Asociación Argentina



de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXXV, págs. 1313-1328 (artículo completo) Martín I. Idiart, Ana E. Scarabino y Mario A. Storti (Eds.) La Plata, 7-10 Noviembre 2017

# MODELO TERMO-QUÍMICO-MECÁNICO PARA SIMULAR LA RESPUESTA DE UN DIQUE DE GRAVEDAD SUJETO A REACCIÓN ÁLCALI-SÍLICE

Martín E. Almenar<sup>a</sup>, Mariela Luege<sup>a,b</sup> y Antonio Orlando<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Instituto de Estructuras, Universidad Nacional de Tucumán. Avenida Independencia 1800, 4000 San Miguel de Tucumán, Argentina, iest@herrera.unt.edu.ar

# <sup>b</sup>CONICET

**Palabras Clave:** Reacción álcali-sílice; Reacción álcali agregado; Reacción química; Modelo no local de daño.

Resumen. Las reacciones álcali-sílice (RAS) en estructuras de hormigón consisten en reacciones químicas que se producen entre agregados con sílice reactiva y los álcalis que se liberan durante la hidratación del cemento. El producto de estas reacciones es un gel expansivo que conduce a la fisuración del hormigón, comprometiendo su durabilidad. Se trata de un proceso complejo debido a que el acoplamiento entre la difusión del calor, humedad y la cinética del RAS puede ser crítico. La RAS es una reacción química que es activada térmicamente y bajo ciertas condiciones de contenido de agua. La disponibilidad de una herramienta que permita realizar una evaluación cuantitativa, en tiempo y espacio, del impacto de los efectos que dichas expansiones pueden provocar en estructuras de hormigón es de fundamental importancia en la evaluación de la durabilidad de estructuras que manifiestan este fenómeno. Los diques, por ejemplo, son estructuras que potencialmente presentan este tipo de degradación dado que en forma permanente durante al menos por un largo período de su vida en servicio están en contacto con agua o suelos húmedos. En este trabajo se desarrolla un modelo gradiente de daño basado en la mecánica multifásica de medios reactivos porosos, donde las ecuaciones de masa, energía y momento conjuntamente a las relaciones constitutivas y físicas necesarias para modelar la RAS en condiciones ambientales variables se desarrollan de manera acoplada y resuelven mediante el método de los elementos finitos. Simulaciones numéricas de un dique de gravedad sujeto a condiciones variables de temperatura a lo largo de 16 años de vida útil verifican el modelo propuesto.

### 1. INTRODUCCIÓN

Una de las reacciones químicas más importantes que afecta al hormigón es la reacción álcali sílice (RAS). La RAS en el hormigón es una reacción deleterea que se da en su interior al reaccionar los iones alcalinos ( $Na^+$  o  $K^+$ ), presentes en la solución de poros de la pasta de cemento, con la sílice activa, capaz de reaccionar, que se encuentra en los agregados. El producto de la RAS es un gel que al entrar en contacto con agua se expande. Al expandir el gel de la RAS en el interior de la porosidad del hormigón donde se aloja, causa presiones internas que pueden producir micro fisuración en el material y también, en casos extremos, fisuras apreciables a simple vista por donde puede incluso brotar el gel. Es evidente entonces que la RAS produce deterioro en la propiedades mecánicas del hormigón y por consiguiente esto afectará a las estructuras constituidas con este material. Por este motivo, al ser el hormigón uno de los materiales más utilizados en la construcción, el estudio de la RAS en diversos aspectos tomó gran importancia.

Con respecto al gran número de estructuras existentes realizadas con agregados potencialmente peligrosos para producir RAS, el único modo de reducir el peligro es tomando medidas tales como la reparación o sellado de fisuras. Las medidas a tomar dependen en gran parte de la predicción de los campos de tensiones y deformaciones en el hormigón reactivo. Es por esto, que se requieren los modelos constitutivos macroscópicos para una simulación realista de la expansión inducida por la RAS en la estructura. En los últimos años, muchos de estos modelos han sido desarrollados, y ellos reprodujeron con éxito los campos de tensiones y deformaciones de las estructuras afectadas por RAS. Todo modelo constitutivo macroscópico para reproducir el comportamiento del hormigón afectado por RAS debe poseer dos elementos fundamentales; el aspecto químico, para el cual se introducen una serie de variables que tiene en cuenta el avance de la RAS en el tiempo (cinética de la reacción); y la interacción de estas variables con el aspecto mecánico de la reacción de tal forma de producir deterioro en el material y por consiguiente afectar a la estructura que se desea analizar. Muchos de los modelos macroscópicos son formulados en el marco de los elementos finitos introduciendo en el modelo constitutivo la cinética de la reacción química. Se considera allí la degradación del material por medio de modelos de plasticidad o de daño isótropo o anisótripo, entre otros, pudiéndose mencionar Pietruszczak (1996), Ulm et al. (2000), Huang y Pietruszczak (1999) y Comi et al. (2009)). Algunos modelos constitutivos más sofisticados incluyen incluso los fenómenos de creep y shrinkage durante el proceso de RAS como ser Grimal et al. (2008a), Grimal et al. (2008b), Pesavento et al. (2012). Para la cinética de la reacción se adopta la cinética propuesta originalmente por Larive (1997) o sus modificaciones posteriores propuestas por Steffens et al. (2003), entre otros. Varios factores de los que dependen la RAS se introdujeron en la cinética, como por ejemplo los efectos de la temperatura, la humedad, el estado de tensiones, etc.

En este trabajo desarrollamos la formulación de un modelo constitutivo macroscópico para representar el comportamiento del hormigón afectado por RAS. El aspecto mecánico del modelo corresponde a un modelo no local de daño, dicho modelo introduce en la formulación el gradiente de daño, como cantidad no local, con el objetivo de regularizar el problema durante el fenómeno de ablandamiento. Luego para tener en cuenta el efecto de la RAS se introducen en el modelo dos aspectos fundamentales: por un lado se utiliza una función de energía libre adecuada para representar el comportamiento de un material que se considera bifásico, constituido por la homogeneización de un esqueleto sólido (hormigón) y una fase gel. Por otro lado se tiene el cuenta el efecto de la RAS mediante una presión producida por el gel que responde a la teoría de Biot. Esta presión modifica principalmente la función de daño y el progreso de la variable que mide la degradación del material. En el aspecto químico del modelo explicamos de que modo utilizamos la teoría de Biot para representar el comportamiento del hormigón afectado por RAS y explicamos también la inclusión y modo de cálculo de una variable que mide el progreso de la RAS, la cual hacemos depender en este trabajo de la temperatura. El modelo es finalmente verificado y validado con la reproducción numérica de diversos ensayos de laboratorio disponibles en la literatura.

### 2. MODELO DE DAÑO NO LOCAL PROPUESTO

Para tener en cuenta la degradación de la rigidez en el material se considera la variable de daño  $\beta$  que toma el valor 0 cuando el material se encuentra sano y 1 cuando se encuentra totalmente dañado. Para subsanar el problema al que lleva la reproducción de una respuesta con ablandamiento se decide introducir explícitamente en la formulación una cantidad no local como lo es el gradiente de daño  $\nabla\beta$ . La introducción de esta cantidad en la formulación se hace por medio del potencial de energía libre (ver Lorentz y Godard (2011) y Frémond y Nedjar (1996)). Durante el proceso de daño la cantidad no local afecta a una serie de puntos vecinos gracias a la ayuda de un parámetro c > 0 que controla indirectamente el ancho de localización del daño. De este modo la zona involucrada en el proceso de daño es siempre la misma independientemente de la malla elegida para resolver el problema.

A continuación se da una breve descripción del modelo de daño. Más detalles de la formulación y resolución numérica del mismo pueden encontrarse en Almenar et al. (2016a).

#### 2.1. Notación y consideraciones

En el siguiente desarrollo se utiliza la hipótesis de pequeños desplazamientos. Los vectores y tensores se denota con letras en negrita. El producto escalar entre tensores se denota con "·". El producto escalar entre vectores o entre tensor y vector se denota con "·". El producto tensorial se denota con " $\otimes$ ". La operación  $\dot{\bullet}$  es la derivada en el tiempo de  $\bullet$ . La operación  $\nabla \bullet$  es el gradiente de  $\bullet$ . La operación  $div(\bullet)$  es la divergencia de  $\bullet$ . El tensor de deformaciones  $\varepsilon = \varepsilon(u)$  es el gradiente simétrico del campo de desplazamientos u.

#### 2.2. Leyes constitutivas generales

En este modelo el estado del material queda definido por la deformación  $\varepsilon$ , y por el daño  $\beta$  mediante el potencial de energía libre global  $\Psi$  y el potencial de disipación global  $\Phi$  del siguiente modo:

$$\Psi(oldsymbol{arepsilon},eta)=\Psi_1(oldsymbol{arepsilon},eta)+\Psi_2(eta),$$

$$\Psi_{1}(\boldsymbol{\varepsilon},\beta) = \int_{\Omega} \psi(\boldsymbol{\varepsilon},\beta) \, d\Omega, \quad \Psi_{2}(\beta) = \int_{\Omega} \frac{c}{2} \, (\nabla\beta)^{2} \, d\Omega, \tag{1}$$
$$\Phi(\dot{\beta}) = \int_{\Omega} \phi(\dot{\beta}) \, d\Omega, \tag{2}$$

donde  $\psi$  y  $\phi$  son la función de energía libre local y el potencial de disipación local respectivamente;  $\Omega$  denota el dominio del sólido analizado. Las funciones anteriores permiten realizar la formulación en el marco de los modelos estandar generalizados, consiguiendo una formulación termodinámicamente consistente. Para tal fin se exige a la función  $\Psi$  ser convexa con respecto a  $\varepsilon$  y a  $\beta$  separadamente. Se exige también a la función  $\Phi$  ser convexa y mínima en 0. Las funciones anteriores permiten definir las cantidades escalares tensión global  $\mathscr{S}$  y fuerza global asociada al daño  $\mathscr{B}$ , por medio de las siguientes derivadas direccionales.

$$\mathscr{S}(\Psi(\boldsymbol{\varepsilon},\beta),\boldsymbol{E}) = D[\Psi(\boldsymbol{\varepsilon},\beta)]\boldsymbol{E} = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{E} \, d\Omega, \quad \boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi(\boldsymbol{\varepsilon},\beta)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}, \tag{3}$$

$$\mathscr{B}(\Psi(\boldsymbol{\varepsilon},\beta),\mathbb{B}) = -D[\Psi(\boldsymbol{\varepsilon},\beta)]\mathbb{B} = \int_{\Omega} \mathscr{V} \mathbb{B} d\Omega + \int_{\Omega} \boldsymbol{A} \cdot \nabla \mathbb{B} d\Omega,$$
  
$$\mathscr{V} = -\frac{\partial \psi(\boldsymbol{\varepsilon},\beta)}{\partial \beta}, \quad \boldsymbol{A} = -c \ \nabla \beta,$$
(4)

$$\mathscr{B} \in \partial \Phi(\dot{\beta}),\tag{5}$$

donde  $D[\bullet(\circ)]\diamond$  es la derivada direcional de  $\bullet$ , centrada en  $\circ$  y en la dirección  $\diamond$ . E es una función de test dado por un tensor de segundo orden compatible con el campo  $\varepsilon$ .  $\mathbb{B}$  es una función de test dado por un escalar compatible con el campo  $\beta$ .  $\sigma$  es la fuerza asociada termodinámicamente a  $\varepsilon$  dada por un tensor de segundo orden, en adelante llamada tensión.  $\mathscr{V}$  y A son la fuerza escalar y vectorial respectivamente asociadas termodinámicamente al campo  $\beta$ . El operación  $\partial \bullet$  denota la sub-diferencial o derivada generalizada de  $\bullet$ . El último requisito de los modelos estandar generalizados tiene que ver con el cumplimiento de la ecuación (5), la cual indica que la fuerza global asociada al daño  $\mathscr{B}$  debe estar contenida en el conjunto que representa la derivada generalizada del potencial de disipación  $\Phi(\dot{\beta})$ .

#### 2.3. Aplicación del principio de las potencias virtuales

A partir de las ecuaciones (3) y (4) se puede definir la potencia virtual interna como:

$$\mathcal{P}_{int}(\delta \dot{\boldsymbol{u}}, \delta \dot{\boldsymbol{\beta}}) = \mathscr{S}(\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\beta}), \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \dot{\boldsymbol{u}})) + \mathscr{B}(\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\beta}), \delta \dot{\boldsymbol{\beta}}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon}(\delta \dot{\boldsymbol{u}}) \, d\Omega + \int_{\Omega} \mathscr{V} \delta \dot{\boldsymbol{\beta}} \, d\Omega + \int_{\Omega} \boldsymbol{A} \cdot \nabla \delta \dot{\boldsymbol{\beta}} \, d\Omega, \quad (6)$$

donde el  $\delta \bullet$  indica la variación de  $\bullet$ . En la ecuación (6) el primer término es clásico; el segundo término que depende de  $\delta \dot{\beta}$  es el que tiene en cuenta la potencia de los micro movimientos producidos por el daño; el tercer término que depende de  $\nabla \delta \dot{\beta}$  es el que tiene en cuenta la participación de puntos vecinos en el proceso de daño.

Considerando que solo se tiene en cuenta fuerzas externas asociadas al campo de desplazamientos u, se define la potencia virtual de las fuerzas externas como:

$$\mathscr{P}_{ext}(\delta \dot{\boldsymbol{u}}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{f} \cdot \delta \dot{\boldsymbol{u}} \, d\Omega + \int_{\partial \Omega} \boldsymbol{F} \cdot \delta \dot{\boldsymbol{u}} \, d\Gamma, \tag{7}$$

donde los vectores f y F son las fuerzas volumétricas y superficiales respectivamente.  $\partial \Omega$  es el contorno de  $\Omega$ .

Considerando el caso cuasiestatico, de tal forma que la potencia virtual de las fuerzas de inercia no tienen incidencia, el principio de potencias virtuales se reduce a

$$\forall \delta \dot{\boldsymbol{u}}, \forall \delta \dot{\boldsymbol{\beta}} \quad \mathscr{P}_{int}(\delta \dot{\boldsymbol{u}}, \delta \dot{\boldsymbol{\beta}}) = \mathscr{P}_{ext}(\delta \dot{\boldsymbol{u}}) \quad en \ \Omega.$$
(8)

La ecuación (8) permite derivar las ecuaciones de equilibrio del problema, para esto se aplica integración por parte y se utiliza el teorema fundamental del calculo variacional. También se

tiene en cuenta la ecuación (5), con lo que llegamos a las ecuaciones que definen el modelo de daño :

$$div(\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{f} = 0 \quad en \ \Omega \ con \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{F} \quad sobre \ \partial\Omega, \tag{9}$$

$$\mathscr{V} - div(\mathbf{A}) \in \partial \phi(\dot{\beta}) \quad en \ \Omega \ con \quad \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\gamma} = 0 \quad sobre \ \partial \Omega, \tag{10}$$

donde  $\gamma$  es un vector normal unitario saliente a  $\partial \Omega$ .

La ecuación (9) es clásica y ayuda a obtener el campo de desplazamientos. La ecuación (10) es la que ayuda a obtener el campo de daño. Su resolución puede realizarse mediante la definición de una función de daño que cumpla las condiciones de carga y descarga como se indica a continuación:

$$y = \mathscr{V} - div(\mathbf{A}) \in \partial\phi(\dot{\beta}) \longleftrightarrow \begin{cases} \dot{\beta} = \epsilon \frac{df}{dy}(y), \\ f(y) \le 0, \quad \epsilon \ge 0, \quad \epsilon f(y) = 0, \end{cases}$$
(11)

adoptando en este caso:

$$f(\mathscr{V} - div(\mathbf{A})) = \mathscr{V}^* + c\nabla^2 \beta - k, \tag{12}$$

$$\phi(\dot{\beta}) = k\dot{\beta} + \mathbb{I}_{R^+}(\dot{\beta}) \ con \ \mathbb{I}_{R^+}(\dot{\beta}) = \begin{cases} 0 & si \ \dot{\beta} \ge 0, \\ +\infty \ si \ \dot{\beta} < 0, \end{cases}$$
(13)

donde f es una función de daño que responde al criterio de Lubliner et al. (1989) mediante la modificación de la fuerza escalar asociada al daño  $\mathscr{V}^*$  como se indica en Almenar et al. (2016a), k es un umbral de daño y  $\mathbb{I}_{R^+}(\dot{\beta})$  es una función indicador que fuerza la irreversibilidad del daño.

# 3. COMPORTAMIENTO CONSTITUTIVO DEL MATERIAL HORMIGÓN AFEC-TADO POR RAS

En esta sección se mencionan los principales aspectos a tener en cuenta para extender la formulación de modelos de daño y poder representar el comportamiento del hormigón afectado por RAS. Para esto se toma como base el desarrollo realizado en Almenar et al. (2016b) y se añade en las ecuaciones la posibilidad de considerar la variación espacial y temporal del campo de temperaturas.

#### 3.1. Empleo de la teoría de Biot en un modelo bifásico

En el modelo realizado en este trabajo se utiliza la teoría de Biot (Coussy, 2004) para representar el comportamiento constitutivo del hormigón afectado por RAS siguiendo la línea de Ulm et al. (2000) y Comi et al. (2009). Consideramos que un punto del material hormigón afectado por RAS, en la meso escala está constituido por dos fases: esqueleto sólido (homogeneización de pasta de cemento, agregado y porosidad del hormigón) y una fase gel alojada en una porosidad no contenida en la fase de esqueleto sólido. El gel comienza a expandir dentro de su porosidad disponible hasta que la llena completamente, una vez que llena dicha porosidad un incremento del volumen del gel causa una presión  $p^g$ . En un proceso de expansión libre (el material solo está sometido a la expansión del gel) la presión del gel  $p^g$  es balanceada por las tensiones internas en el esqueleto sólido  $\sigma^s$  de tal forma que la tensión total en el material  $\sigma$  es nula. En otras palabras la resultante de  $p^g$  que llamaremos presión total de gel  $P^g$  y la resultante de  $\sigma^s$  que llamaremos tensión efectiva  $\sigma^{ef}$ , ambas son iguales y de sentido opuesto. En el caso de actuar cargas externas la tensión total  $\sigma$  deja de ser nula.

En cualquiera de los dos casos anteriores, la relación ente las variables en la meso escala  $\sigma^s$ ,  $p^g$  y  $\phi^g$  y la variables en la macro escala  $\sigma$ ,  $\sigma^{ef}$ ,  $P^g$  y la deformación total  $\varepsilon$ , pueden ser expresada bajo la teoría de Biot, con ayuda del módulo Biot M y el coeficiente de Biot b, y los parámetros elásticos del esqueleto sólido K y G. Esta relación puede observarse en la figura (1), en la que se considera además el efecto de la dilatación térmica de la fase sólida y la fase gel. Las relaciones explicadas anteriormente se pueden expresar, si se considera un comportamiento



Figura 1: Tensiones en el EVR.

isótropo tanto del esqueleto sólido como de la presión del gel producida en el espacio poroso, como:

(a) 
$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{ef} - \boldsymbol{P}^{g} = 2G\boldsymbol{e} + Ktr(\boldsymbol{\varepsilon})\boldsymbol{\delta} - bp^{g}\boldsymbol{\delta} - K\alpha^{s}\Delta T\boldsymbol{\delta},$$
  
(b)  $p^{g} = M(-btr(\boldsymbol{\varepsilon}) + \frac{\xi\epsilon^{\infty}}{B^{g}} - \alpha^{g}\Delta T),$ 
(14)

donde  $\delta$  es la identidad de segundo orden,  $e y tr(\varepsilon)$  son el tensor desviador y la traza de  $\varepsilon$ ,  $\Delta T$  es la variación del campo de temperaturas T,  $\alpha^s y \alpha^g$  son los coeficientes de dilatación térmicos del esqueleto sólido y del gel respectivamente,  $\xi$  es la varaible que mide el progreso de la RAS (explicaremos su significado más adelante),  $\epsilon^{\infty}$  es la máxima expansión volumétrica producida por la RAS en expansión libre y  $B^g = (K + Mb^2)/Mb$ .

En el tercer miembro de la ecuación (14)(a), los dos primeros términos representan la parte de la tensión efectiva producida por cargas mientras que el cuarto término representa la parte de la tensión efectiva producida por la dilatación térmica del esqueleto sólido; el tercero representa la presión del gel. Las partes de la presión del gel se pueden observar en el segundo miembro de la ecuación (14)(b), donde, el primer témino representa lo que se se deforma la porosidad que aloja al gel, el segundo término la expansión del gel y el tercer témino la dilatación del gel.

#### 3.2. Introducción de la variable progreso de la RAS

En este trabajo la RAS es tenida en cuenta mediante una variable que mide su progreso de manera global  $\xi$ . Dicha variable vale 0 cuando la reacción no ha comenzado y 1 cuando se ha agotado completamente. El cálculo de dicha variable se realiza en base al trabajo de Larive (1997) y de Ulm et al. (2000), quienes propusieron, en base a observaciones experimentales,

relaciones lineales tanto de  $\xi$  como de  $\dot{\xi}$  con su variable termodinámicamente asociada, que es la afinidad química  $A^g$ . Dichas expresiones son:

$$A^g(\xi) = k^d \xi, \tag{15}$$

$$A^{g}(\xi) = A_{0}^{g}(1-\xi), \tag{16}$$

donde  $k^d > 0$  y  $A_0^g$  es la afinidad química inicial. Combinando las ecuaciones (15) y (16) se obtiene:

$$1 - \xi = t^i \dot{\xi},\tag{17}$$

donde  $t^i = \frac{k^d}{A_0^g}$  es el tiempo intrínseco de la reacción el cual puede ser determinado experimentalmente. Este tiempo puede depender de distintos factores como temperatura, grado de saturación, estado tensional, tamaño de los agregados, etc, tal cual lo confirman algunos trabajos experimentales como Larive (1997), Haha et al. (2007), etc. En este trabajo consideraremos el caso de la variación de  $t^i$  mediante efectos de la temperatura, mediante la siguiente expresión:

$$t^{i} = \tau_{c}(T) \frac{1 + exp\left(-\frac{\tau_{l}(T)}{\tau_{c}(T)}\right)}{\xi + exp\left(-\frac{\tau_{l}(T)}{\tau_{c}(T)}\right)}$$
(18)

donde  $\tau_l(T)$  y  $\tau_c(T)$  son los tiempos de latencia y característico respectivamente como función de la temperatura. Dichos tiempos, para una temperatura constante  $\overline{T}$ , toman también valores constantes y son los parámetros que definen la forma del progreso de la RAS en el tiempo, como se ve en la figura (2). Dichos parámetros pueden ser obtenidos de un ensayo de expansión libre ( $\sigma = 0$ ), con ayuda de la ecuación (14)(a). Pata introducir la dependencia de  $\xi$  con la



Figura 2: Tiempos característicos  $\tau_c$  y de latencia  $\tau_l$  a temperatura constante.

temperatura, Ulm et al. (2000) observó que los tiempos de latencia y característico responden a la ley de arrhenius según:

$$\tau_p(T) = \tau_p(\overline{T})exp\left[U_p\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{\overline{T}}\right)\right], \quad p = l, c,$$
(19)

donde  $U_l$  y  $U_c$  son energías de activación que deben ser obtenidas mediante el conocimiento de curvas de expansión libre a temperatura constante.

#### 3.3. Función de energía libre utilizada

Para poder representar el comportamiento del hormigón afectado por RAS se toma una función de energía libre local  $\psi$  de la ecuación (1) adecuada para tal fin. La función adoptada en este trabajo se basa en la propuesta de Comi et al. (2009), la cual al menos en su parte poromecánica debe respetar la forma de la tensión presentada en la ecuación (14). La propuesta es la siguiente:

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \alpha, \xi, T) = R(\beta) \left[ \psi_{pm}(\boldsymbol{\varepsilon}, \xi) + \psi_T(\boldsymbol{\varepsilon}, \xi, T) \right] + \psi_q(\xi), \tag{20}$$

$$\psi_{pm}(\boldsymbol{\varepsilon},\xi) = \frac{1}{2} \left\{ 2G \, \boldsymbol{e} : \boldsymbol{e} + K \, tr(\boldsymbol{\varepsilon})^2 + Mb^2 \left[ tr(\boldsymbol{\varepsilon}) - \frac{\boldsymbol{\epsilon}^{\infty}}{B^g b} \xi \right]^2 \right\},\tag{21}$$

$$\psi_{T}(\boldsymbol{\varepsilon},\xi,T) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{R(\beta)} \left[ -\frac{c^{T}}{T^{0}} + M\alpha^{g\,2} \right] \left[ T - T^{0} \right]^{2} - 2K \, tr\left(\boldsymbol{\varepsilon}\right) \alpha^{s} \left[ T - T^{0} \right] - 2Mb \left[ tr\left(\boldsymbol{\varepsilon}\right) - \frac{\epsilon^{\infty}}{B^{g}b} \xi \right] \alpha^{g} \left[ T - T^{0} \right] \right\}, \quad (22)$$

$$\psi_q(\xi) = \frac{1}{2} A_0^g (1 - \xi)^2.$$
(23)

donde  $\psi_{pm}(\boldsymbol{\varepsilon}, \xi)$  es la energía libre del medio poroso,  $\psi_T(\boldsymbol{\varepsilon}, \xi, T)$  es la energía libre térmica y  $\psi_q(\xi)$  es la energía libre química.  $T^0$  es el campo de temperaturas iniciales y  $c^T$  es la capacidad calórica. Con el fin de tener en cuenta el daño producido por las acciones mecánicas y químicas, se introduce la función de rigidez  $R(\beta)$  afectando a la función de energía libre. La forma de la función de rigidez utilizada puede encontrarse en Almenar et al. (2016a). Con la función de energía libre local  $\psi$  se pueden plantear las relaciones constitutivas locales del modelo propuesto:

(a) 
$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = R \left\{ 2G\boldsymbol{e} + K \left[ tr \left( \boldsymbol{\varepsilon} \right) - \alpha^{s} \left[ T - T^{0} \right] \right] \boldsymbol{\delta} \right\} - bp^{g} \boldsymbol{\delta},$$

(b) 
$$p^{g} = -R M \left\{ btr(\boldsymbol{\varepsilon}) - \left[ \frac{\epsilon^{\infty} \xi}{B} + \alpha^{g} \left[ T - T^{0} \right] \right] \right\},$$

(c) 
$$V = -\frac{\partial \psi}{\partial \alpha} = -R' \left[ \psi_{pm} + \psi_T \right]$$

(d) 
$$A^g = -\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = -\frac{\epsilon^\infty}{B} p^g + A^g_0(1-\xi) \approx A^g_0(1-\xi),$$

(e) 
$$S = -\frac{\partial \psi}{\partial [T - T^0]} = f(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\xi}) + \left[\frac{c^T}{T^0} - M\alpha^{g^2}\right] [T - T^0] \approx \left[\frac{c^T}{T^0} - M\alpha^{g^2}\right] [T - T^0].$$
(24)

donde S es la variable termodinámicamnete asociada a la temperatura, que es la entropía. Como puede observarse en el tercer miembro de las ecuaciones (24)(d)y(e) se desprecian los primeros términos. Esto se hace en virtud del trabajo de Ulm et al. (2000) y es utilizado actualmente por muchos modelos de este tipo (Saouma y Perotti (2006), Grimal et al. (2008a), Comi et al. (2009), Comi et al. (2012)). Lo que esta simplificación permite es resolver el problema térmico y químico de manera desacoplada del problema mecánico. Por esta razón la marcha de cálculo en el modelo propuesto es la siguiente: se resuelve en primer lugar el problema térmico mediante la ecuación del calor en régimen transitorio. Luego, con el campo de temperaturas se resuelve el problema químico para terminar el progreso de la RAS. Finalmente, utilizado de datos de entrada el campo de temperaturas y de progreso de la RAS, se resuelve el problema mecánico. Esta marcha de cálculo del modelo puede verse en la figura (3).



Figura 3: Marcha de cálculo del modelo propuesto.

## 3.4. Evaluación de la función de daño

Para poder tener en cuenta el efecto químico en la variable de daño, la fuerza escalar asociada al daño  $\mathscr{V}^*$  de la ecuación(12), tiene la siguiente forma:

$$\mathscr{V}^* = -R' \ \varpi^*(\varepsilon), \tag{25}$$

$$\varpi^*(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2E} \left[ \mathscr{C}(\boldsymbol{\sigma}_0^{ief}) \right]^2, \tag{26}$$

donde  $\mathscr{C}$  es el criterio de daño del Lubliner et al. (1989) en función de la tensión inelástica efectiva no dañada  $\sigma_0^{ief}$ .

La tensión inelástica efectiva es la tensión en la cual se basa el criterio de daño para poder contemplar en la variable de daño tanto el efecto mecánico como el químico. Al igual que en el trabajo de Comi et al. (2009) se define a dicha tensión como:

$$\boldsymbol{\sigma}^{ief} = R\boldsymbol{\sigma}_0^{ief} = \boldsymbol{\sigma} + \varsigma p^g \boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{\sigma}^{ef} + (\varsigma - b) p^g \boldsymbol{\delta}$$
(27)

donde  $\varsigma$  es el coeficiente de daño químico. Como se observa en la ecuación (27)  $\varsigma$  controla el nivel de daño en un proceso de expansión libre, es decir cuando  $\sigma$  es nula. También se observa que  $\varsigma$  indica que parte de la presión  $p^g$  es capaz de producir daño, debiendo ser siempre  $\varsigma \leq b$ .

# 4. SIMULACIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE UNA PRESA DE HORMIGÓN SU-JETA A RAS

A continuación se muestra la simulación de la respuesta de una presa de gravedad de hormigón sujeta a RAS con el objetivo de probar el modelo en forma completa. Los resultados obtenidos se contrastan con los de otro modelo de Comi et al. (2009) con el que se reprodujo el mismo ejemplo. Ejemplos de validación del modelo, en el que se reprodujeron la respuesta de ensayos de laboratorio pueden encontrarse en Almenar et al. (2016b).

La geometría, cargas y malla empleada en el ejemplo se pueden ver en la figura (4).



Figura 4: Geometría, cargas y malla utilizada en la presa analizada.

La presa analizada se trata de la presa Koyna construida en 1963 en Maharashtra (India), Tiene 103 m de altura y una ancho de 808 m. En 1967 un terremoto dañó severamente la presa dejándola en desuso, y desde entonces la misma es utilizada en diversas investigaciones relacionadas con la mecánica computacional.

En la resolución de este ejemplo se considera la variación a lo largo del año de la temperatura por lo que para resolverlo se requiere, como primera instancia, la resolución de un problema térmico. Luego, con el problema térmico, se puede resolver el problema químico. Finalmente, utilizando como entrada de datos el campo de temperatura y de progreso de la RAS, se resuelve el problema mecánico.

El problema térmico se realiza resolviendo la ecuación del calor en régimen transitorio en el cuerpo de la presa y a lo largo de 16 años. La base de la presa se encuentra a  $6^{\circ}C$  mientras que el resto de los bordes de la presa se encuentran a una temperatura variable a los largo del año según se encuentren en contacto con agua o con aire. Esto puede verse en las figuras (5) y (6)



Figura 5: Variación de la temperatura del agua y de aire a lo largo del año.

Una vez que se obtiene el campo de temperaturas se puede obtener el campo de progreso de la RAS mediante la resolución de la ecuación (17), en la cual se debe realizar el reemplazo



Figura 6: Variación del nivel de agua en la presa a lo largo del año.

de  $\dot{\xi}$  con el método de Eulear implícito y luego, por encontrarnos con una ecuación no lineal, resolverla con algún método como el de Newton-Raphson.

Los parámetros con los que se resolvieron los problemas térmico y químico se exponen en la figura (7) y una descripción detallada del proceso de cálculo de ambos problemas puede encontrarse en Almenar et al. (2017). En la figura (8) se observan los mapas de temperatura en el cuerpo de la presa y su variación a lo largo de un año. En la figura (9) se observan los mapas de progreso de la RAS a lo largo de 16 años. Como comentario de la resolución de estos dos problemas observamos que las mayores temperaturas en la presa se dan en la zona del espaldón. Por esta causa es en el espaldón donde comienza la RAS dirigiéndose con el transcurrir del tiempo en dirección del paramento vertical y de la base.

P. químicos		
$\tau_l =$	130	[días]
$\tau_c =$	66	[días]
$\epsilon^{\infty} =$	0,00289	[-]
$\varsigma =$	0,0873	[-]
$\overline{T} =$	9400	$[^{\circ}C]$
$U_l =$	38	[K]
$U_c =$	5400	[K]
P. térmicos		
$k^T =$	3	$[Wm^{-1}K^{-1}]$
$c^T =$	2327500	$[Jm^{-3}K^{-1}]$

Figura 7: Parámetros del problema térmico y químico.



Figura 8: Distribución de temperaturas en el cuerpo de la presa.

Una vez obtenidos los campos de temperatura y de progreso de la RAS, lo mismos son utilizados como datos de entrada para la simulación mecánica. La simulación mecánica se realiza en dos etapas. En la primera se simula el comportamiento de la presa a lo largo de 16 años



Figura 9: Distribución del progreso de la reacción en el cuerpo de la presa.

con la carga hidráulica variando a lo largo del año como lo indica la figura (6). Los parámetros del modelo mecánico con los que se realizaron las simulaciones se muestran en la figura (10). La referencia de estos parámetros que no se encuentran en este trabajo pueden consultarse en Almenar et al. (2016a), como así también una explicación detallada de cada uno de ellos. Los mapas de daño y deformaciones volumétricas en el cuerpo de la presa se pueden ver en las figura (11) y (12). En la segunda etapa se realiza el ensayo *overtopping* el cual consiste en detener la simulación anterior en un instante de tiempo determinado y elevar el nivel del agua hasta obtener la falla de la presa. Se llama en adelante relación *overtopping* al cociente entre la altura de agua alcanzada y la altura de la presa. Este ensayo fue realizado en la presa sin efectos de la RAS (año 0) y a los 12 años. Los mapas de daño al comienzo y al final del ensayo para ambos instantes de tiempo se pueden ver en las figuras (13) y (14) respectivamente. En la figura (15) se puede ver el desplazamiento de la cresta de la presa vs la relación *overtopping* tanto para el modelo propuesto en este trabajo como para el modelo propuesto por Comi et al. (2009).

P. poroelásticos			
K =	12222	[MPa]	
G =	9166	[MPa]	
M =	6000	[MPa]	
b =	$0,\!40$	[-]	
P. de daño			
D =	4	[m]	
$G_f =$	300E - 6	[MPam]	
$f_t =$	$^{2,1}$	[MPa]	
p =	2	[—]	
q =	0	[—]	
$\ell_1 =$	0,12	[-]	
$\ell_2 =$	12	[-]	

Figura 10: Parámetros del modelo mecánico.



Figura 11: Distribución de daño en el cuerpo de la presa.



Figura 12: Distribución de deformaciones volumétricas en el cuerpo de la presa.



Figura 13: Distribución de daño en el ensayo *overtopping* en el año 0. A) Comienzo de ensayo, B) Fin de ensayo. Factor de amplificación de desplazamientos  $1E^{03}$ .



Figura 14: Distribución de daño en el ensayo *overtopping* en el año 12. A) Comienzo de ensayo, B) Fin de ensayo. Factor de amplificación de desplazamientos  $1E^{03}$ .



Figura 15: Desplazamiento de la cresta vs relación *overtopping* para el estado inicial y para 12 años. Comparación entre el modelo propuesto y el modelo de Comi et al. (2009). Factor de amplificación de desplazamientos  $1E^{03}$ .

### 5. CONCLUSIONES Y COMENTARIOS

En este trabajo se presentó la formulación de un modelo adecuado para reproducir el comportamiento del hormigón afectado por RAS. Para representar el comportamiento constitutivo del material se tiene en cuenta la teoría de Biot. De este modo el material hormigón afectado por RAS se considera en la macro escala como la homogeinización de un material formado por dos fases: sólido y fase gel. El efecto químico también es tenido en cuenta mediante una modificación de la función de daño que permite reproducir degradación del material aún en el caso en el que sólo se experimente expansión libre, producto de la RAS. Luego, el modelo es probado en la reproducción del comportamiento de una presa de gravedad de hormigón afectada por RAS. De la formulación del modelo y de los ejemplos reproducidos, se extraen las siguientes conclusiones:

- La variación espacial y temporal de la temperatura tiene gran influencia en la determinación del progreso de la RAS y, conjuntamente al daño químico producido en servicio, ambos se concentran en las zonas expuestas a temperaturas más elevadas
- La temperatura tiene gran influencia en el inicio y desarrollo del progreso de la RAS en la presa.
- Los resultados obtenidos en el ensayo overtopping son similares a los de otro modelo apreciando el decaimiento de la relación overtopping y el aumento del desplazamiento de la cresta de la presa.

#### REFERENCIAS

- Almenar M.E., Luege M., y Orlando A. Modelo no local de daño para simular el comportamiento del hormigón. *Mecánica Computacional*, XXXIV, 2016a.
- Almenar M.E., Luege M., y Orlando A. Modelo no local de daño para simular el comportamiento del hormigón afectado por reacción álcali-sílice. *Mecánica Computacional*, XXXIV, 2016b.
- Almenar M.E., Luege M., y Orlando A. Análisis termo-químico de una presa de gravedad de hormigón. *MATEMÁTICA APLICADA, COMPUTACIONAL E INDUSTRIAL*, 6, 2017.
- Comi C., Fedele R., y Perego U. A chemo-thermo-damage model for the analysis of concrete dams affected by alkali-silica reaction. *Mechanics of Materials*, 41(3):210–230, 2009.
- Comi C., Kirchmayr B., y Pignatelli R. Two-phase damage modeling of concrete affected by alkali–silica reaction under variable temperature and humidity conditions. *International Journal of Solids and Structures*, 49(23-24):3367–3380, 2012.
- Coussy O. Poromechanics. Wiley, 2004.
- Frémond M. y Nedjar B. Damage, gradient of damage and principle of virtual power. *International Journal of Solids and Structures*, 33(8):1083–1103, 1996.
- Grimal E., Sellier A., Pape Y.L., y Bourdarot E. Creep, shrinkage, and anisotropic damage in alkali-aggregate reaction swelling mechanism-part i: A constitutive model. *ACI Materials Journal*, 105(3):227–235, 2008a.
- Grimal E., Sellier A., Pape Y.L., y Bourdarot E. Creep, shrinkage, and anisotropic damage in alkali-aggregate reaction swelling mechanism–part ii: Identification of model parameters and application. *ACI Materials Journal*, 105(3):236–242, 2008b.
- Haha M.B., Gallucci E., Guidoum A., y Scrivener K. Relation of expansion due to alkali silica reaction to the degree of reaction measured by sem image analysis. *Cement and Concrete Research*, 37(8):1206–1214, 2007.

- Huang M. y Pietruszczak S. Modeling of thermomechanical effects of alkali-silica reaction. *Journal of Engineering Mechanics*, 125(4):476–485, 1999.
- Larive C. Apports combinés de l'expérimentation et de la modélisation à la compréhension de l'alcali-réaction et de ses effets mécaniques. Theses, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 1997.
- Lorentz E. y Godard V. Gradient damage models: Toward full-scale computations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(21-22):1927–1944, 2011.
- Lubliner J., Oliver J., Oller S., y Oñate E. A plastic-damage model for concrete. *International Journal of Solids and Structures*, 25(3):299–326, 1989.
- Pesavento F., Gawin D., Wyrzykowski M., Schrefler B.A., y Simoni L. Modeling alkali–silica reaction in non-isothermal, partially saturated cement based materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 225-228:95–115, 2012.
- Pietruszczak S. On the mechanical behaviour of concrete subjected to alkali-aggregate reaction. *Computers and Structures*, 58(6):1093 1097, 1996.
- Saouma V. y Perotti L. Constitutive model for alkali-aggregate reactions. *ACI Materials Journal*, 103(3):194–202, 2006.
- Steffens A., Li K., y Coussy O. Aging approach to water effect on alkali–silica reaction degradation of structures. *J. Eng. Mech.*, 129(1):50–59, 2003.
- Ulm F.J., Coussy O., Kefei L., y Larive C. Thermo-chemo-mechanics of asr expansion in concrete structures. J. Eng. Mech., 126(3):233–242, 2000.