ion canxi trong dung dịch lỗ rỗng thực tế diễn ra như thế nào. Trong số các mô hình cacbonat đã có [1,2], mô hình của Barry & Sellier [4] cung cấp nhiều nhất các thông số liên quan đến các khía cạnh đã được đề cập. Các phương trình cơ bản của mô hình này đã được sử dụng trong bài báo.



## 2. Mô hình số hóa hiện tượng cacbonat của bê tông

### 2.1 Mô hình tiếp cận

Mô hình do Barry & Sellier đề xuất [4] với giả thiết vật liệu bê tông bao gồm ba pha (lỏng, rắn và khí), các phản ứng hóa học như hòa tan, kết tủa, bay hơi và hóa lỏng đều xảy ra tại bề mặt các pha. Mô hình được xây

<sup>1</sup>TS, Khoa Cầu đường, Trường Đại học Xây dựng. E-mail: ngovietduc@nuce.edu.vn; ngovietduc194gp@gmail.com.



dụng dựa trên ba phương trình cân bằng khối lượng, cân bằng lượng nước, lượng dioxit cacbon và mật độ ion canxi trong vật liệu.

## 2.2 Các phương trình cân bằng

- Phương trình cân bằng lượng nước:

$$\rho_l \cdot \phi \cdot \frac{\partial S_r}{\partial t} = -\text{div} \left[ \frac{K^\phi \cdot \rho_l}{\eta} k_{sl} \cdot p'_{cap} \cdot h_r \cdot \text{grad}(S_r) \right] - k_{sl} \cdot M_{H2O} \cdot n_w \cdot \frac{\partial Ca}{\partial t} - \rho_l \cdot S_r \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (1)$$

Trong đó, vé trái của phương trình thể hiện sự thay đổi lượng nước trong một đơn vị thể tích của vật liệu, sau một đơn vị thời gian; số hạng đầu tiên của vé phải thể hiện dòng nước sinh ra do sự thay đổi của độ ẩm bên ngoài; số hạng thứ 2 và 3 lần lượt thể hiện sự thay đổi lượng nước khi các hydrat hòa tan để hình thành canxi cacbonat và khi độ rỗng thay đổi. Với  $S_r$ ,  $\phi$  và  $K^\phi$  ( $m^2$ ) lần lượt là độ bão hòa, độ rỗng và hệ số thẩm của vật liệu.

- Phương trình bảo toàn lượng dioxit cacbon:

$$\phi \cdot (1 - S_r) \cdot \frac{\partial p_c}{\partial t} = \text{div} [f_{(\phi, S_r)} \cdot D_{CO_2} \cdot \text{grad}(p_c)] - R \cdot T \cdot \frac{\partial n_{cal}}{\partial t} + \phi \cdot p_c \cdot \frac{\partial S_r}{\partial t} - (1 - S_r) \cdot p_c \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2)$$

Trong phương trình này, số hạng đầu tiên thể hiện dòng  $CO_2$  hình thành do có sự chênh lệch về mật độ giữa môi trường bên ngoài và trong bê tông. Các số hạng còn lại trong vé phải của phương trình thể hiện cho sự tiêu thụ dioxit cacbon trong quá trình cacbonat. Trong đó,  $p_c$  (Pa) và  $D_{CO_2}$  ( $m^2/s$ ) là áp suất và hệ số khuếch tán của  $CO_2$  trong pha khí.

- Phương trình bảo toàn mật độ ion canxi:

$$\left( S_r \cdot \phi + k_{sl} \cdot \frac{dn_{cas}}{dCa} \right) \frac{\partial C_a}{\partial t} = -\text{div} \left[ C_a \cdot \frac{w_l}{\rho_l} - D_{Ca} \cdot \text{grad}(C_a) \right] - \frac{\partial n_{cal}}{\partial t} - \phi \cdot C_a \cdot \frac{\partial S_r}{\partial t} - S_r \cdot C_a \cdot \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3)$$

Với phương trình này, dòng di chuyển của các ion canxi được hình thành do sự chênh lệch về mật độ, cùng với tác động của dòng nước trong vật liệu (công thức 1). Sự chênh lệch mật độ ion canxi sinh ra do tốc độ các phản ứng hòa tan các hydrat trong vật liệu diễn ra không đồng đều. Trong đó,  $C_a$  ( $mol/m^3$ ) là mật độ ion canxi trong pha lỏng;  $n_{cas}$  là mật độ canxi trong pha rắn ( $mol/m^3$ ) và  $D_{Ca}$  ( $m^2/s$ ) là hệ số khuếch tán của ion canxi trong dung dịch lỗ rỗng.

## 2.3 Các công thức khác

Một số công thức bổ sung được tác giả sử dụng giúp việc đánh giá quá trình cacbonat được chi tiết và toàn diện hơn.

- Sự thay đổi độ rỗng:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -k_{sl} \cdot \frac{dV_{ds}}{dC_a} \cdot \frac{\partial C_a}{\partial t} - V_{CaCO_3} \cdot \phi \cdot S_r \cdot \frac{\partial n_{cal}}{\partial t} \quad (4)$$

Sau quá trình cacbonat, độ rỗng của bê tông giảm xuống do có sự chênh lệch về thể tích giữa các hydrat ban đầu và các sản phẩm sau phản ứng [5]. Trong đó,  $k_{sl}$  là hệ số thể hiện sự ảnh hưởng của độ bão hòa đến các phản ứng hóa học;  $V_{ds}$  và  $V_{CaCO_3}$  ( $m^3/mol$ ) là thể tích mol của các hydrat và  $CaCO_3$ .

- Tốc độ hòa tan của portlandite  $Ca(OH)_2$ :

$$\frac{\partial n_{CH}}{\partial t} = -k_{sl} \cdot k_H \cdot k_{CH} \cdot p_c \quad (5)$$

Portlandite là một hydrat quan trọng trong vữa xi măng, quyết định tốc độ của quá trình cacbonat và đây cũng là hydrat đầu tiên phản ứng với  $CO_2$  để tạo thành  $CaCO_3$ . Trong đó  $k_{CH}$  là hệ số của quá trình hình thành canxit từ portlandite [9,10];  $k_H$  ( $mol/m^3/Pa$ ) là hệ số Henry.

- Tốc độ hòa tan của các hydrat khác

Được đặc trưng bởi tốc độ hòa tan của hydro silicat canxi (CSH).

$$\frac{\partial n_{CSH}}{\partial t} = -k_{sl} \cdot k_H \cdot k_{CSH} \cdot p_c \quad (6)$$

trong đó  $k_{CSH}$  là hệ số thể hiện cho khả năng hòa tan của CSH [9,10].

- Tốc độ hình thành canxit ( $CaCO_3$ )

Tốc độ hình thành canxit được thể hiện bằng tốc độ hòa tan của portlandite và của các hydrat khác (chủ yếu là CSH), trong đó  $\alpha_{HYD}$  hệ số cân bằng động giữa lượng portlandite, CSH và lượng canxit trong vật liệu [1].

$$\frac{\partial n_{cal}}{\partial t} = \left( \frac{\partial n_{CH}}{\partial t} + \frac{\partial n_{CSH}}{\partial t} \cdot \frac{1}{\alpha_{HYD}} \right) \quad (7)$$

- Phương trình truyền nhiệt trong vật liệu [12]:

$$\rho_{betong} c_{betong} \cdot \frac{\partial(1-\phi)T}{\partial t} = -\text{div}[\lambda_{betong} \cdot \text{grad}(T)] \quad (8)$$

trong đó:  $\rho_{betong} = 2300 (\text{kg/m}^3)$  là khối lượng riêng,  $c_{betong} = 960 (\text{J/kg/K})$  là đặc tính về nhiệt và  $\lambda_{betong} = 0.92 (\text{J/kg/K})$  là độ dẫn nhiệt của bê tông [12].

Nhiệt độ có ảnh hưởng đến quá trình hấp thụ/bay hơi của nước, sự khuếch tán của các ion, các dòng di chuyển của pha khí, pha lỏng trong dung dịch lỗ rỗng và các phản ứng hóa học trong quá trình cacbonat [12]. Vì vậy nhiều thông số và biến số của mô hình sẽ bị thay đổi theo biến số nhiệt độ: hệ số khuếch tán của  $\text{CO}_2$  tăng theo quá trình tăng của nhiệt độ [7], sự ổn định hóa học của portlandite (cũng như hydrat khác) giảm khi nhiệt độ tăng lên [6], hệ số Henry mô tả các trạng thái cân bằng giữa pha khí và pha lỏng cũng bị thay đổi theo nhiệt độ [11], độ nhớt của nước giảm khi nhiệt độ tăng [11] và nhiệt độ làm thay đổi các đường cong hấp thụ/bốc hơi [7].

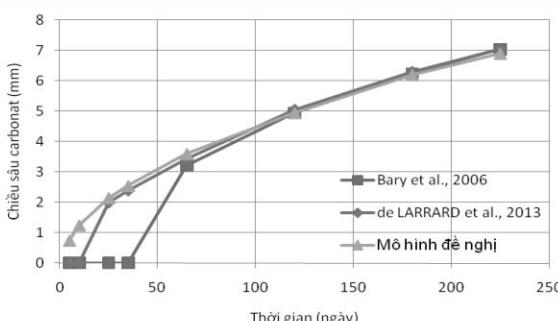
#### 2.4 Chiều sâu cacbonat

Chiều sâu cacbonat được ước tính thông qua lượng portlandite còn lại trong vật liệu [1,2,6,8,10]. Các khu vực bê tông bị cacbonat được xác định là khu vực mà ở đó lượng portlandite còn lại là ít hơn 10% đối với các thí nghiệm cacbonat tăng tốc trong phòng thí nghiệm dưới điều kiện giàu  $\text{CO}_2$ , lượng  $\text{CO}_2$  chiếm 50% thể tích khí [6,10] và ít hơn 50% với vật liệu bê tông xi măng (BTXM) để cacbonat tự nhiên, thông thường lượng  $\text{CO}_2$  chiếm khoảng 0.035% thể tích khí trong môi trường tự nhiên [3].

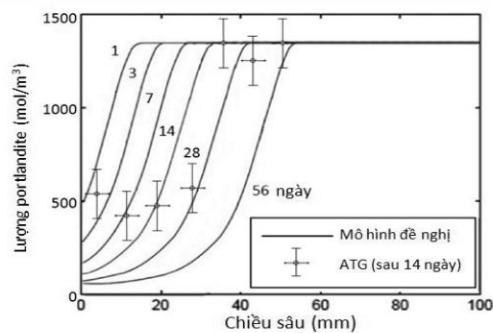


#### 3. Đổi chiều mô hình

Mô hình được xây dựng theo phương pháp phần tử hữu hạn trong phần mềm mô phỏng Comsol Multiphysics. Quá trình cacbonat tự nhiên đã được mô phỏng trong phần mềm với các điều kiện khí hậu thực tế cùng các thông số của vật liệu BTXM, các đặc tính cơ lý, hóa học. Chiều sâu cacbonat dự báo từ mô hình đề xuất được so sánh với kết quả của các mô hình trước đó [7,10], trong cùng một điều kiện khai báo, các thông số đầu vào giống nhau (Hình 1).



Hình 1. So sánh chiều sâu cacbonat dự kiến với các mô hình có trước [7,10]



Hình 2. So sánh lượng portlandite dự kiến với kết quả thực nghiệm [9]

Với quá trình cacbonat tăng tốc trong phòng thí nghiệm, so sánh với kết quả thực nghiệm từ [9], mô hình không cho một kết quả phù hợp ở giai đoạn 14 ngày, sai lệch khá xa so với kết quả đo thực nghiệm (Hình 2). Tuy nhiên, chúng ta có thể hiểu đó là một kết quả tắt yếu, vì thực tế giá trị các thông số của mẫu thí nghiệm đều là các giá trị ngẫu nhiên, nên kết quả đầu ra phải là một dải giá trị chứ không thể là một kết quả duy nhất.



#### 4. Các thông số chính của mô hình

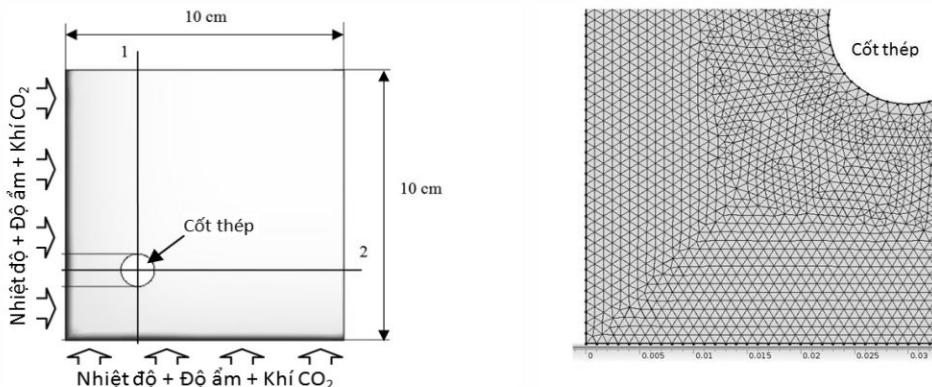
##### 4.1 Kích thước mẫu

Một mô hình hai chiều đã được thiết lập có kích thước  $10 \times 10 \text{ cm}$ , thể hiện cho một kết cấu bê tông cốt thép với lớp bê tông bảo vệ dày 3cm. Kết cấu có hai bề mặt chịu ảnh hưởng trực tiếp của khí  $\text{CO}_2$ , nhiệt độ và độ ẩm thể hiện cho tác động của các điều kiện khí hậu. Các phần tử của mô hình được định nghĩa theo mạng lưới tam giác đều với khoảng cách giữa các nút là 1mm. Tốc độ cacbonat được ước tính theo 2 mặt cắt 1 và 2, là hướng ngắn nhất từ bề mặt tiếp xúc đến cốt thép. Cấu tạo chi tiết của mẫu khai báo và hình ảnh lưới chia được thể hiện trong Hình 3.



#### 4.2 Loại bê tông sử dụng

Hai loại bê tông khác nhau được sử dụng: bê tông có độ rỗng nhỏ, hàm lượng các hydrat trong xi măng ít (C45) để hạn chế tốc độ cacbonat và bê tông có độ rỗng lớn, hàm lượng các hydrat trong xi măng nhiều (C25) để tăng tốc quá trình cacbonat, các thông số cơ bản được thể hiện trong Bảng 1.



**Hình 3. Kích thước và độ chính xác lưới chia của mô hình khai báo**

**Bảng 1. Thông số cơ bản của 2 loại bê tông sử dụng [3]**

|   |   | Bê tông C45  | Bê tông C25                             |
|---|---|--|---|
| <b>Thành phần xi măng (%)</b>   | Clinker<br>SiO <sub>2</sub><br>Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub><br>Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub><br>CaO<br>SO <sub>3</sub>         | 98.74<br>14.0<br>6.0<br>4.5<br>68.0<br>3.45  | 96<br>20.3<br>5.6<br>2.3<br>64.2<br>3.2 |
| <b>Hỗn hợp bê tông (kg/m<sup>3</sup>)</b>   | X (xi măng)<br>N (nước)<br>Đ (đá)<br>C (cát)  | 340<br>153<br>1050<br>850  | 295<br>200<br>1020<br>760               |
| <b>Hàm lượng các hydrat (mol/m<sup>3</sup>)</b>   | n <sub>CH,0</sub><br>n <sub>CSH,0</sub>   | 1440<br>1118   | 1508<br>866                             |
| Độ rỗng φ <sub>0</sub><br>Hệ số thẩm K <sub>0</sub> (m <sup>2</sup> )<br>Hệ số khuyếch tán của CO <sub>2</sub> (m <sup>2</sup> /s)<br>Độ hydrat α <sub>HYD</sub><br>Hệ số động của quá trình hòa tan-kết tủa các hydrat α <sub>CSH</sub> (-)<br>Thông số ảnh hưởng của chiều dày lớp vỏ canxit λ (m)<br>Bán kính ban đầu của portlandite R <sub>p,0</sub> (m) | 0.12<br>2.1×10 <sup>-22</sup><br>3.84×10 <sup>-5</sup><br>0.56<br>4×10 <sup>-4</sup><br>5×10 <sup>-7</sup><br>20×10 <sup>-6</sup> | 0.155<br>5×10 <sup>-17</sup><br>6.2×10 <sup>-5</sup><br>0.893<br>4×10 <sup>-4</sup><br>5×10 <sup>-7</sup><br>20×10 <sup>-6</sup> |   |

#### 4.3 Điều kiện biên

Để phù hợp với điều kiện sử dụng thực tế của các kết cấu BTXM ở ngoài trời, mô hình tính với trường hợp cacbonat tự nhiên. Trên hai bề mặt chịu tác động, áp suất CO<sub>2</sub> là 35Pa (lượng CO<sub>2</sub> khoảng 0.035%), điều kiện nhiệt độ và độ ẩm được lấy theo số liệu đo tại thành phố Toulouse - Pháp trong năm 2010 [6], với nhiệt độ và độ ẩm trung bình năm lần lượt là 291<sup>0</sup>K (18<sup>0</sup>C) và 78%.

Mô hình tính với trường hợp cacbonat tự nhiên.



#### 5. Kết quả và phân tích

##### 5.1 Ảnh hưởng của bước tính thời gian đến các điều kiện biên

Bước tính thời gian khác nhau, từ 5 ngày đến 365 ngày được xây dựng cho cả nhiệt độ và độ ẩm tương đối. Các kết quả tính chiều sâu cacbonat được trình bày trong Bảng 2, sự thay đổi của kết quả khi tăng các bước thời gian là không nhiều: sự khác biệt khoảng 10% nếu so bước thời gian 5 ngày với 365 ngày, sau 50 năm cacbonat tự nhiên, với cả bê tông C45 và C25.

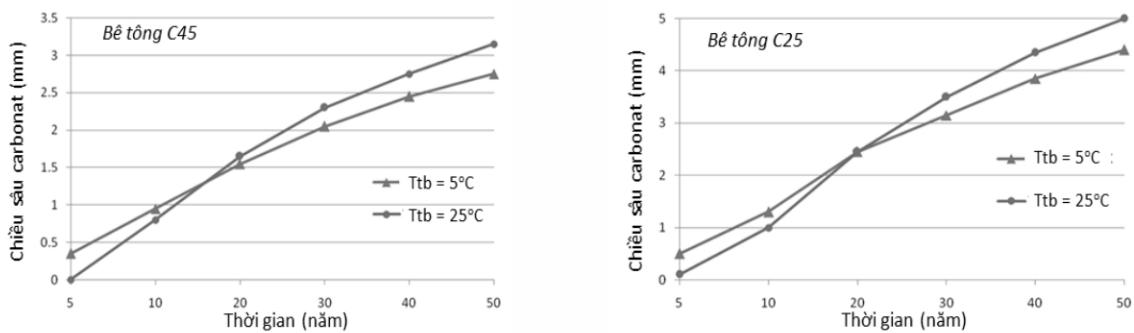
Có thể thấy rằng với bước thời gian lớn, chiều sâu cacbonat giảm. Đó là do khi dùng các bước thời gian lớn, giá trị trung bình của nhiệt độ và độ ẩm tương đối giảm, cùng với sự mất đi các giá trị tối đa và tối thiểu, đó là những thuận lợi dẫn đến tỷ lệ cacbonat giảm. So sánh thời gian tính toán giữa các bước thời gian khác nhau, có thể thấy rằng sử dụng bước thời gian là 30 ngày có thể đảm bảo được độ chính xác trong khi giảm đáng kể thời gian tính.

**Bảng 2. Sự khác biệt của chiều sâu cacbonat tự nhiên sau 50 năm**

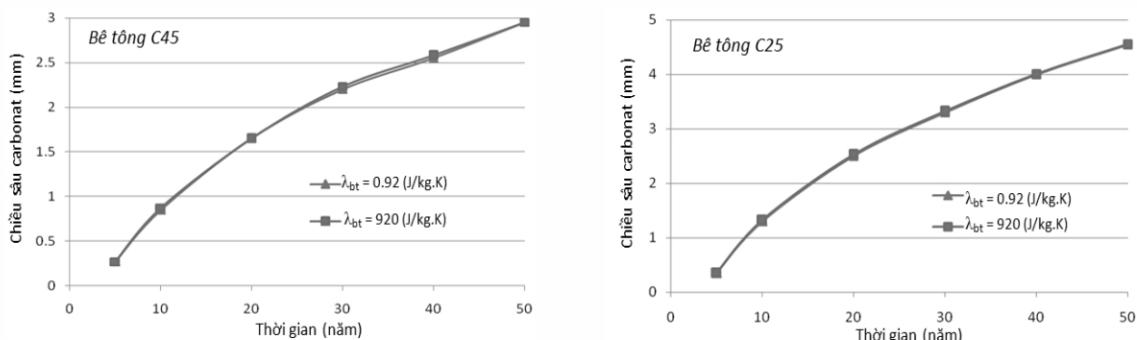
| Bước thời gian  | Chiều sâu cacbonat $X_c$ (mm) |                    |
|-----------------|-------------------------------|--------------------|
|                 | Bê tông C45                   | Bê tông C25        |
| Hr_T - 5 ngày   | $X_{c,C45}$                   | $X_{c,C25}$        |
| Hr_T - 10 ngày  | $0.986\%X_{c,C45}$            | $0.979\%X_{c,C25}$ |
| Hr_T - 30 ngày  | $0.966\%X_{c,C45}$            | $0.968\%X_{c,C25}$ |
| Hr_T - 90 ngày  | $0.946\%X_{c,C45}$            | $0.947\%X_{c,C25}$ |
| Hr_T - 365 ngày | $0.915\%X_{c,C45}$            | $0.926\%X_{c,C25}$ |

### 5.2 Sự truyền nhiệt

Ảnh hưởng của nhiệt độ trung bình môi trường đến tốc độ cacbonat được minh họa cụ thể trong Hình 4 đối với bê tông C45 và C25. Có thể thấy rằng, sau 50 năm, sự khác biệt là khoảng 0,5mm với nhiệt độ trung bình môi trường là  $278^0\text{K}$  ( $5^0\text{C}$ ) và  $298^0\text{K}$  ( $25^0\text{C}$ ).

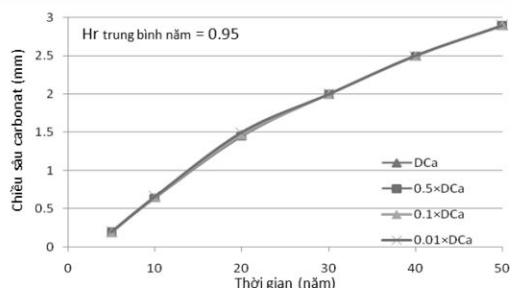
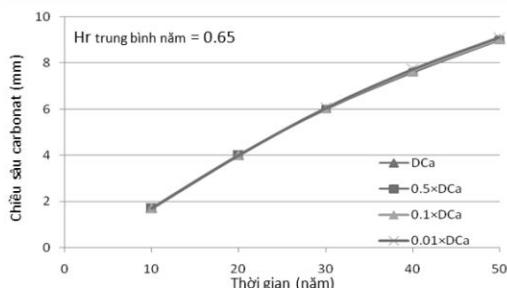
**Hình 4. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến chiều sâu cacbonat tự nhiên**

Sự thay đổi của nhiệt độ trong bê tông có khả năng tác động đến hiện tượng cacbonat được thể hiện bằng mô hình sự truyền nhiệt trong chất rắn, công thức 8. Trong phần này chúng ta giả sử rằng độ dẫn nhiệt thay đổi từ 1 đến 1000 lần. Tuy nhiên, kết quả cho thấy chiều sâu cacbonat gần như không thay đổi, minh họa trong Hình 5. Với kết quả này, chúng ta có thể đề nghị coi như nhiệt độ trong chiều dày lớp bê tông bảo vệ là không đổi và bằng nhiệt độ bên ngoài, nếu bước tính của mô hình và bước thời gian của các điều kiện biên được quy định ít nhất là 30 ngày.

**Hình 5. Chiều sâu cacbonat với các độ dẫn nhiệt khác nhau**

### 5.3 Sự khuếch tán của ion canxi

Sự di chuyển của các ion này phụ thuộc vào mức độ bão hòa và độ rỗng của vật liệu thông qua hệ số khuếch tán của canxi (công thức 3). Có thể thấy trong Hình 6, sự di chuyển của các ion canxi là rất hạn chế, ngay cả với một giá trị cao của hệ số khuếch tán trong điều kiện độ ẩm tương đối trung bình hàng năm cao và bê tông có độ rỗng lớn. Điều này cho thấy sự khuếch tán của khí  $\text{CO}_2$  trong dung dịch lỗ rỗng lớn hơn rất nhiều sự khuếch tán của dòng ion, hay nói cách khác các ion sinh ra trong quá trình phản ứng được tiêu thụ ngay tại chỗ, đó là giả thiết về sự cân bằng ion cục bộ.



**Hình 6.** Chiều sâu cacbonat dưới sự thay đổi hệ số khuyếch của dòng ion canxi trong điều kiện thông thường và điều kiện độ ẩm cao - sử dụng bê tông có độ rỗng lớn C25 ( $\phi_0 = 0.18$ )

## C

### 6. Kết luận và kiến nghị

Tác giả đã đề xuất một mô hình phần tử hữu hạn thể hiện khả toàn diện hiện tượng cacbonat của bê tông dựa trên một số kết quả từ các nghiên cứu trước. Mô hình không chỉ thể hiện được sự thay đổi một số tính chất cơ bản của vật liệu BTXM theo thời gian, phụ thuộc vào các yếu tố ảnh hưởng mà còn ước tính được sự thay đổi tốc độ tác động của các yếu tố này khi tính chất vật liệu biến đổi.

Các kết quả tính cho thấy, khi mô hình sử dụng các bước thời gian mô phỏng điều kiện biên đủ dài (30 ngày) và chiều dày lớp bê tông bảo vệ không quá dày (khoảng 3cm) thì không cần thiết phải sử dụng mô hình truyền nhiệt trong vật liệu, có thể bỏ phương trình 8. Khi đó, nhiệt độ trong lớp bê tông bảo vệ có thể coi là tương đương với nhiệt độ bên ngoài.

Nghiên cứu cũng tập trung vào quá trình khuếch tán của các ion canxi, quá trình này chậm hơn nhiều so với các quá trình khuếch tán của nước và của  $\text{CO}_2$ . Vậy nên, việc sử dụng giả thuyết cân bằng hóa học cục bộ các ion canxi là thỏa đáng. Vì vậy, việc mô hình hóa quá trình cacbonat sẽ chỉ cần 2 phương trình cân bằng khối lượng (nước và  $\text{CO}_2$ ) thay vì sử dụng 3 phương trình như trước (có thể bỏ phương trình cân bằng mật độ ion canxi, phương trình 3).

Việc loại bỏ 2 phương trình trong mô hình ước tính tốc độ cacbonat của vật liệu BTXM giúp đơn giản bài toán, giảm số lượng biến đầu vào cần khai báo, giảm thời gian tính toán trong khi không ảnh hưởng đến độ chính xác của kết quả.

### Tài liệu tham khảo

- de Larrard.T, Bastidas-Arteaga.E, Duprat.F, Schoefs.F (2014), "Effects of climate variations and global warming on the durability of RC structures subjected to carbonation", *Civil Engineering and Environmental Systems*, 31:2, 153-164.
- Bakker.R (1993), *Model to calculate the rate of carbonation in concrete under different climatic conditions*, Technical report, CMJ bv Laboratorium, IJmuiden, The Netherlands.
- Thierry.B, Baroghel-Bouny.V, Orcesi.A (2012), "Durability design of reinforced concrete structures submitted to carbonation by using an probabilistic modelling", *Concrete Repair, Rehabilitation and Retrofitting III (ICCRRI 12)*, 148-149.
- Bary.B, Sellier.A (2004), "Coupled moisture-carbon dioxide-calcium transfer model for carbonation of concrete", *Cement and Concrete Research*, vol. 34, 1859-1872.
- Bary.B (2005), "Simulation de la carbonatation des matériaux cimentaires de la barrière ouvrage ANDRA en conditions insaturées", *Rapport Technique*, CEA 05-702.
- de Larrard.T, Bary.B, Adam.E, Kloss.F (2013), "Influence of aggregate shapes on drying and carbonation phenomena in 3D concrete numerical samples", *ELSEVIER, Computational Materials Science* 72, 1–14.
- Bazant.Z.P, Najjar.L.J (1972), "Modelling and numerical simulation of concrete carbonation", *Matériaux et Constructions* 5, 13–20.
- Thierry.M (2005), *Modélisation de la carbonatation atmosphérique des matériaux cimentaires, Prise en compte des effets cinétiques et des modifications microstructurales et hydriques*, Thèse de doctorat, LCPC.
- Bary.B, Mügler.C (2006), "Simplified modelling and numerical simulation of concrete carbonation in unsaturated conditions", *Revue européenne de génie civil* 10, 1049-1072
- Saeki.T, Ohga.H, Nagataki.S (1991), "Mechanism of carbonation and prediction of carbonation process of concrete", *Concr Libr JSCE*, 6:17-23.
- Di Luzio.G, Cusatis.G (2009), "Hygro-thermo-chemical modeling of high performance concrete", *Cement & Concrete Composites*, 31: 301–308.
- Saetta.A.V, Schrefler.B.A, Vitaliani.R.V (1993), "The carbonation of concrete and the mechanism of moisture, heat and carbon dioxide flow through porous materials", *Cement and Concrete Research*, 23: 61-72.