

MODELO TERMO-QUÍMICO DE HIDRATACIÓN DEL HORMIGÓN

Tomás Prato, Miguel Cervera y Javier Oliver

E.T.S. d'Enginyers de Camins, Canals i Ports

Universitat Politècnica de Catalunya

Gran Capità s/n. Edifici C-1, Campus Nord. 08034 Barcelona, Espanya

RESUMEN

En este trabajo se presenta un modelo numérico, basado en la termodinámica de los medios porosos reactivos, que permite representar los fenómenos de fraguado y endurecimiento del hormigón durante todo el proceso de hidratación del cemento. La descripción de la evolución del campo de temperaturas se logra a través de un análisis termo-químico acoplado, en donde el calor generado por la hidratación del cemento es función del grado de hidratación y la temperatura actual. La evolución de las propiedades mecánicas es función del grado de hidratación obtenido. Para representar la ganancia de resistencia a compresión se propone un modelo de envejecimiento. La descripción de la evolución del módulo de elasticidad y el coeficiente de Poisson se consigue manteniendo constante, a lo largo de todo el período de hidratación, una relación entre ambas con la resistencia a compresión. El modelo descrito se ha implementado en un programa general de cálculo termo-mecánico (VULCAN-2000). A partir de un conjunto de datos obtenidos en ensayos experimentales adiabáticos se calibra el modelo numérico. Además, para verificar la validez del modelo al variar las condiciones de curado del hormigón se describen numéricamente ensayos de características no-adiabáticas. Finalmente se presentan algunos ejemplos de aplicación en estructuras reales.

ABSTRACT

A mathematical model, based on the theory of reactive porous media, capable to represent the setting and hardening phenomenon of concrete at early ages is presented in this study. A coupled transient thermo-chemical analysis provides the description of the evolution of temperatures, where the hydration heat is a function of the actual temperature and the degree of hydration. An aging model is proposed for determining the enhancement of compressive strength. Relations between the elastic modulus and Poisson's ratio with the compressive strength are assumed to remain constant during the hydration of cement, obtaining in this way the description of the evolution of such properties during the whole reaction process. The model is calibrated with adiabatic experimental data. The validity of the proposed model, when curing conditions are changed, is demonstrated through the description of the evolution of the mechanical properties in an isothermal experiment. Finally some applications on real structures are presented.

INTRODUCCIÓN

Los problemas de fisuración en estructuras con grandes volúmenes de hormigón (presas, losas de cimentación de edificios de contención de centrales nucleares, pilares y tableros de puentes, etc.) han estado siempre asociados a los efectos térmicos y de retracción. La fisuración del hormigón influye notablemente en la durabilidad y funcionalidad de la estructura, ya que aumenta la permeabilidad de la misma, lo que trae aparejado la aparición de presiones intersticiales, problemas de corrosión, inconvenientes asociados al ciclo de hielo-deshielo, filtraciones, etc.. En la actualidad se asume que la fisuración es un problema intrínseco en la construcción de grandes volúmenes de hormigón.

La hidratación del cemento es una reacción altamente exotérmica. El calor generado en las primeras horas por las reacciones químicas produce un aumento de la temperatura importante, llegándose en algunos casos de estructuras masivas hasta los 50-60 °C. La baja conductividad del hormigón junto

con las pequeñas superficies en contacto con el medio exterior provocan la aparición de importantes gradientes térmicos, y debido a la fuerte restricción de la masa de hormigón la aparición de gradientes tensionales que pueden provocar fisuración. El material fisura siempre y cuando las tensiones de tracción superen la resistencia a tracción del material.

En las primeras edades (horas posteriores al hormigonado hasta aproximadamente los 90 días) el hormigón fragua y endurece. La hidratación del cemento se considera como la principal causa del envejecimiento (*aging*), que a un nivel macroscópico se manifiesta por el cambio de las propiedades mecánicas en función del grado de hidratación.

Para poder realizar un análisis tensional de estructuras de hormigón en primeras edades es importante contar con un modelo matemático que permita representar la evolución de la reacción de hidratación, y por ende la descripción de la velocidad de liberación de calor y la evolución de las propiedades mecánicas. A continuación se describe la implementación de un modelo matemático, basado en la teoría de los medios porosos reactivos^[1], en un código de elementos finitos (VULCAN-2000). Además se proponen leyes que relacionan la variable encargada de describir el proceso de hidratación (grado de hidratación) con la resistencia a compresión del hormigón. Finalmente se describe la calibración del modelo y la aplicación a casos de estructuras reales.

BASES DE LA FORMULACIÓN

El cambio de las características microestructurales del hormigón durante las primeras edades es función del fenómeno de difusión de agua a través de las capas de hidratos que se forman debido a la reacción química que se produce cuando entran en contacto el agua con el cemento. Esta reacción es altamente exotérmica. Los geles, producto de la reacción de hidratación, poseen características mecánicas marcadamente diferentes a los elementos que los componen antes de reaccionar. A nivel macroscópico se observa que el hormigón en estado fresco es un material altamente viscoso que fluye y que prácticamente no tiene resistencia al corte. La formación de geles se manifiesta en un endurecimiento con ganancia de rigidez. Este fenómeno se lo denomina envejecimiento (*aging*). La teoría de los medios porosos reactivos brinda un marco teórico, basado en la termodinámica de los procesos irreversibles, que permite el seguimiento de la reacción de hidratación a través de variables macroscópicas.^[2] Además, la medición de estas variables en ensayos de laboratorio es de relativa sencillez. A tal respecto, se utiliza el grado de hidratación (r) como la variable que controla el fenómeno de hidratación, y por ende permite modelar el endurecimiento del material.

Marco termodinámico para un medio poroso químicamente reactivo

En este apartado se describen las relaciones básicas de la teoría de medios porosos reactivos parcialmente saturados que se utiliza para representar, a nivel macroscópico, la reacción química de hidratación del cemento.^[1] Se supone que el sólido a estudiar es un medio poroso compuesto por una matriz sólida y un espacio interconectado de poros. Además, se supone que los poros se encuentran saturados por dos fases fluidas, la fase reactiva y la fase producto. Estas fases fluidas pueden reaccionar químicamente entre sí, de tal manera que $A \rightarrow B$ donde A es la fase fluida reactiva y B es la fase fluida producto que saturan el medio poroso. De esta manera, el medio poroso reactivo puede verse como la superposición de diferentes medios continuos. En el caso particular de estudio se superponen el esqueleto sólido y las dos fases fluidas.

Continuidad y conservación de la masa

La hipótesis de conservación de la masa se expresa localmente a través de la ecuación de continuidad, que exige que para cada fase fluida se cumpla que

$$\frac{dm_A}{dt} = M_A^0 - m_{A \rightarrow B}^0 \quad \frac{dm_B}{dt} = M_B^0 + m_{A \rightarrow B}^0 \quad (1)$$

donde M_A^0 , M_B^0 representan a la tasa de incremento externo de masa del fluido A y B, $m_{A \rightarrow B}^0$ a la tasa de generación o formación de masa B debido a la reacción química y m_A y m_B representan a la masa reactiva (A) y masa producto (B) de la reacción, respectivamente. Se define la tasa de la reacción química ξ^0 (*reaction rate*) como

$$\xi^0 = \frac{m_{A \rightarrow B}^0}{\chi} \quad (2)$$

donde χ es una constante que relaciona la tasa de formación de masa con la tasa de la reacción química.

Sistema químico cerrado

Consideremos a continuación un sistema químico cerrado, es decir áquel en donde no existe aporte exterior de masa (M_A^0 y $M_B^0 = 0$), y, por tanto, según la ec. (1)

$$M_A^0 = M_B^0 = 0 \Rightarrow \frac{dm_A}{dt} = -m_{A \rightarrow B}^0 \quad \frac{dm_B}{dt} = m_{A \rightarrow B}^0 \quad (3)$$

Obsérvese que, en estas condiciones, la tasa de formación de masa ($m_{A \rightarrow B}^0$) es una derivada temporal; así como también lo es la tasa de reacción ($\xi^0 = d\xi / dt = \dot{\xi}$). De esta manera, se puede escribir (ver ec.(2))

$$m_{A \rightarrow B}^0 = -\dot{m}_A = \dot{m}_B = \chi \dot{\xi} \quad (4)$$

La variable ξ , denominada amplitud de hidratación (*hydraton extent*), puede considerarse como una variable interna, ya que su evolución es espontánea y no depende del flujo externo (sistema cerrado), que da una medida del progreso de la reacción considerada.

Ecuaciones de estado. Disipación.

Todo modelo matemático que pretenda representar la evolución de un proceso termodinámicamente admisible debe respetar el 2^{do} principio de la termodinámica, que, para un sistema termo-mecánico, viene representado por la siguiente desigualdad

$$\mathcal{D} = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}} - S\dot{T} - \dot{\Psi} \geq 0 \quad (5)$$

donde \mathcal{D} es la disipación total, $\underline{\underline{\sigma}}$ es el tensor de tensiones, $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}$ el tensor velocidad de deformaciones, S la entropía, \dot{T} la velocidad de evolución de las temperaturas y $\dot{\Psi}$ es la velocidad de evolución de la energía libre de Helmholtz. Ésta define el estado termodinámico en función de las variables de estado. A partir de la ec. (4), para un sistema químico cerrado, la energía libre se puede expresar en función de un conjunto de variables de estado, formado por las variables libres ($\underline{\underline{\epsilon}}, T$) y las variables internas ($\xi, \underline{\underline{Y}}$). Esto es

$$\Psi = \Psi(T, \underline{\underline{\epsilon}}, m_A = -\xi, m_B = \xi, \underline{\underline{Y}}) = \Psi(T, \underline{\underline{\epsilon}}, \xi, \underline{\underline{Y}}) \quad (6)$$

donde $\underline{\underline{Y}}$ es un conjunto de variables internas relacionadas con el comportamiento irreversible del material. La expresión de la derivada total de la energía libre de Helmholtz tiene entonces la forma

$$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{\partial\Psi}{\partial T} \frac{dT}{dt} + \frac{\partial\Psi}{\partial \underline{\underline{\epsilon}}} \frac{d\underline{\underline{\epsilon}}}{dt} + \frac{\partial\Psi}{\partial \xi} \frac{d\xi}{dt} + \frac{\partial\Psi}{\partial \underline{\underline{Y}}} \frac{d\underline{\underline{Y}}}{dt} \quad (7)$$

Si se reemplaza la ec.(7) en la ec.(5) la disipación se puede expresar como

$$\mathcal{D} = \left(\underline{\underline{\sigma}} - \frac{\partial\Psi}{\partial \underline{\underline{\epsilon}}} \right) : \frac{d\underline{\underline{\epsilon}}}{dt} - \left(S + \frac{\partial\Psi}{\partial T} \right) \frac{dT}{dt} - \frac{\partial\Psi}{\partial \xi} \dot{\xi} - \frac{\partial\Psi}{\partial \underline{\underline{Y}}} \dot{\underline{\underline{Y}}} \geq 0 \quad (8)$$

Por otra parte, la disipación química toma la forma^[2]

$$\mathcal{D}_{ch} = A_m \dot{\xi} \geq 0 \quad (9)$$

donde A_m es la fuerza termodinámica asociada a la amplitud de hidratación (ξ); esto es

$$A_m = -\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \quad (10)$$

Reemplazando la ec. (10) en la ec.(9) e introduciendo ésta en la ec.(8) se tiene

$$\mathcal{D} = \left(\underline{\sigma} - \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}} \right) : \frac{d\underline{\epsilon}}{dt} - \left(S + \frac{\partial \Psi}{\partial T} \right) : \frac{dT}{dt} - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} + A_m \right) \dot{\xi} - \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{Y}} \dot{\underline{Y}} + \mathcal{D}_{ch} \geq 0 \quad (11)$$

La disipación total del proceso se puede entonces interpretar como la contribución de una componente asociada al comportamiento irreversible del esqueleto sólido (\mathcal{D}_{nt}) y otra asociada a la reacción química (\mathcal{D}_{ch}), esto es

$$\mathcal{D} = \mathcal{D}_{ch} + \mathcal{D}_{nt} \geq 0 \quad (12)$$

En un material elástico ($\underline{Y} = 0$ y $\mathcal{D}_{nt} = 0$) la disipación del sistema está únicamente asociada al proceso de reacción química ($\mathcal{D} = \mathcal{D}_{ch} \geq 0$).

Por el Método de Coleman se puede demostrar que, a partir de la definición dada para la afinidad química (ec.(10)), para que se cumpla la desigualdad (11) deben cumplirse las siguientes ecuaciones de estado

$$\underline{\sigma} = \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\epsilon}} \quad ; \quad S = -\frac{\partial \Psi}{\partial T} \quad (13)$$

$$\mathcal{D}_{ch} \geq 0 \quad (14)$$

De acuerdo a las ec.(10), (13) y (14) se deduce que la entropía (S), el tensor de tensiones ($\underline{\sigma}$) y la afinidad química (A_m) son las fuerzas termodinámicas asociadas a la tasa de las variables de estado T , $\underline{\epsilon}$ y ξ , respectivamente.

Aplicación a la hidratación del cemento

En la reacción química de la hidratación del cemento la fase A corresponde al agua libre y la B al agua combinada con hidratos.

Agua libre \rightarrow Agua combinada

Ahora $m_{A \rightarrow B}^0$ representa la tasa de cambio de masa del agua combinada en la fase sólida. La tasa de la reacción ($\dot{\xi}$) (o velocidad con la que el agua pasa de libre a combinada en la fase sólida) puede ser considerada como la tasa de hidratación por difusión de agua. $\dot{\xi}$ se define entonces como la velocidad de hidratación (*hydration rate*). Ésta viene controlada por el desequilibrio termodinámico (afinidad A_m) entre el agua libre y el agua combinada, y además amplificada por la activación debido a la temperatura generada en la propia hidratación del cemento.

Ley de evolución de la amplitud de hidratación

La amplitud de hidratación (ξ) es una variable interna del modelo, por lo que es necesario definir su ley de evolución. La cinética de la reacción se define a través de una expresión que relaciona la afinidad química con la velocidad de hidratación ($\dot{\xi}$). Puede adoptarse una relación lineal de la forma

$$\dot{\xi} = \frac{1}{\eta} \langle A_m \rangle \quad (15)$$

donde η es un parámetro del material, que en general puede variar a lo largo del proceso de hidratación, esto es $\eta = \eta(\xi)$, y $\langle \cdot \rangle$ son los paréntesis de Macaulay, tales que $\langle x \rangle = (x + |x|) / 2$.

La ec. (15) expresa que la reacción de hidratación evoluciona sí y sólo sí la fuerza termodinámica relacionada con el desequilibrio químico entre el producto y el reactivo es positiva.

Por otra parte, la reacción se ve amplificada por la activación debido a la temperatura generada en la propia hidratación del cemento, lo cual puede describirse a través de una expresión del tipo de Arrhenius, quedando la ec.(15) de la forma

$$\dot{\xi} = \frac{1}{\eta} < A_m > e^{-E_a/RT} \quad (16)$$

donde E_a es la energía de hidratación y R la constante universal de los gases.

Energía libre y ecuaciones de estado.

Para un material isotrópico elástico que envejece se puede adoptar la siguiente expresión para la energía libre de Helmholtz ^[3]

$$\Psi = \frac{9}{2} K(\xi) \varepsilon^2 + G(\xi) \underline{\underline{e}} : \underline{\underline{e}} - 9K(\xi) \varepsilon (\alpha(T - T_0) + \beta\xi) + \frac{q(\xi)}{T_0} (T - T_0) - \frac{1}{2} \frac{C}{T_0} (T - T_0)^2 + \tilde{\Psi}(\xi) \quad (17)$$

donde α es el coeficiente de dilatación térmica, β es el coeficiente de dilatación química/capilar, ε es la deformación volumétrica, $\varepsilon = tr(\underline{\underline{e}})$, $\underline{\underline{e}}$ es el tensor de deformaciones de corte, $\underline{\underline{e}} = \underline{\underline{e}}_1 + \underline{\underline{e}}$, T_0 es la temperatura de referencia, $q(\xi)$ es el calor latente de hidratación, $C = \rho c$ la capacidad calórica por unidad de volumen en un ensayo mantenido a amplitud de hidratación constante, con ρ y c como la densidad y el calor específico respectivamente; $K(\xi)$ es el módulo de deformación volumétrico; $G(\xi)$ es el módulo de deformación transversal y $\tilde{\Psi}(\xi)$ es el término de la energía libre de Helmholtz asociado con la reacción de hidratación. Las ecuaciones de estado resultan ahora

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{\underline{e}}} \Rightarrow \underline{\underline{\sigma}} = 2G(\xi) \underline{\underline{e}} + 3K(\xi) (\varepsilon - \alpha(T - T_0) - \beta\xi) \underline{\underline{1}} \quad (18)$$

$$S = -\frac{\partial \Psi}{\partial T} \Rightarrow T_0 S = C_\varepsilon (T - T_0) + 9K(\xi) \alpha T_0 \varepsilon - q(\xi) \quad (19)$$

$$A_m = -\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \quad (20)$$

Grado de hidratación

En el modelo presentado por Ulm-Coussy ^[2], implementado y descrito en el presente trabajo, el grado de hidratación $r(t)$ se define como la relación entre la amplitud de hidratación a tiempo t , $(\xi(t))$, y la amplitud final de hidratación en condiciones ideales $(\bar{\xi}_\infty)$ ^{[2][4]}

$$r(t) = \frac{\xi(t)}{\bar{\xi}_\infty} \quad (21)$$

donde $\bar{\xi}_\infty$ es la cantidad de agua transformada durante toda la reacción en condiciones ideales.

Modelo termo-químico propuesto

Para el término de la energía libre de Helmholtz asociado con la reacción de hidratación de la ec. (17) se propone una expresión de la forma

$$\Psi(\xi) = \frac{1}{3} k \xi^3 + \frac{1}{2} \left(\frac{A_{m0}}{\bar{\xi}_\infty} - k \bar{\xi}_\infty \right) \xi^2 - A_{m0} \xi \quad (22)$$

donde A_{m0} es la afinidad química inicial, k es la constante del material relacionada con la velocidad de hidratación y $\bar{\xi}_\infty$ es la amplitud de hidratación a tiempo infinito. Si se toma un valor $k = 0$ se recupera el modelo propuesto por Ulm-Coussy ^{[2][4]}, en el que el término de la energía libre de Helmholtz relacionado con la reacción química toma la forma

$$\Psi(\xi) = \frac{1}{2} \frac{A_{m0}}{\bar{\xi}_\infty} \xi^2 - A_{m0} \xi \quad (23)$$

De esta manera, la ec (20) que representa la ley de evolución de la amplitud de hidratación toma la forma

$$A_m = -\frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \Rightarrow A_m = A_{m0} - \left(\frac{A_{m0}}{\xi_\infty} - k\xi_\infty\right)\xi - k\xi^2 - q_{,\xi} \frac{(T-T_0)}{T_0} + 9K(\xi)\beta\epsilon \quad \text{con } q_{,\xi} = \frac{dq}{d\xi} \quad (24)$$

La ec.(24) indica que el desequilibrio termodinámico entre el agua libre y el agua combinada depende (además de la amplitud de hidratación) de las variaciones de temperatura y deformación. Si se desprecia el término de acoplamiento mecánico ($9K(\xi)\beta\epsilon$) entonces la ec. (24) resulta

$$A_m = A_{m0} - \left(\frac{A_{m0}}{\xi_\infty} - k\xi_\infty\right)\xi - k\xi^2 - q_{,\xi} \frac{(T-T_0)}{T_0} \quad (25)$$

Reemplazando la ec.(25) en la expresión de la ley de evolución de la reacción de hidratación (ec.(16)) se tiene

$$\dot{\xi} = \frac{k}{\eta} < \left[\left(\frac{A_{m0}}{k\xi_\infty} + \xi\right)(\xi_\infty - \xi) - \frac{q_{,\xi}}{k} \frac{(T-T_0)}{T_0} \right] > e^{-E_a/RT} \quad (26)$$

A partir de la definición del concepto de grado de hidratación se puede reescribir el modelo propuesto. Así, dividiendo la ec.(26) por ξ_∞ se tiene

$$\dot{\bar{\xi}} = \frac{\dot{\xi}}{\xi_\infty} = \bar{k} < \left[(\bar{A} + r)(r_\infty - r) - \bar{\alpha} \frac{(T-T_0)}{T_0} \right] > e^{-E_a/RT} \quad \text{con } \bar{k} = \frac{k\xi_\infty}{\eta}, \bar{A} = \frac{A_{m0}}{k\xi_\infty\xi_\infty} \text{ y } \bar{\alpha} = \frac{q_{,\xi}}{k\xi_\infty^2} \quad (27)$$

En función de los diferentes casos estudiados^[5] se concluye que el parámetro del material η debe ser función del grado de hidratación. Se adopta una ley de evolución de la forma

$$\eta = \eta_0 e^{-\bar{\eta}^2/\xi_\infty} = \eta_0 e^{-\bar{\eta}^2/r_\infty} \quad (28)$$

Ecuación de equilibrio térmico. Implementación numérica

La ecuación que gobierna el fenómeno de conducción de calor en régimen transitorio y en un medio continuo y homogéneo tiene la forma

$$\rho c \dot{T} = \hat{r} + \nabla \cdot (\underline{\underline{K}} \nabla T) + \dot{q} \quad (29)$$

Los conceptos introducidos de amplitud y grado de hidratación permiten escribir el término relacionado con el calor de hidratación de la ec.(29) de la forma

$$\dot{q} = q_{,\xi} \dot{\xi} = q_{,r} \dot{r} \quad (30)$$

y la ec.(29) como

$$\rho c \dot{T} = \hat{r} + \nabla \cdot (\underline{\underline{K}} \nabla T) + q_{,r} \dot{r} \quad (31)$$

El modelo descrito se ha implementado en un programa general de cálculo termo-mecánico (VULCAN-2000). La discretización espacial se realiza mediante el Método de Elementos Finitos. La solución del problema transitorio presentado, además de la discretización espacial, requiere una discretización de la variable tiempo. Se utiliza un esquema Euler implícito (*backward Euler*). Para resolver el problema no lineal se utiliza el método de Newton-Raphson^[5]. La solución del acoplamiento termo-químico consiste en resolver la ecuación de equilibrio térmico y simultáneamente la ecuación diferencial que representa la evolución de la reacción de hidratación (ec.(16)). Esta ecuación diferencial escalar se resuelve de manera análoga a la ecuación térmica.^[5]

Envejecimiento

El cambio de las concentraciones y las propiedades físicas de los constituyentes básicos del cemento (silicatos bi y tri-cálcicos) debido a la reacción química de hidratación es lo que se denomina como envejecimiento (*aging*) del hormigón. A un nivel macroscópico el envejecimiento se manifiesta por el cambio de las propiedades mecánicas en función del grado de avance de la reacción. A continuación se describe el modelo de envejecimiento propuesto.

Evolución de la resistencia a compresión

El parámetro más utilizado en la práctica para la caracterización mecánica del hormigón es la resistencia a compresión (f_c). El módulo de elasticidad, el coeficiente de Poisson y la resistencia a tracción se estiman a partir de este valor. Esta práctica se refleja en la mayoría de las normativas existentes para construcciones de obras de hormigón ([EH-91][CEB][ACI]).

El fenómeno de envejecimiento del hormigón puede separarse en dos fases. La primera de ellas se produce en los momentos iniciales (hasta 4-8 hs. después del hormigonado dependiendo de las características de la mezcla y las condiciones de curado) y se caracteriza por un comportamiento semi-fluido del material. La segunda fase es la de endurecimiento del material. Este período abarca desde el final del proceso de fraguado hasta los 30-90 días, dependiendo de numerosos factores de proyecto, ejecución y estructurales. El valor del grado de hidratación que posee la mezcla en el momento que pasa de comportarse como un semi-fluido a un sólido se define como grado de hidratación crítico (r_{cr}).

En el presente trabajo se supone una ley de evolución de la resistencia a compresión en función del grado de hidratación válida para las dos etapas descritas. Se supone una variación parabólica de la forma

$$f_c = A_{fc} r^2 + B_{fc} r$$

donde

$$A_{fc} = (f_{cr} / r_{cr} - f_{c\infty} / r_{\infty}) / (r_{cr} - r_{\infty}) \quad (32)$$

$$B_{fc} = f_{c\infty} / r_{\infty} - [r_{\infty} A_{fc}]$$

donde f_{cr} es la resistencia a compresión crítica, $f_{c\infty}$ la resistencia a compresión a tiempo infinito y r_{∞} es el grado de hidratación a tiempo infinito.

Según se ha expresado anteriormente el hormigón deja de comportarse como un material semi-fluido cuando el grado de hidratación alcanza un valor $r = r_{cr}$. La resistencia a compresión que corresponde al instante en que $r = r_{cr}$ se denomina resistencia a compresión crítica (f_{cr}). A partir de los estudios experimentales presentados por Byfors^[6], Khan et al^[7] y Neville^[8] se puede estimar un rango de variación para la resistencia a compresión crítica igual a $f_{c\infty} / 35 \leq f_{cr} \leq f_{c\infty} / 10$.

El módulo de elasticidad es un parámetro de fundamental importancia para la determinación del estado tensional de una estructura. Existen numerosas fórmulas empíricas que relacionan el módulo de elasticidad con la resistencia a compresión.^{[9][10]} Oloukon et al^[11] realizaron un análisis intensivo de algunas de las formulaciones propuestas para la relación E vs f_c y concluyeron que el módulo de elasticidad es proporcional a la raíz cuadrada de la resistencia a compresión. En el presente trabajo se adopta una relación de la forma

$$E = A_E \sqrt{f_c} \quad (33)$$

donde A_E es una constante que depende del tipo y tamaño máximo del agregado de la mezcla. En este trabajo se supone que una relación del tipo de la ec.(33) es válida durante todo el proceso de hidratación del hormigón.

De acuerdo a los resultados experimentales puede observarse que el valor del coeficiente de Poisson para valores de la resistencia a compresión inferiores a f_{cr} se acerca a $\nu=0.5$. Este hecho apoya la idea de que el hormigón puede considerarse en las primeras horas como un fluido cuasi-incompresible. En el presente estudio se diferencian las fases de fraguado y endurecimiento, y para ello se adopta una ley de evolución de la forma

$$\nu = \begin{cases} 0.5 - (0.5 - \nu_{cr}) \frac{f_c}{f_{cr}} & f \leq f_{cr} \Leftrightarrow r \leq r_{cr} \\ A_\nu + B_\nu \ln(f_c) & f \leq f_{cr} \Leftrightarrow r \leq r_{cr} \end{cases} \quad (34)$$

donde A_ν y B_ν son constantes que se deducen de ensayos experimentales como el realizado por Byfors.^[6]

Evolución del módulo de deformación volumétrica y del módulo de deformación transversal

En la mecánica de sólidos es práctica común representar el estado tensional de un punto material como la suma de dos componentes, una parte relacionada con las tensiones provocadas por deformaciones volumétricas y otra relacionada con las deformaciones desviadoras o de corte. La ecuación constitutiva relaciona las deformaciones con las tensiones a través del módulo de deformación volumétrica (K) y del módulo de deformación transversal (G), los cuales se expresan en función del módulo de elasticidad y del coeficiente de Poisson según

$$K(r) = \frac{E(r)}{3(1-2\nu(r))} \quad , \quad G(r) = \frac{E(r)}{2(1+\nu(r))} \quad (35)$$

EJEMPLOS DE APLICACIÓN

En este apartado se presentan diferentes ejemplos numéricos en los que se han utilizado los modelos termo-químico y de envejecimiento descritos para representar el campo de temperaturas y la evolución de las propiedades mecánicas durante el proceso de hidratación del cemento.

Ensayos adiabáticos

El objetivo de estos ejemplos numéricos consiste en calibrar los modelos termo-químico y de envejecimiento descritos, determinando para ello el valor de los parámetros que intervienen en los mismos. El ensayo fue realizado por personal de la McGill University de Montreal, Canadá. [KCM] Probetas cilíndricas de 100x200 mm. fueron hormigonadas en moldes plásticos diseñados especialmente para facilitar su retirada sin perturbar el material. Se desarrolló una técnica para simular las condiciones térmicas y de curado en que se encontraría el hormigón en el centro de una estructura de grandes dimensiones durante el proceso de hidratación. Las condiciones adiabáticas del ensayo se consiguieron midiendo la evolución de las temperaturas en el centro de la probeta a través de un termopar, y calentando el agua que rodea la probeta hasta alcanzar la temperatura del hormigón (TMC. *Temperature Match Cured*) (ver Fig. 1). Se realiza el estudio de tres mezclas diferentes, cuyas resistencias características son de 300 (H30), 700 (H70) y 1000 (H100) Kp/cm².

Debido a la simetría del problema en estudio se analiza solamente la mitad de la sección longitudinal de la probeta de hormigón. La discretización espacial se ha llevado a cabo mediante elementos axilimétricos de 4 nodos. En Fig. 2 se presenta la malla de elementos finitos utilizada para el análisis numérico.

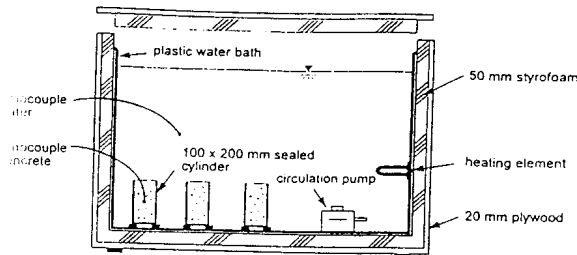


Fig. 1 Sistema para desarrollar un ensayo adiabático. [7]

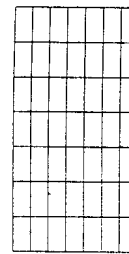


Fig. 2. Malla de elementos finitos axilimétricos.

En la Tabla I se presentan los valores de las propiedades y datos utilizados para el análisis numérico.

Resultados obtenidos

En Fig. 3 se presenta una comparación entre la evolución de las temperaturas obtenidas experimentalmente con la evolución obtenida mediante el modelo numérico descrito.

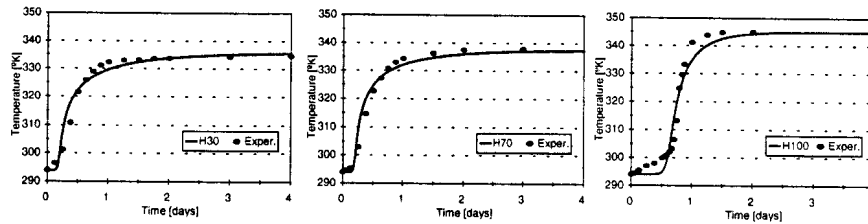


Fig. 3 Evolución de temperaturas en ensayo adiabático. Resultados numéricos y experimentales. □

En los resultados experimentales se observa un retardo en la evolución de las temperaturas. Esto es, probablemente, debido a la existencia de superplastificantes en la mezcla. □ Del análisis de la Fig. 3 se deriva que la diferencia entre los valores experimentales y numéricos es mínima, lo cual indica que el modelo térmico implementado representa en forma suficientemente aproximada el desarrollo de temperaturas debido al calor generado durante el fraguado.

En Fig. 4 se presentan las leyes de evolución de la resistencia a compresión, a lo largo del ensayo, obtenidas experimentalmente y a través del modelo de envejecimiento propuesto.

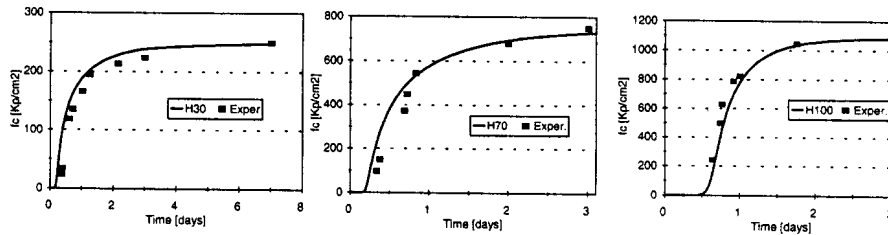


Fig. 4. Evolución de la resistencia a compresión en ensayo adiabático. Resultados numéricos y experimentales. □

En Fig. 4 puede observarse que el modelo de envejecimiento propuesto representa correctamente la ley de evolución de la resistencia a compresión durante el proceso de hidratación. En Fig. 5 se presenta una comparación entre la ley de evolución del módulo de elasticidad obtenida a través de ensayos experimentales y del modelo numérico propuesto. De observar dicha figura se concluye que la evolución del módulo de rigidez está correctamente representada por el modelo de envejecimiento propuesto. El módulo de elasticidad llega a su valor máximo aproximadamente a las 48 hs. después del hormigonado, para luego mantenerse prácticamente constante a lo largo del período analizado.

Ensayos no-adiabáticos

En este apartado se presentan dos series de ensayos de características no-adiabáticas. El objetivo del primero de los ejemplos es el de validar el modelo descrito a través de la representación de la evolución de la resistencia a compresión del hormigón, utilizando para ello los parámetros calibrados en el ensayo adiabático. En la segunda serie de ensayos se estudia la influencia de la temperatura inicial de la mezcla en el proceso de hidratación del cemento.

Serie I

El ensayo fue realizado en probetas elaboradas con los mismos materiales descritos en el apartado anterior. Las probetas fueron aisladas a través de una cobertura de plástico (*sealed cured*), dejándose curar durante aproximadamente 90 días. Las propiedades físicas y químicas de los mismos son idénticas a las descritas en la Tabla I, salvo las resistencias finales, cuyos valores son de 342, 882 y 1015 Kp/cm² para los hormigones H-30, H-70 y H-100 respectivamente. La malla de elementos finitos utilizada es similar a la descrita en la Fig. 2. Para modelar el intercambio de calor con el medio ambiente se han utilizado elementos de contorno isoparamétricos lineales. En la Tabla I se presentan los datos utilizados para la descripción numérica del ensayo.

Las condiciones de curado impuestas a las probetas hacen que los aumentos de temperatura debido al calor generado por la hidratación del cemento no sean considerables. Esto implica que el ensayo se desarrolla prácticamente en condiciones isotérmicas.

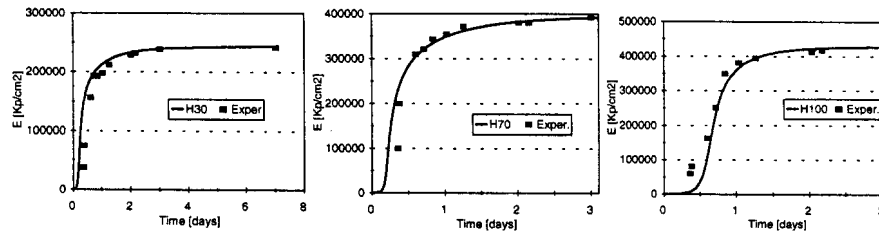


Fig.5 Evolución del módulo de elasticidad en ensayo adiabático. Resultados numéricos y experimentales. [7]

En Fig. 6 puede observarse que la representación de la evolución de la resistencia a compresión lograda a través de los modelos termo-químico y de envejecimiento propuestos es correcta. Es importante destacar que los parámetros que gobiernan la ley de evolución de la reacción de hidratación han sido calibrados para representar ensayos de naturaleza adiabática. Sin embargo, puede constatar a la luz de los resultados presentados que el modelo es capaz de representar correctamente el proceso de fraguado y de endurecimiento en condiciones de curado diferentes. También vale la pena mencionar que la representación del fenómeno es correcta en todo el período de tiempo estudiado, que abarca desde las primeras horas posteriores al hormigonado hasta los 90 días aproximadamente. Por otra parte, los hormigones analizados abarcan un rango importante de variación en cuanto a resistencia característica se refiere, ya que se estudian hormigones de una resistencia cercana a los 300 Kp/cm² hasta un hormigón de altas prestaciones (1000 Kp/cm²).

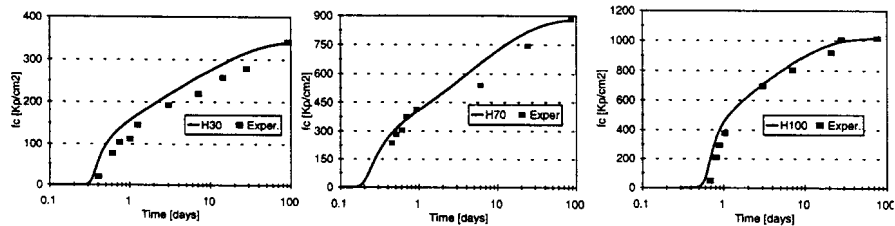


Fig. 6 Evolución de la resistencia a compresión en ensayo no-adiabático. Resultados numéricos y experimentales. [7]

Serie II

Para estudiar la influencia de la temperatura inicial del hormigón en el proceso de hidratación Kuwahara y Koh midieron^[KK] la evolución de temperaturas y de resistencia a compresión de un material hormigonado a una temperatura de 24 °C y otra de 13 °C.

En Fig. 7 se presenta una comparación entre los resultados experimentales y numéricos obtenidos para el hormigón con una temperatura inicial de 24 °C. En la misma se puede observar la correcta representación del campo de temperaturas (en la parte central de la masa de hormigón) y de la resistencia a compresión a lo largo de todo el proceso de hidratación.

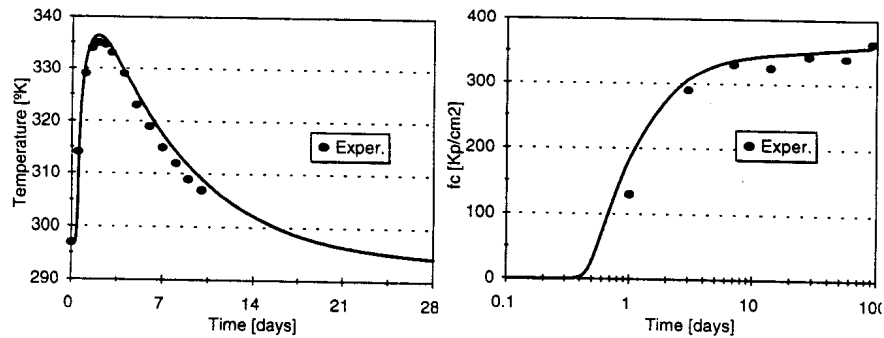


Fig. 7. Evolución de temperaturas y resistencia a compresión. Resultados numéricos y experimentales.^[12]

En Fig. 8 se presenta una comparación entre los resultados experimentales y numéricos obtenidos para el hormigón con una temperatura inicial de 13 °C.

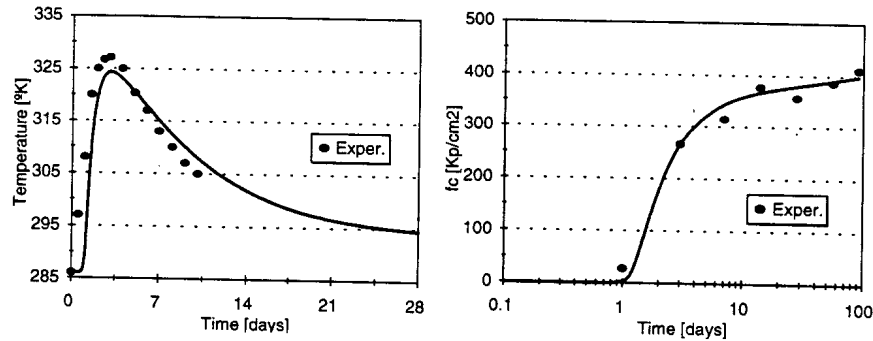


Fig. 8. Evolución de temperaturas y resistencia a compresión. Resultados numéricos y experimentales.^[12]

Una vez más queda demostrada la bondad del modelo para representar el fenómeno de hidratación y envejecimiento del hormigón. Cabe destacar en este caso que los parámetros utilizados para modelar los dos ensayos son idénticos, variándose únicamente la temperatura inicial y la resistencia a compresión máxima.

Ensayo en estructuras de hormigón

En Fig. 9 se presentan esquemas de las estructuras modeladas en la serie III y IV respectivamente. La primera de ellas representa la sección de una pared gruesa similar a la de una estructura para trenes subterráneos, cuyas dimensiones son de 3.8 m. de longitud, 3.8 m. de alto y 1.6 m. de espesor. La línea sombreada muestra la ubicación del material aislante colocado para representar correctamente la dirección del flujo de calor en las condiciones a las que la estructura se encuentra sometida. El encofrado de madera se retiró a los 3 días posteriores al hormigonado.

La otra estructura estudiada es una sección típica de la estructura de hormigón del Y.S. Center Building (para más detalles ver referencia [12]). En Fig. 9 se muestran los puntos donde fueron medidas las temperaturas a lo largo del ensayo. La discretización espacial se realizó con elementos de 4 nodos lineales. En la Tabla I se describe el valor de datos y propiedades utilizados en el modelo numérico.

En Fig. 10 y 11 se presenta una comparación entre las evoluciones de temperatura y resistencia a compresión (ambos medidos en los puntos centrales de las estructuras) obtenidos a partir de resultados experimentales y numéricos.

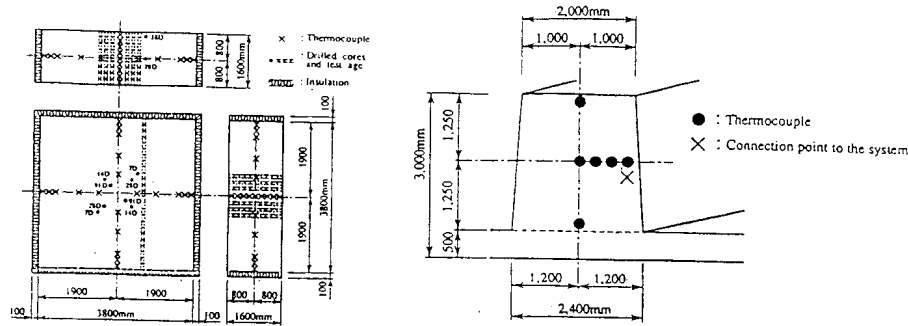


Fig. 9. Esquema de estructuras de hormigón analizadas. ^[12]

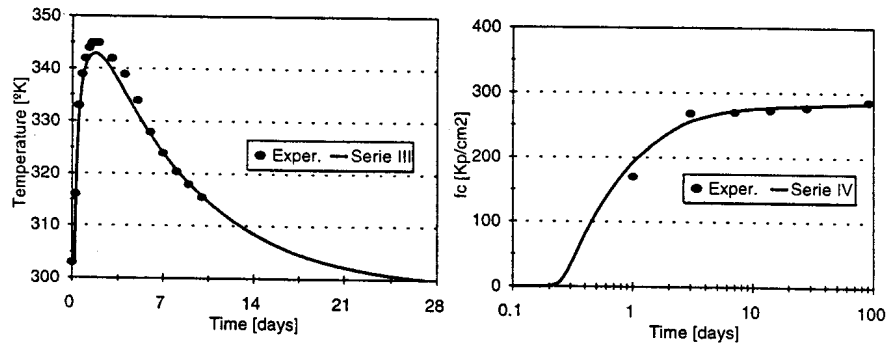


Fig. 10. Evolución de temperaturas y resistencia a compresión. Resultados numéricos y experimentales. Serie III ^[12]

En las Fig. 10 y 11 se observa que tanto la descripción numérica de la evolución de las temperaturas como la evolución de la resistencia a compresión es muy buena. A la luz de los resultados presentados puede concluirse que el modelo presentado describe correctamente los fenómenos estudiados.

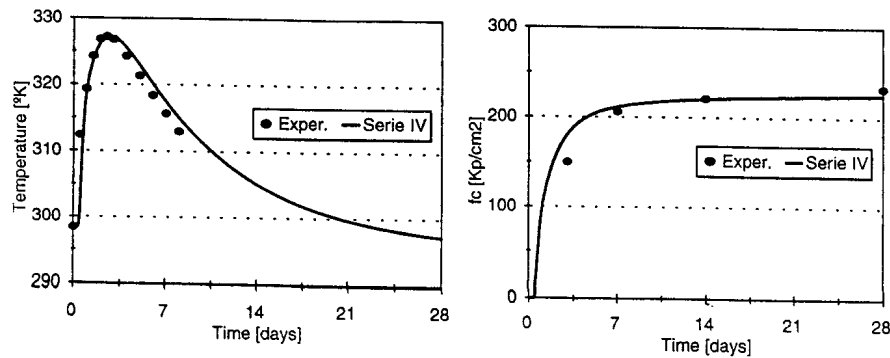


Fig. 11. Evolución de temperaturas y resistencia a compresión. Resultados numéricos y experimentales. Serie IV ^[12]

CONCLUSIONES

Para describir la evolución de las propiedades mecánicas de un material como el hormigón, a lo largo del proceso de hidratación del cemento, es necesario tener en cuenta, de alguna manera, el desarrollo de las propiedades microestructurales del material. En el presente trabajo la descripción microestructural se realiza a través de la variable grado de hidratación. El modelo numérico implementado y descrito se basa en la termodinámica de los medios porosos reactivos. Para su completa definición es necesario encontrar un potencial asociado al estado termodinámico en que se encuentra el material al actuar los diferentes fenómenos descritos (en este estudio se utiliza la energía libre de Helmholtz como potencial), la definición de un conjunto de variables internas y sus leyes de evolución, y un conjunto de hipótesis simplificativas que permitan el estudio desacoplado de algunos de los fenómenos involucrados en el comportamiento termo-químico del hormigón. Es interesante destacar que el modelo propuesto por Ulm-Coussy^[2] brinda un marco teórico en donde pueden tratarse otros fenómenos que se producen en las primeras edades y que no pueden obviarse cuando se realiza un estudio tensional de una estructura. Tal es el caso de los fenómenos de retracción, fluencia y fisuración.^[1,3] En este trabajo se ha presentado una caracterización de los fenómenos de generación de calor y envejecimiento de hormigones curados en diferentes condiciones. Además, se ha utilizado el modelo numérico para representar la evolución de las temperaturas y propiedades mecánicas de materiales colocados en estructuras reales.

AGRADECIMIENTOS

Sirva este apartado para agradecer al Dr. D. Celentano por su colaboración brindada para el desarrollo del presente trabajo.

REFERENCIAS

- [1] Coussy O., *Mechanics of Porous Continua*. John Wiley & Sons, Chischester, England. 1995.
- [2] Ulm f., Coussy O., *Modeling of Thermochemomechanical Couplings of Concrete at Early Ages*, Journal of Engineering Mechanics, Vol. 121, No. 7, July, 1995. ASCE.
- [3] Ulm F.J., Elouard A., Rossi P., *Modelling of Early Age Concrete Cracking due to Thermo-chemomechanical Couplings*, Fracture Mechanics of Concrete Structures, Proceedings FRAMCOS-2, edited by Folker Wittmann, AEDIFICATIO Publishers, Freiburg, 1995.
- [4] Powers T.C., Brownyard T.L., *Studies of the Physical Properties of Hardened Portland Cement Paste*, Portland Cement Association. 1948.
- [5] Prato T., Cervera M., Oliver J., *Simulación Numérica del Proceso de Hidratación del Hormigón*, Publicación CIMNE N° 114. Mayo 1997.
- [6] Byfors J., *Plain Concrete at Early Ages*, Report of the Swedish Cement and Concrete Research Institute, Stockholm. 1980.
- [7] Khan A., Cook W., Mitchell D., *Early Age Compressive Stress-strain Properties of Low-medium, and High-strength Concretes*, ACI Materials Journal, V.92, No.6. 1995.
- [8] Neville A. M., *Properties of Concret*, Great Britain, Longman Scientific&Technical, John Wiley&Sons., INc., New York. 1981.
- [9] Gorisse F., *Ensayo y Control de los Hormigones*, Editores Técnicos Asociados S.A., Barcelona, España. 1980.
- [10] ACI Committee 207, *Mass Concrete*, Am. Concrete Institute, ACI 207.1, 5-87. 1987.
- [11] Oloukon F., Burdette E.G., Beatherage J.H., *Elastic Modulus, Poisson's Ratio and Compressive Strength Relationships at Eary Age*. ACI Mat. Journal V88, N° 1. Jan-Feb. 1991.
- [12] Kuwahara T., Koh Y., *Computerized Thermal and Strength Simulation System for Concrete Structures*, ACI Materials Journal, V.92.N°2. march-April. 1995

[13] Coussy O., Ulm F.J., *Creep and Plasticity due to Chemo-mechanical Couplings*, in Computational Plasticity (eds. D Owen, Oñate E. and E. Hinton), Pineridge press, Swansea, pp.925-944. 1995.

Tabla I. Propiedades y datos utilizados en los modelos termo-químico y de envejecimiento

Propiedades	H30	H70	H100	Serie II	Serie III	Serie IV
$\rho [Kg/m^3]$	2130	2419	2505	2307	2301	2300
$c [J/Kg^{\circ}C]$	971	971	971	971	971	971
$\hat{k} [J/m.seg.^{\circ}C]$	1.5	1.5	1.5	1.6	1.6	1.6
$T_0 [^{\circ}C]$	21	21	21	24-13	30	25.4
$\Delta T_{adb} [^{\circ}C]$	42.2	43.7	51	50	48	35
$T_{ext} [^{\circ}C]$	21	21	21	20	25	22
$f_{cm} [Kp/cm^2]^1$	250-342	750-882	1050-1015	364-411	286	233
a/c	0.51	0.3	0.25	0.5	0.566	0.515
r_{cm}	0.75	0.63	0.58	0.75	0.77	0.75
$\bar{k} [1/seg.]$	$1.332 \cdot 10^7$	$1.667 \cdot 10^7$	$6.667 \cdot 10^6$	$5.0 \cdot 10^6$	$5.0 \cdot 10^6$	$4.347 \cdot 10^6$
$\bar{\eta}$	6	7	6	6	6	6
$q_{,r} = \rho c \frac{\Delta T}{\Delta r} [J/m^3]$	$1.1634 \cdot 10^8$	$1.629 \cdot 10^8$	$2.138 \cdot 10^8$	$1.493 \cdot 10^8$	$1.392 \cdot 10^8$	$1.116 \cdot 10^8$
\bar{A}	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$	$1.0 \cdot 10^{-6}$
$\bar{\alpha}$	$2.197 \cdot 10^{-4}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$3.7 \cdot 10^{-4}$
f_{cm} / f_{cr}	20	35	10	30	20	20
r_{cr}	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
$h [J/s.m^2.^{\circ}C]$	3	3	3	8	6	12
A_E	15500	14500	13000	---	---	---
$E_a / R [^{\circ}K]$	6900	6900	6900	6900	6900	6900

¹ Los valores corresponden a la resistencias máximas obtenidas en ensayos adiabáticos y no-adiabáticos, respectivamente