



MÔ PHỎNG ỨNG XỬ THỦY-NHIỆT CỦA VẬT LIỆU BÊ TÔNG BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ HÌNH LƯỚI

Nguyễn Trọng Dũng^{1*}, Phạm Đức Thọ¹, Hồ Anh Cương²

Tóm tắt: Bê tông là vật liệu không đồng nhất có ứng xử phức tạp liên quan đến sự thay đổi vi cấu trúc của loại vật liệu này trong quá trình biến đổi cơ học (mechanic), truyền nhiệt (heat transfer) và truyền chất (mass transfer). Việc dự báo và đánh giá ứng xử phức tạp này của bê tông bằng phương pháp phân tử hữu hạn hoặc sai phân hữu hạn truyền thống có một số hạn chế như kết quả mô phỏng phụ thuộc vào kích thước của phân tử, không mô tả được sự phân bố ngẫu nhiên của cốt liệu hạt. Những hạn chế này có thể được khắc phục bằng phương pháp mô hình lưới (lattice model). Phương pháp này dựa trên giả thuyết mô trường vật liệu được hợp thành bởi các phân tử lưới rời rạc, phân bố ngẫu nhiên theo cấu trúc Voronoi cho phép dễ dàng mô phỏng sự không đồng nhất của các pha trong bê tông (hồ xi măng, cốt liệu, vùng chuyển tiếp ITZ). Trong bài báo này, nhóm tác giả đã ứng dụng phương pháp mô hình lưới để phát triển và số hóa trong mã nguồn mở (open source) OOFEM các mô hình ứng xử thủy-nhiệt của vật liệu bê tông. Tính đúng đắn của mô hình số phát triển trên OOFEM sẽ được kiểm chứng thông qua việc so sánh với kết quả giải tích và kết quả mô phỏng thu được bằng phương pháp phân tử hữu hạn trên một phần mềm khác trong bài toán xác định hệ số khuếch tán (thủy học) và bài toán truyền nhiệt trong vật liệu bê tông.

Từ khóa: Mô hình lưới; bê tông; ứng xử thủy - nhiệt.

Simulation of thermal - hydral behavior of concrete by lattice model approach

Abstract: Concrete is a heterogeneous material which have complex behavior related to its change in microstructure during the mechanical transformation, heat transfer and mass transfer processes. The prediction and assessment of this complex behavior by using the numerical simulation tools such as traditional finite element method or finite difference method showed some restrictions: the simulation results depends on the element size, difficult to describe the random distribution of aggregates. This method is based on a hypothesis that the domain of material is discretized randomly by using Voronoi tessellation which allows to simulate the heterogeneity of diffirent phases in concrete (cement paste, aggregates, interfacial transition zone - ITZ). In this paper, the authors have used this lattice method to developpe and implement the thermal-hydral behavior of concrete in the open source OOFEM. In order to validate the model, the numerical simulation results will be compared with the analytical and numerical results obtained by the another software based on Finite Element Method for the problem of determining diffusion coefficient and heat transfer in concrete.

Keywords: Lattice model; concrete; thermal - hydral behavior.

Nhận ngày 9/4/2017; sửa xong 10/5/2017; chấp nhận đăng 30/5/2017

Received: April 9, 2017; revised: May 10, 2017; accepted: May 30, 2017



1. Mở đầu

Bê tông được xem là vật liệu không đồng nhất gồm nhiều pha (hồ xi măng, cốt liệu, vùng chuyển tiếp ITZ) phân bố ngẫu nhiên với kích cỡ biến thiên từ cấp độ nanomet (C_2S -CSH, C_3S -CSH... của hồ xi măng) đến cấp độ centimet (hạt cốt liệu thô lớn nhất) cùng với đó là một hệ thống các lỗ rỗng có thể được lập đầy toàn bộ hoặc một phần bởi nước (trạng thái không bão hòa) với các tính chất cơ học, thủy học và nhiệt học rất khác nhau. Chính vì vậy mà ứng xử cơ học của vật liệu bê tông rất phức tạp khi chịu tác dụng đồng thời của các tác nhân khác nhau (tải trọng cơ học, độ ẩm, nhiệt độ...). Cần ghi nhớ rằng chỉ có các lỗ rỗng và khe nứt liên kết mới tham gia vận chuyển vật chất trong bê tông, vì vậy khi mô hình số vật liệu bê tông phải dựa trên lý thuyết cơ học môi trường rỗng không bão hòa. Lý thuyết này lần đầu được đề xuất bởi Terzaghi, được gọi là lý thuyết cố kết của đất, sau đó được phát triển bởi Biot, cho bài toán cố kết đàn hồi trong trường hợp đẳng nhiệt. Trên cơ sở lý thuyết này, người ta phát triển các phương trình cơ học (mechanic), truyền nhiệt (heat transfer), truyền chất (mass transfer) trong môi trường rỗng để mô tả các ứng xử Nhiệt học, Thủy học và Cơ học của bê tông.

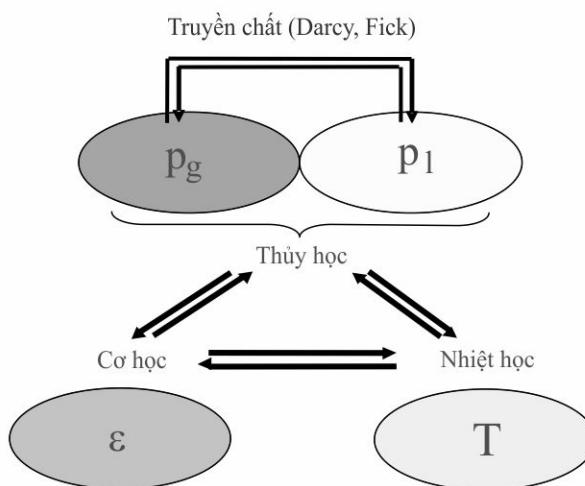
¹TS, Khoa Xây dựng, Trường Đại học Mỏ - Địa chất.

²TS, Khoa Công trình, Trường Đại học Giao thông Vận tải.

*Tác giả chính. E-mail: nguyentrongdung@humg.edu.vn.

Các tác giả trong [1-3] đã nghiên cứu ứng xử Nhiệt - Thủy - Cơ của bê tông ở cấp độ cấu kiện trong đó bê tông được xem như vật liệu đồng nhất. Các tính chất của bê tông được xác định bằng phương pháp đồng nhất hóa các pha thành phần (hồ xi măng, cốt liệu, vùng chuyển tiếp ITZ). Cách tiếp cận này có nhược điểm là không cho phép tính đến ứng suất tiếp sinh ra ở mặt tiếp xúc giữa hồ xi măng cốt liệu do biến dạng không tương thích của ba pha này khi nhiệt độ tăng cao (có thể dẫn đến hình thành vi khe nứt micro-crack). Ngoài ra, còn phải kể đến sự phân bố không đồng nhất của ứng suất trong khối bê tông do sự phân bố ngẫu nhiên của cốt liệu và các lỗ rỗng mà cách tiếp cận ở cấp độ cấu kiện không giải thích được. Có thể nêu ra nhiều nghiên cứu thực nghiệm [4, 5] minh chứng rằng các vết nứt bê tông có liên quan đến tính không đồng nhất khi bê tông chịu nhiệt độ cao, đồng thời những nghiên cứu này cũng đã chỉ ra ảnh hưởng của sự phân bố cốt liệu cũng như loại cốt liệu đến sự phát triển vết nứt trong bê tông.

Để khắc phục những hạn chế của cách tiếp cận trên, nhiều nghiên cứu đã đề xuất phương pháp mô phỏng ở cấp độ vật liệu bằng cách đưa ra định nghĩa "Phần tử khối đại diện" (Representative Element Volume - REV) cho phép tích hợp tính chất không đồng nhất của vật liệu bê tông. Trên cơ sở cách tiếp cận này, nhiều tác giả [6-8] đã đề xuất sử dụng phương pháp mô hình lưới để mô phỏng cấu trúc và ứng xử Nhiệt - Thủy - Cơ của vật liệu bê tông (Hình 1). Ưu điểm của phương pháp này là kết quả mô phỏng không phụ thuộc vào kích thước phần tử [9] và cho phép mô tả sự phân bố ngẫu nhiên của cốt liệu hạt [10]. Trên cơ sở phương pháp này, các bài toán về ứng xử Nhiệt - Thủy - Cơ của bê tông như bài toán truyền nhiệt tuyến tính, bài toán truyền chất trong khe nứt... sẽ được giải quyết dựa trên việc số hóa các phương trình cơ học, truyền nhiệt, truyền chất [11, 12].



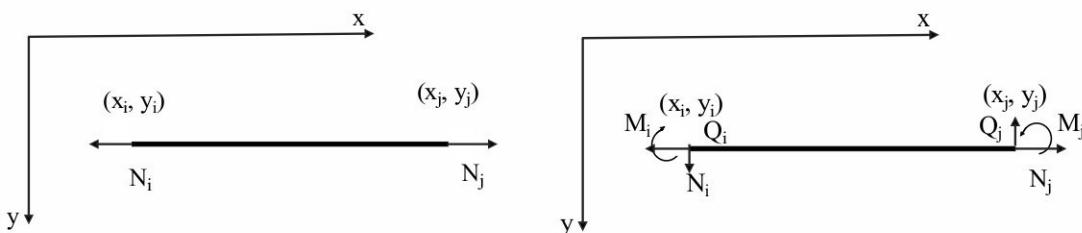
Hình 1. Sơ đồ ứng xử tổ hợp Nhiệt - Thủy - Cơ của bê tông [13].



2. Mô hình lưới

2.1 Khái niệm mô hình lưới

Mô hình lưới ban đầu được dùng để mô hình quá trình phát triển vết nứt trong bê tông [11-12], [14-15]. Trong phương pháp này vật liệu nghiên cứu được rời rạc hóa thành các phần tử dạng dầm (truyền lực pháp tuyến, lực cắt và mô men uốn) hoặc dạng thanh (chỉ truyền lực pháp tuyến) dựa trên sơ đồ Voronoi [16] (Hình 2).



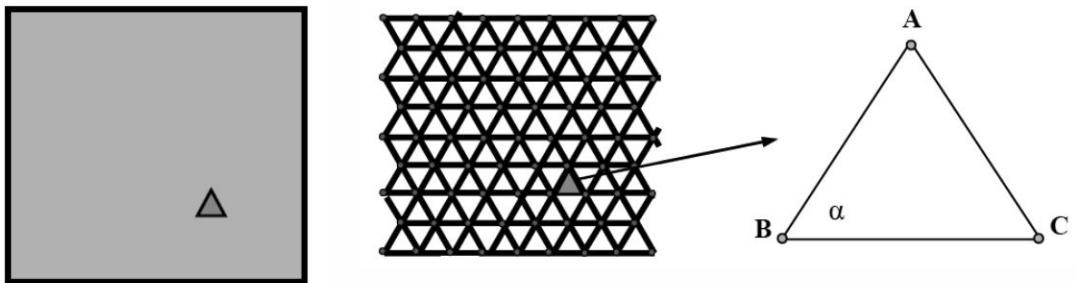
a) Phân tử dạng thanh

b) Phân tử dạng dầm

Hình 2. Các dạng phân tử mô hình lưới [14]



Hệ lưới dạng thanh được tạo ra bởi các lưới tam giác cơ bản, như Hình 3. Các thanh AB, BC, CA được liên kết với nhau bởi các chốt. Như vậy, các thanh này chỉ chịu kéo hoặc nén. Để đơn giản bài toán, các thanh có cùng chiều dài (l), cùng mô đun Young E_b , cùng mặt cắt ngang S . Như vậy các thanh sẽ có cùng độ cứng ($K_b = E_b \cdot l \cdot S$)

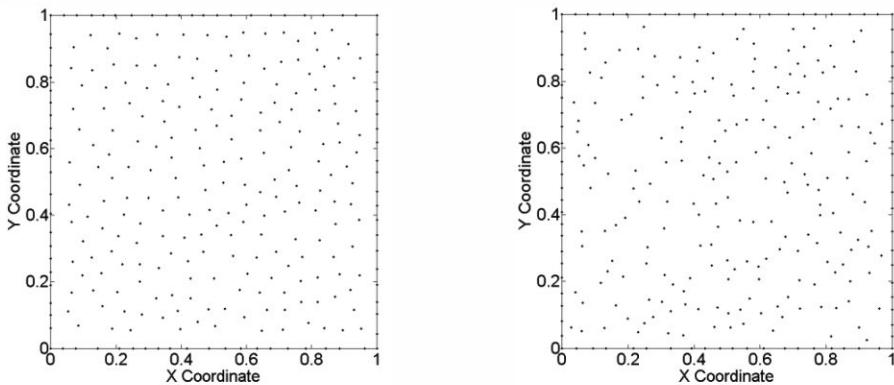


Hình 3. Lưới tam giác dạng thanh

Trong mô hình số, để đảm bảo vật liệu làm việc một cách tự nhiên, các chỉ tiêu phá hủy của các phần tử được phân bố 1 cách ngẫu nhiên. Các phần tử thanh sẽ bị loại bỏ khi lực pháp tuyến trong phần tử này vượt qua cường độ chịu kéo hoặc nén của vật liệu hoặc bị giảm yếu thông qua mối quan hệ ứng suất-biến dạng. Việc kiểm tra này được thực hiện với tất cả các phần tử ở mỗi bước thời gian, trước khi chuyển sang bước tiếp theo. Với hệ thống các phần tử đàm [14], mỗi điểm nút có 3 bậc tự do $u_e = \{u_x, v_y, \phi_x, u_y, v_y, \phi_y\}^T$. Trong trường hợp lưới lattice có hình dạng hình học đều, mô đun đàn hồi, mô men quán tính,... là bằng nhau đối với tất cả các phần tử. Tuy nhiên, các thông số này có thể thay đổi để phù hợp với cấu trúc vi mô và tính không đồng nhất của vật liệu. Quá trình phá hủy của vật liệu được mô hình bằng phân tích đàn hồi tuyến tính khi chịu tác dụng của tải trọng và loại bỏ các phần tử có ứng suất kéo hoặc nén vượt qua cường độ chịu kéo hoặc nén của vật liệu hoặc thông qua mối quan hệ ứng suất-biến dạng.

2.2 Xây dựng mô hình lưới

Mô hình lưới được xây dựng dựa trên sơ đồ Voronoi [16]. Để có thể xây dựng mô hình lưới, trước hết phải xây dựng hệ thống định vị lưới dựa trên phân bố một cách ngẫu nhiên các điểm trong miền nghiên cứu. Có 2 thông số để xác định số lượng các điểm này, đó là: mật độ các điểm $0 < \rho_p < 1$ (mật độ càng nhỏ, thì phân bố các điểm càng rộng do số lượng điểm ít và ngược lại) và khoảng cách tối thiểu giữa các điểm d_{min} . Hai thông số này được sử dụng để kiểm soát số lượng điểm cũng như tính đồng nhất của miền nghiên cứu. Có hai phân bố thường được xem xét để nghiên cứu ảnh hưởng sắp xếp ngẫu nhiên các điểm: phân bố gần như đều và phân bố không đều (Hình 4).



a) Phân bố gần như đều $d_{min} = 0.05$ và $\rho_p = 0.5$

b) Phân bố không đều $d_{min} = 0.0316$ và $\rho_p = 0.2$

Hình 4. Phân bố điểm ngẫu nhiên trong miền nghiên cứu [17]

Để đảm bảo tốt điều kiện biên, các điểm sẽ được phân bố trên các góc và các cạnh biên trước. Khoảng cách giữa các điểm nằm trên cạnh biên sẽ nhỏ hơn khoảng cách các điểm nằm trong để đảm bảo tốt cấu trúc Voronoi (sẽ trình bày ở phần sau). Mỗi điểm phân bố trong miền nghiên cứu sẽ được kiểm tra để thỏa mãn khoảng cách từ điểm đó đến các điểm xung quanh lớn hơn khoảng cách tối thiểu d_{min} . Sau khi xây dựng xong hệ thống điểm định vị, lưới sẽ được xây dựng dựa trên thuật toán sau với hai khái niệm: đa giác Voronoi và tam giác Delaunay.



Định nghĩa đa giác Voronoi [16]

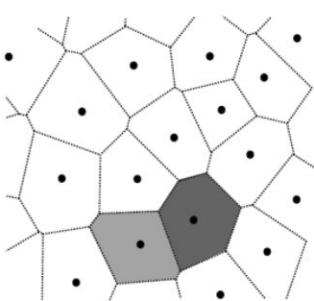
Cho tập hợp $S = \{S_1, S_2, \dots, S_n\}$ là tập hợp của n điểm trong mặt phẳng Euclide R^2 . Đa giác Voronoi liên kết với điểm S_i là tập hợp những điểm nằm trong mặt phẳng và gần điểm S_i nhất và có thể viết dưới dạng:

$$P(S_i) = \left\{ S \in R^2 / d(S, S_i) < d(S, S_j), i \neq j \right\} \quad (1)$$

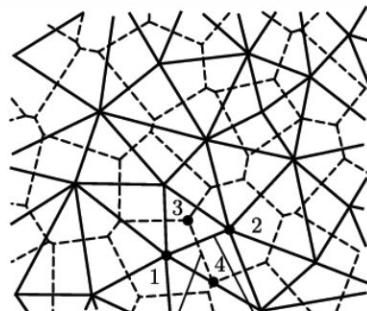
trong đó $d(S_i, S_j)$ là khoảng cách trong mặt phẳng R^2 . Nếu xem $H(S_i, S_j)$ là nửa mặt phẳng chứa điểm S_i và được xác định bởi trung tuyến của đoạn thẳng $S_i S_j$, thì đa giác Voronoi $P(S)$ liên kết với điểm S_i là giao của các nửa mặt phẳng $H(S_i, S_j)$:

$$P(S_i) = \cap H(S_i, S_j), i \neq j \quad (2)$$

Cấu trúc Voronoi là mặt phẳng hình học được tạo thành từ các cạnh của đa giác Voronoi (Hình 5a).



(a)



(b)

Hình 5.(a) Đa giác Voronoi, (b) Tam giác Delaunay

Định nghĩa tam giác Delaunay [16]

Các tam giác Delaunay được tạo thành bằng cách nối tâm của các đa giác Voronoi chung cạnh (Hình 5b) sao cho hệ tam giác hình thành phải thỏa mãn các tính chất sau:

- (1) Các cạnh của hai tam giác bất kỳ không cắt nhau trừ các cạnh tam giác chung đỉnh.
- (2) Thêm 1 cạnh khác bất kỳ vào hình thì đảm bảo ngược với tính chất (1).

Các cạnh của tam giác Delaunay là nơi đặt các phần tử dùng cho mô hình ứng xử cơ học và sự hình thành các phần tử theo phương pháp này được gọi chung là rời rạc Delaunay. Cấu trúc Voronoi có thể coi là đối ngẫu hình học của hệ tam giác Delaunay khi mỗi cạnh của mạng lưới này đều nằm trên đường trung trực của một cạnh nào đó thuộc hệ tam giác Delaunay (hay nói cách khác các đỉnh của các đa giác Voronoi chính là tâm đường tròn ngoại tiếp của các tam giác Delaunay). Các phần tử dùng để mô hình truyền chất (chất lỏng) được đặt dọc theo cạnh của các đa giác Voronoi và được lý tưởng hóa như những ống dẫn 1 chiều để áp dụng trong các mô hình ứng xử thủy học. Sự hình thành của cấu trúc Voronoi theo phương pháp này được gọi chung là rời rạc Voronoi. Sau khi hình thành lưới, tùy thuộc tính chất bài toán (mô hình ứng xử) mà các phần tử lưới được xây dựng theo các quy tắc khác nhau.

2.3 Mô phỏng đồng nhất và mô phỏng không đồng nhất

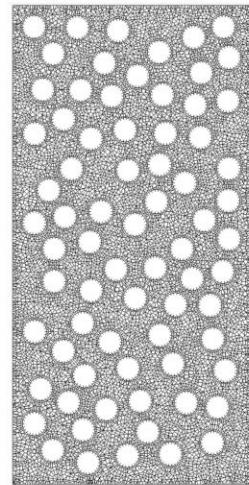
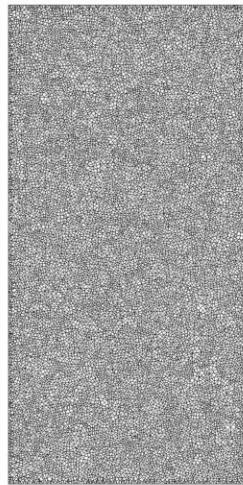
Ở cấp độ cấu kiện, bê tông được coi là vật liệu đồng nhất, tuy nhiên dưới ảnh hưởng của nhiệt độ hay co ngót, do hệ số giãn nở hay co ngót của các thành phần cốt liệu (cốt liệu hạt, vữa xi măng, vùng chuyển tiếp ITZ) là khác nhau nên phải xét đến tính không tương thích trong biến dạng của chúng [18]. Trong thực tế tính không tương thích này ảnh hưởng lớn đến sự hình thành và phát triển vết nứt của cấu kiện. Điều này đòi hỏi việc mô phỏng phải được thực hiện ở cấp độ trung gian (kích thước mẫu thí nghiệm) hay nói cách khác việc mô phỏng ở cấp độ này phải thể hiện rõ được đặc trưng hình học và tính chất khác nhau của 3 pha chính trong bê tông (cốt liệu hạt, vữa xi măng, vùng chuyển tiếp ITZ). Có thể nêu một số phương pháp cho phép tính đến tính chất không đồng nhất của bê tông trong quá trình mô phỏng như sau:

- Đưa một cách ngẫu nhiên các hình tròn với tọa độ tâm và bán kính khác nhau để mô phỏng cốt liệu hạt. Vùng chuyển tiếp ITZ được mô phỏng với chiều dày không đổi bao xung quanh các cốt liệu hạt. Sau khi hoàn thành mô phỏng hình học của các pha cốt liệu cũng như chia lưới, những phần tử thuộc các pha vật liệu khác nhau sẽ được gán các tính chất cơ học, nhiệt học và thủy học khác nhau (Hình 6).



- Tính không đồng nhất của vật liệu được mô phỏng bằng cách phân bố ngẫu nhiên các đặc trưng cơ học (mô đun đàn hồi E , năng lượng phá hủy G , giới hạn đàn hồi...). Hàm phân bố được dùng có thể là hàm phân bố Fuller, Gauss hay Weibull, tương ứng với các vật liệu khác nhau như vữa xi măng, cốt liệu hạt, vùng chuyển tiếp...

Với phương pháp mô phỏng lưới lattice, cách tiếp cận phân bố ngẫu nhiên hình học sẽ được lựa chọn trong việc mô phỏng tính không đồng nhất của vật liệu bê tông.



Vật liệu đồng nhất

Vật liệu không đồng nhất

Hình 6. Mô phỏng vật liệu bê tông ở cấp độ trung gian (cấp độ mẫu thí nghiệm)

C 3. Mô phỏng ứng xử thủy - nhiệt của bê tông bằng phương pháp mô hình lưới trong mã nguồn mở OOFEM [19]

Mã nguồn mở OOFEM [19] được viết bằng ngôn ngữ C++ và chỉ phát triển cho hệ điều hành Linux. OOFEM cho phép người sử dụng có thể phát triển các mô hình ứng xử của loại vật liệu mong muốn. Cấu trúc chương trình được thiết kế dạng mô đun giúp các nhóm nghiên cứu dễ dàng tích hợp các mô đun độc lập để xây dựng các ứng xử tổ hợp. Với các ưu điểm này, OOFEM có thể được sử dụng để phát triển và mô phỏng các bài toán cơ học, truyền chất và truyền nhiệt. Cấu trúc của phần mềm OOFEM gồm 3 mô đun chính: mô đun dùng để phân tích kết cấu (Structural Module, SM); mô đun phân tích truyền chất (Transport Module) và mô đun cơ học chất lỏng (Fluid mechanics Module, FM).

Khi giải quyết các bài toán về ứng xử của vật liệu bê tông bằng phương pháp mô hình lưới trong OOFEM, người sử dụng cần thực hiện 3 công việc chính:

- Thiết lập hình học và chia lưới miền nghiên cứu dựa trên các quy tắc về xây dựng mô hình lưới đã được giới thiệu ở trên. Thuật toán chia lưới được người sử dụng tự lập trình bằng ngôn ngữ C++.

- Thiết lập các điều kiện biên và điều kiện ban đầu bằng lập trình C++.

- Xây dựng các mô đun về ứng xử của vật liệu và gán ứng xử cho các phần tử lưới đã thiết lập. Để thực hiện nghiên cứu về ứng xử thủy - nhiệt của bê tông, nhóm nghiên cứu đã phát triển một mô đun về truyền dẫn chất lỏng (ứng xử thủy học) và một mô đun về truyền nhiệt không tuyến tính trong OOFEM (ứng xử nhiệt). Các mô đun này được xây dựng dựa trên các phương trình truyền chất và truyền nhiệt sẽ được giới thiệu chi tiết trong phần sau của bài báo.

3.1 Mô phỏng ứng xử thủy học của bê tông để xác định hệ số khuếch tán D

Trong mục này, tác giả thực hiện một mô phỏng 2D về ứng xử thủy học của bê tông trong OOFEM để xác định hệ số khuếch tán D . Hệ số này có vai trò quan trọng trong nghiên cứu tính bền vững của công trình bê tông trong môi trường có tính xâm thực như môi trường biển. Do chênh lệch về nồng độ ion clorua giữa trong và bề mặt ngoài bê tông, ion clorua sẽ xâm nhập vào trong bê tông. Khi ion clorua di chuyển đến mặt cốt thép, tùy thuộc và nồng độ mà có thể gây gỉ cốt thép. Gỉ cốt thép làm giảm mặt cắt ngang chịu lực của cốt thép, đồng thời gây nứt bề mặt bê tông (sản phẩm gỉ có tính trương nở), tạo điều kiện thuận lợi để ion clorua xâm nhập nhanh hơn, qua vi vết nứt. Trong thực tế, độ khuếch tán của vữa xi măng lớn hơn rất nhiều so với cốt liệu hạt nên nếu giả thiết tỷ lệ thể tích của cốt liệu hạt là c_1 có hệ số khuếch tán D_1 , tỷ lệ thể tích của vữa xi măng là c_2 có hệ số khuếch tán D_2 thì $c_1 + c_2 = 1$ và $D_2/D_1 = 1000$ [13, 14]. Khi đó hệ số khuếch tán D^* của bê tông, phụ thuộc vào 2 thành phần D_1 và D_2 , $D^* = f(D_1; D_2)$.

Cần lưu ý rằng, bài toán về xác định hệ số khuếch tán D đã được nghiên cứu bằng phương pháp giải tích trong các mô hình của tác giả Hashin và Shtrikman (HS) [20], Mori-Tanaka (MT) [21]. Tuy nhiên, mô hình HS của nghiên cứu [20] không xét đến hình dạng của cốt liệu hạt trong khi mô hình MT [21] có xét đến độ dẹt của cốt liệu hạt nhưng coi tất cả các hạt cốt liệu có độ dẹt và kích thước như nhau. Trong mô phỏng mà nhóm nghiên cứu thực hiện bằng phương pháp mô hình lưới, cốt liệu được giả thiết có dạng hình tròn và có kích thước thay đổi cho phép mô tả xác thực hơn vật liệu bê tông so với hai mô hình trên.

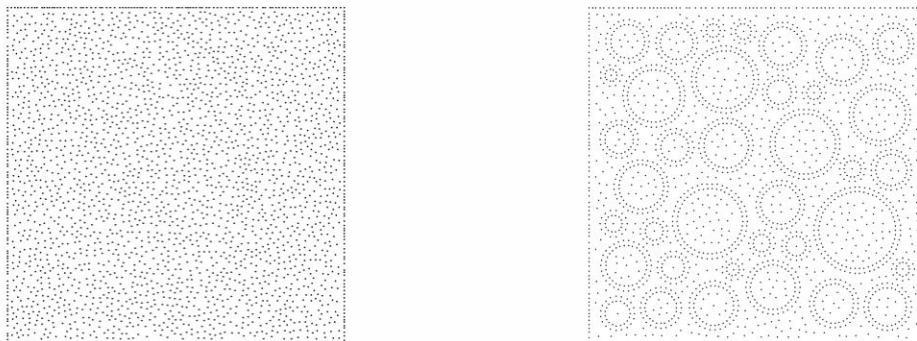


Trong mô phỏng này, mẫu được lựa chọn có kích thước $100 \times 100 \text{ mm}^2$, kích thước này cho phép tính đến ảnh hưởng của cốt liệu hạt. Giả thiết rằng kích thước của cốt liệu là thay đổi, nhỏ nhất 5 mm ($d_{\min \text{ cốt liệu}} = 5 \text{ mm}$) và lớn nhất là 25mm ($d_{\max \text{ cốt liệu}} = 25 \text{ mm}$), phần còn lại là vữa xi măng. Việc xây dựng lưới hình học (Hình 7) tuân thủ theo quy tắc về phân bố điểm ngẫu nhiên đã giới thiệu ở trên. Số lượng điểm được sinh ra trong miền nghiên cứu:

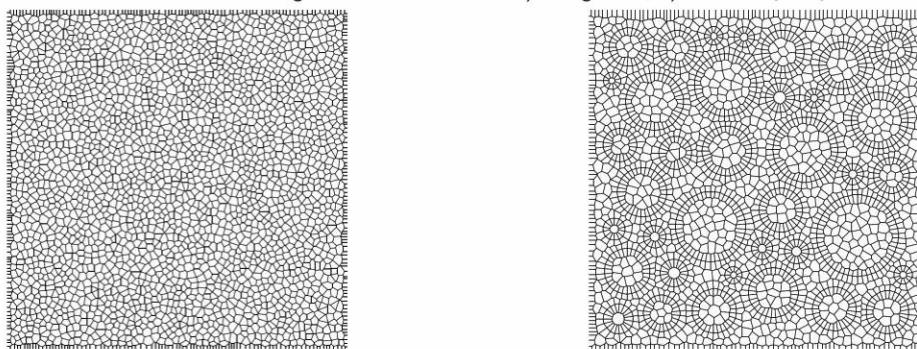
$$P_I = \frac{ab\rho_p}{d_{\min}^2} \quad (3)$$

trong đó: a, b là kích thước của miền nghiên cứu, ρ_p là mật độ điểm, d_{\min} là khoảng cách tối thiểu giữa các điểm. Trong trường hợp này, $a = b = 100 \text{ mm}$, $d_{\min} = 2 \text{ mm}$; $\rho_p = 0.5$. Hình 7a biểu diễn phân bố các điểm trong trường hợp vật liệu đồng nhất và Hình 7b có tính đến cốt liệu hạt.

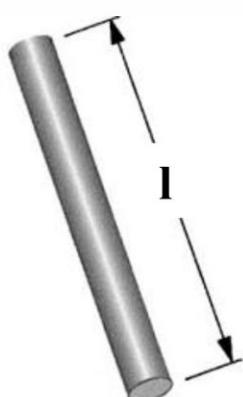
Sau khi xây dựng cấu trúc Voronoi (Hình 8), do bài toán là khuếch tán chất lỏng đơn giản (mô hình truyền chất - thủy học) chúng ta không cần xây dựng lưới Delaunay.



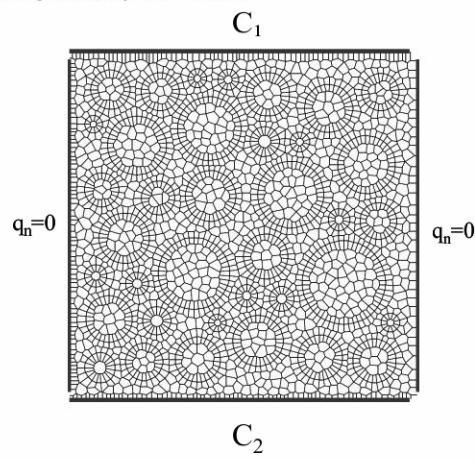
Hình 7. Phân bố ngẫu nhiên các điểm : a) đồng nhất, b) với cốt liệu hạt



Hình 8. Cấu trúc Voronoi a) đồng nhất; b) với cốt liệu



(a)



(b)

Hình 9.(a) Hình dạng giả định của phần tử truyền chất; **(b)** Điều kiện biên

Ứng xử thủy học của bê tông trong quá trình khuếch tán được nhóm nghiên cứu mô phỏng trong OOFEM bằng phương trình sai phân từng phần đơn hướng của quá trình truyền chất ở trạng thái không ổn định [11]. Trong trường hợp các phần tử được giả thiết là các ống dẫn 1 chiều, phương trình này được xác định như sau :

$$\alpha_e C + C_e \frac{\partial C}{\partial t} = f \quad (4)$$

trong đó α_e là ma trận độ dẫn của phần tử, C_e là ma trận dung lượng của phần tử, t là thời gian, f là nguồn bên ngoài.

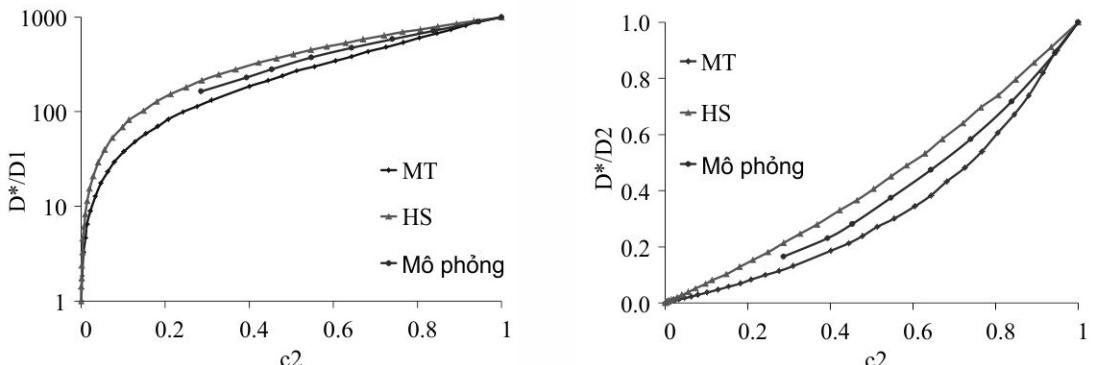
$$\alpha_e = \frac{h}{l} \alpha \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}; \quad C_e = \frac{hl}{12} c \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

trong đó h là chiều dài phần tử cơ học, l là chiều dài của phần tử dạng ống, α và c là độ dẫn và dung lượng của phần tử.

Việc xây dựng điều kiện biên và điều kiện ban đầu dựa trên giả thuyết mô hình được xem như bão hòa ở trạng thái ban đầu. Trong bài toán này, sử dụng hai điều kiện biên cho phương trình (4) như sau (Hình 9):

- Điều kiện biên Dirichlet: Cưỡng bức trực tiếp nồng độ C_1 ở biên trên, C_2 ở biên dưới ($C_1 > C_2$)
- Điều kiện biên Neumann: Cưỡng bức lưu lượng khuếch tán $q_n = 0$ ở hai biên trái và phải.

Kết quả mô phỏng từ OOFEM được so sánh với kết quả nghiên cứu của Hashin và Shtrikman (HS) [20], Mori-Tanaka (MT) [21]. Trong Hình 10 biểu diễn mối quan hệ giữa tỷ số D^*/D_1 và D^*/D_2 (D^* : hệ số khuếch tán tương đương, D_1 là hệ số khuếch tán của cốt liệu hạt, D_2 là hệ số khuếch tán của hồ xi măng) với tỷ lệ thể tích của hồ xi măng (c_2) theo kết quả giải tích của các mô hình HS, MT và mô phỏng. Chúng ta có thể dễ dàng nhận thấy đường cong biểu diễn kết quả mô phỏng có hình dáng tương đối trùng khớp với hai mô hình HS và MT, đồng thời giá trị đạt được bằng trung bình của 2 mô hình này. Đây là kết quả bước đầu cho thấy mô hình lưới có khả năng mô phỏng tốt vật liệu không đồng nhất.



Hình 10. So sánh hệ số khuếch tán giữa mô hình lưới với mô hình HS và MT.

3.2 Mô phỏng bài toán truyền nhiệt tuyến tính và không tuyến tính

Trong phần này, nhóm nghiên cứu sẽ thực hiện so sánh kết quả bài toán truyền nhiệt (ứng xử nhiệt) được nhóm phát triển trong OOFEM với kết quả giải tích tương ứng được đề xuất trong nghiên cứu của Bolander [22] cho bài toán truyền nhiệt tuyến tính.

Yêu cầu của bài toán này là tìm hàm $T=T(t)$ thỏa mãn phương trình truyền nhiệt :

$$\rho C_T \frac{\partial T}{\partial t} + \operatorname{div} q = Q \quad (6)$$

trong đó: T là nhiệt độ, C_T là nhiệt dung, Q là nguồn nhiệt và lưu lượng nhiệt được xác định theo định luật truyền nhiệt Fourier :

$$q = -\lambda_T \frac{\partial T}{\partial t} \quad (7)$$

Ở đây λ_T là độ dẫn nhiệt. Thay phương trình (7) vào (6) với trường hợp không có nguồn nhiệt ($Q=0$) ta thu được phương trình của biến T :

$$\rho C_T \frac{\partial T}{\partial t} - \lambda_T \nabla^2 T = 0 \quad (8)$$

Hoặc có thể viết thành:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (9)$$

trong đó: $D=\lambda_r/\rho C_r$, là hệ số truyền nhiệt. Trong bài toán truyền nhiệt tuyến tính, hệ số D không phụ thuộc vào nhiệt độ.

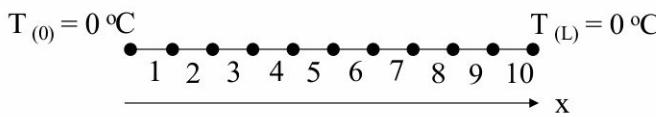
Theo bài toán giải tích trong nghiên cứu [22], hàm nhiệt độ T tại thời điểm ban đầu được lựa chọn có dạng:

$$T(x, y, z, t) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (10)$$

Trong bài toán truyền nhiệt tuyến tính, nghiệm giải tích của bài toán truyền nhiệt đơn hướng có dạng:

$$T(x, t) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{\frac{-\pi^2 t}{L^2}} \quad (11)$$

Phương trình truyền nhiệt [8] được nhóm nghiên cứu số hóa trong mô đun truyền nhiệt 2D phát triển trong OOFEM. Mô hình bài toán truyền nhiệt mà nhóm nghiên cứu sử dụng để so sánh với kết quả giải tích là mô hình 1D được thực hiện với số nút là 11, số phần tử là 10 (Hình 11). Các thông số vật lý đầu vào của mô hình được lựa chọn như sau: $D=1$; $C=1$ và $\lambda=1$.

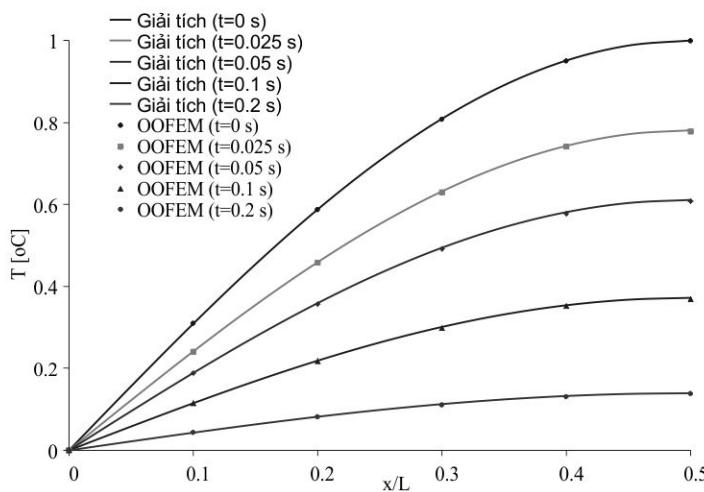


Hình 11. Chia lưới và điều kiện biên của bài toán truyền nhiệt tuyến tính

Điều kiện biên: $T(x = 0, t) = T(x = L, t) = 0$

Điều kiện ban đầu: $T(x = 0.1, t = 0) = \sin(0.1\pi)$; $T(x = 0.2, t = 0) = \sin(0.2\pi)$; $T(x = 0.3, t = 0) = \sin(0.3\pi)$; $T(x = 0.4, t = 0) = \sin(0.4\pi)$; $T(x = 0.5, t = 0) = \sin(0.5\pi)$; $T(x = 0.6, t = 0) = \sin(0.6\pi)$; $T(x = 0.7, t = 0) = \sin(0.7\pi)$; $T(x = 0.8, t = 0) = \sin(0.8\pi)$; $T(x = 0.9, t = 0) = \sin(0.9\pi)$;

Trong Hình 12 biểu diễn giá trị của nhiệt độ phân phối theo hướng x lựa chọn. Có thể dễ dàng nhận thấy sự trùng khớp rõ rệt giữa kết quả chạy trên OOFEM và kết quả giải tích trong nghiên cứu [22].

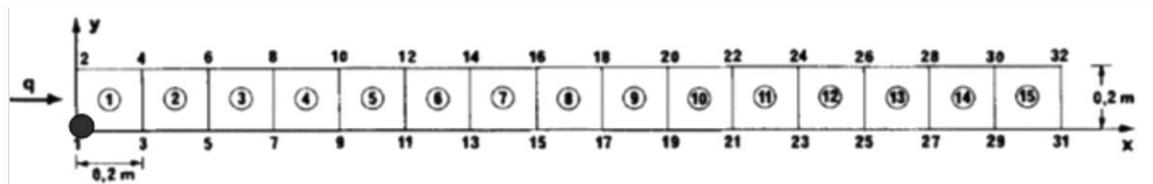


Hình 12. So sánh kết quả giải tích và kết quả chạy mô hình trong OOFEM

Với trường hợp truyền nhiệt không tuyến tính, hệ số truyền nhiệt được xác định như sau: $D = \frac{\lambda_T}{\rho C_T}$ trong đó $\lambda_T = \lambda_{T_0}[1+A_\lambda(T-T_0)]$ và $C_T = C_{T_0}[1+A_C(T-T_0)]$. Ở đây λ_{T_0} là độ dẫn nhiệt ở nhiệt độ ban đầu T_0 , C_{T_0} là nhiệt dung ở nhiệt độ ban đầu T_0 , A_λ và A_C là các hệ số của mô hình và được lấy giá trị bằng 1 trong nghiên cứu này.



Nhóm nghiên cứu đã thực hiện mô phỏng bài toán truyền nhiệt không tuyến tính trên OOFEM để so sánh với kết quả giải tích và kết quả mô phỏng trên phần mềm IVOHEAT trong nghiên cứu của tác giả Seppo Orivuori[23]. Trong trường hợp này, quá trình truyền nhiệt xảy ra dưới lưu lượng nhiệt cưỡng bức $q=1$ (W/m^2).



Hình 13. Chia lưới và điều kiện biên của bài toán truyền nhiệt không tuyến tính

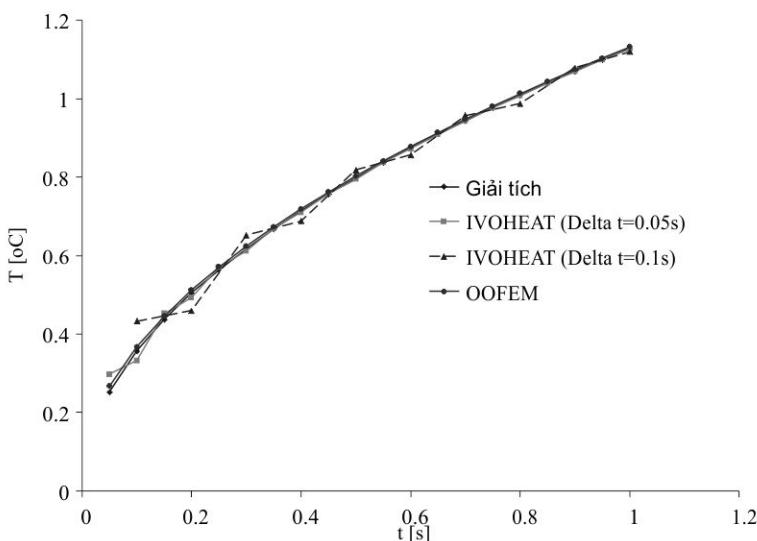
Trong Bảng 1 là thống kê kết quả sự phát triển của nhiệt độ tại nút 1 theo thời gian cho trường hợp: $C_{T_0} = 1(\text{J/m}^3/\text{^oC})$ và $\lambda_{T_0} = 1(\text{W/m}/\text{^oC})$ trong khi Bảng 2 là kết quả trường hợp $C_T = 1+0,5T(\text{J/m}^3/\text{^oC})$ và $\lambda_T = 1+0,5T(\text{W/m}/\text{^oC})$. Sự phát triển của nhiệt độ theo thời gian tại nút 1 biểu diễn trên Hình 14 và Hình 15 cho thấy kết quả chạy trên code OOFEM trùng khớp hơn với các tính toán giải tích đã chứng minh tính đúng đắn của mô hình thiết lập.

Bảng 1. Kết quả bài toán truyền nhiệt với trường hợp $C_{T_0} = 1(\text{J/m}^3/\text{^oC})$ và $\lambda_{T_0} = 1(\text{W/m}/\text{^oC})$.

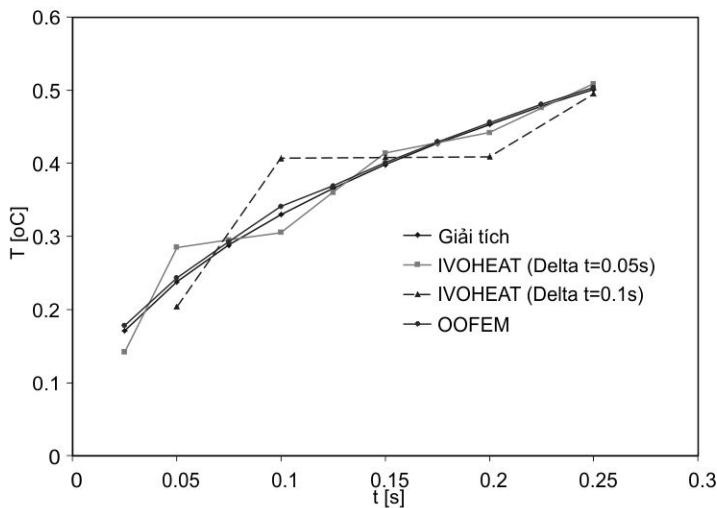
t(s)	analytical	IVOHEAT	Error (%)	IVOHEAT	Error (%)	OOFEM	Error (%)
		(delta t=0.05s)					
0.05	0.252	0.297	17.9			0.2665	5.8
0.1	0.357	0.332	-7.0	0.433	21.3	0.367	2.8
0.15	0.437	0.452	3.4			0.445	1.8
0.2	0.505	0.493	-2.4	0.46	-8.9	0.5119	1.4
0.25	0.564	0.57	1.1			0.5707	1.2
0.3	0.618	0.612	-1.0	0.652	5.5	0.624	1.0
0.35	0.668	0.67	0.3			0.673	0.7
0.4	0.714	0.71	-0.6	0.688	-3.6	0.7188	0.7
0.45	0.757	0.758	0.1			0.7618	0.6
0.5	0.798	0.795	-0.4	0.818	2.5	0.8025	0.6
0.55	0.837	0.837	0.0			0.84125	0.5
0.6	0.874	0.872	-0.2	0.857	-1.9	0.878	0.5
0.65	0.91	0.909	-0.1			0.9138	0.4
0.7	0.944	0.943	-0.1	0.957	1.4	0.948	0.4
0.75	0.977	0.977	0.0			0.981	0.4
0.8	1.009	1.008	-0.1	0.988	-2.1	1.013	0.4
0.85	1.04	1.04	0.0			1.0439	0.4
0.9	1.07	1.069	-0.1	1.079	0.8	1.0739	0.4
0.95	1.1	1.1	0.0			1.103	0.3
1	1.128	1.127	-0.1	1.12	-0.7	1.13168	0.3

Bảng 2. Kết quả bài toán truyền nhiệt với trường hợp $C_T = 1+0,5T(\text{J/m}^3/\text{^oC})$ và $\lambda_T = 1+0,5T(\text{W/m}/\text{^oC})$.

t(s)	analytical	IVOHEAT	Error (%)	IVOHEAT	Error (%)	OOFEM	Error (%)
		(delta t=0.05s)					
0.025	0.171	0.142	-17.0			0.1779	4.0
0.05	0.238	0.285	19.7	0.204	-14.3	0.24325876	2.2
0.075	0.288	0.295	2.4			0.29247	1.6
0.1	0.33	0.305	-7.6	0.407	23.3	0.34078	3.3
0.125	0.366	0.36	-1.6			0.3688	0.8
0.15	0.398	0.414	4.0	0.408	2.5	0.4005	0.6
0.175	0.427	0.428	0.2			0.4293	0.5
0.2	0.453	0.442	-2.4	0.409	-9.7	0.4558	0.6
0.225	0.478	0.476	-0.4			0.4805	0.5
0.25	0.501	0.509	1.6	0.495	-1.2	0.5036	0.5



Hình 14. Sự phát triển của nhiệt độ theo thời gian tại nút 1 khi $C_{\tau_0} = 1 \text{ (J/m}^3/\text{°C)}$ và $\lambda_{\tau_0} = 1 \text{ (W/m/°C)}$



Hình 15. Sự phát triển của nhiệt độ theo thời gian tại nút 1 khi $C_{\tau} = 1 + 0,5T \text{ (J/m}^3/\text{°C)}$ và $\lambda_{\tau} = 1 + 0,5T \text{ (W/m/°C)}$.

5. Kết luận

Trong bài báo, các tác giả đã phát triển phương pháp mô hình lưới để mô phỏng ứng xử thủy - nhiệt của vật liệu bê tông. Mô hình lưới được hợp thành bởi các phần tử rời rạc dễ dàng tích hợp tính không đồng nhất của vật liệu bê tông cũng như cho phép tích hợp các yếu tố hình học và sự phân bố ngẫu nhiên của cốt liệu dựa trên việc xây dựng hệ lưới phân bố ngẫu nhiên cũng như các quy tắc phân bố rời rạc Voronoi và Delaunay. Các mô đun về truyền dẫn chất lỏng (ứng xử thủy học) và truyền nhiệt không tuyến tính (ứng xử nhiệt) được nhóm nghiên cứu phát triển và số hóa trong mã nguồn mở OOFEM. Kết quả mô phỏng thu được trong bài toán về xác định hệ số khuếch tán của vật liệu bê tông đã được so sánh với kết quả giải tích trong mô hình (HS) và (MT) của các nhóm nghiên cứu khác cho thấy sự trùng khớp và bước đầu chứng minh phương pháp mô hình lưới có những ưu điểm vượt trội trong việc mô phỏng sát nhất với ứng xử thực tế của vật liệu bê tông. Nhóm nghiên cứu cũng đã tiến hành mô phỏng bài toán truyền nhiệt tuyến tính và không tuyến tính trên OOFEM để so sánh với kết quả thu được từ phương pháp giải tích và phương pháp phần tử hữu hạn trên phần mềm IVOHEAT của tác giả Bolander và Seppo Orivuori. Kết quả cho thấy mô hình lưới chạy trên OOFEM gần sát với kết quả giải tích hơn, chứng tỏ tính đúng đắn của mô hình này. Trong các nghiên cứu sau, nhóm tác giả sẽ trình bày kỹ hơn về việc mô phỏng ứng xử tổ hợp Cơ - Nhiệt, Thủy - Cơ và tiến tới đề xuất giải quyết bài toán tổng hợp Nhiệt - Thủy - Cơ bằng phương pháp mô hình lưới.

Lời cảm ơn: Các tác giả xin chân thành cảm ơn sự hỗ trợ tài chính của Bộ Giáo dục & Đào tạo thông qua đề tài nghiên cứu khoa học cấp Bộ mã số B2015.02-23.

**Tài liệu tham khảo**

1. Al Najim A. (2004), *Modelling and simulation of concrete behaviour subjected to high temperature by a thermo-hydro-mechanical approach. Application to accidental situations*, PhD thesis, Univ. Marne la Vallee.
2. Mounajed G., Obeid W. (2001), "Modélisation du comportement thermo - hygro mécanique des bétons à hautes températures", *Intermédiaire pour le livre BHP 2000*, CSBT, Division Modélisation Calcul et Développement.
3. Gawin D., Pesavento F., Schrefler B.A. (2003), "Modelling of hygro-thermal behaviour of concrete at high temperature with thermo-chemical and mechanical material degradation", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 192: 1731-1771.
4. Hager I. (2004), *Comportement à haute température des bétons à haute performance - évolution des principales propriétés mécaniques*, PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées & Ecole Polytechnique de Cracovie.
5. Noumowe A.N., Aggoun S., Cabrillac and R. (2001), *Influence du type de granulats sur les propriétés de bétons e matrice hautes performances soumise une température élevée*, Annales du bâtiment et des travaux publics.
6. Kozicki J., Tejchman J. (2006), "2D Lattice Model for Fracture in Brittle Materials", *Archives of Hydro-Engineering and Environmental Mechanics*, 53(2):137-154.
7. Liu J.X., Deng S.C., Zhang J., Liang N.G. (2007), "Lattice type of fracture model for concrete", *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 48: 269-284.
8. Sadouki H., Mier J.G.M. Van(1997), "Meso-level analysis of moisture flow in cement composites using a lattice-type approach", *Mater. Struct.* 30: 579-587.
9. Bolander J.E., Sukumar N.(2005), "Irregular lattice model for quasistatic crack propagation", *Phys. Rev. B*, 71:94-106.
10. Okabe A., Boots B., Sugihara K., Chiu S.N.(2000), *Spatial tessellations*, Wiley. ed. New York.
11. Grassl P. (2009), "A lattice approach to model flow in cracked concrete", *Cem. Concr. Compos.*, 31: 454-460.
12. Grassl P., Hong S.W., Buenfeld N.R. (2010). "Influence of aggregate size and volume fraction on shrinkage induced micro-cracking of concrete and mortar", *Cem. Concr. Res.*, 40:85-93.
13. Coussy O. (2004), *Poromechanics*, Wiley.
14. Schlangen E., J.G.M. Van M. (1992), "Simple lattice model for numerical simulation of fracture of concrete materials and structures", *Mater. Struct.*,25:534-542.
15. Ince R., Arslan A., Karihaloo B.L. (2003), "Lattice modelling of size effect in concrete strength", *Eng. Fract. Mech*, 70(16):2307-2320.
16. Voronoi G. (1908), "Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques, Deuxième mémoire, Recherches sur les parallélépédres primitifs", *J. Für Reine Angew. Math*, 134:198-287.
17. Jassim K.(2010), *Discretelmodelling of heat transfer*, MSc(R) thesis, University of Glasgow.
18. Le Thu Huong (2001), *Etude multi-échelle du comportement Thermo-Hydro-Mécanique des matériaux cimentaires, Approche morphologique pour la prise en compte de la mésostucture*, PhD Thesis, Universite Paris-Est.
19. Patzák B. (2012), "OOFEM - an Object-oriented Simulation Tool for Advanced Modeling of Materials and Structures", *Acta Polytech*, 52(6):59-66.
20. Hashin Z., Shtrikman S.(1962), "A variational approach to the theory of the elastic behaviour of polycrystals", *Journal Of The Mechanics And Physics Of Solids*, 10(4):343-352.
21. Mori T., Tanaka K.(1973), "Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions", *Acta Metall*, 21:571-574.
22. Bolander Jr., Berton S. (2004), "Simulation of shrinkage induced cracking in cement composite overlays", *Cem. Concr. Compos.*, 26:861-871.
23. Seppo O. (1979), "Simulation of shrinkage induced cracking in cement composite overlays", *Int. Jour. For.Nume. Methods. Engrg.*, 14:1461-1476.