

UN MODELO TERMO-QUÍMICO-ELASTOPLÁSTICO PARA HORMIGÓN

Marcia Rizo Patrón

*Departamento de Estructuras, Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías
Universidad Nacional de Santiago del Estero, Av. Belgrano (S) 1912, 4200 Sgo. del Estero, Argentina*

Guillermo Etse

*Laboratorio de Estructuras, Universidad Nacional de Tucumán
Av. Roca 1800, C.C. 134, 4000 S. M. de Tucumán, Argentina
CONICET*

RESUMEN

En este trabajo se presenta una formulación constitutiva para simular el comportamiento de respuesta del hormigón en edades tempranas. Para ello se tiene en cuenta el acoplamiento termo-químico-mecánico que se desarrolla en el material como consecuencia de la reacción química por la hidratación con generación de calor durante el proceso elastoplástico. El modelo propuesto, formulado en el marco de referencia de la teoría del flujo de la plasticidad, incluye una formulación de ablandamiento-endurecimiento isótropa para reproducir el comportamiento del material en el régimen de pre y postpico. Para reproducir el campo de deformaciones que se desarrolla en edades tempranas del hormigón en forma realista, el modelo tiene en cuenta la dependencia de la resistencia a compresión y de otros parámetros materiales en el grado de hidratación.

Luego de una discusión de los algoritmos considerados para la implementación computacional se analiza la capacidad predictiva del modelo mediante ensayos computacionales en estados de deformación plana.

ABSTRACT

This paper presents a constitutive formulation to simulate the concrete behavior in early stages. To this end, the model considers the thermo-chemo-mechanical couplings that take place in concrete as a consequence of the chemical reaction due to the hydration with heat generation during elastoplastic process. The model proposed was formulated within the framework of the flow theory of plasticity and includes an isotropic hardening-softening formulation to reproduce the pre- and post-peak material behavior. To predict the deformation field that is developed in early age concrete, in a realistic way, the model takes into account the dependence of the compressive strength and the other material parameters on the hydration degree.

After a discussion of the algorithms considered to the computational implementation, the predictive capability of the model is analyzed by means of numerical simulations at finite element level in plane strains.

INTRODUCCIÓN

El cambio de las características microestructurales del hormigón durante las primeras edades es función del fenómeno de difusión del 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. El hormigón en estado fresco es un material altamente viscoso y prácticamente no tiene resistencia al corte. La formación de geles se manifiesta en un endurecimiento con ganancia de rigidez. Este trabajo está referido a la modelación de los acoplamientos termo-químico-elastoplástico del hormigón en edades tempranas con el objeto de predecir en forma realista los campos de deformaciones y de tensiones que se generan durante el fraguado del material.

Esto se realiza teniendo en cuenta la dependencia de la resistencia y la rigidez del material en el proceso químico-plástico acoplado que se formula en el marco de las teorías del flujo de la plasticidad y de la termodinámica de los medios porosos reactivos.

DESCRIPCIÓN DE UN MEDIO POROSO

De acuerdo a la teoría propuesta por Coussy^[1], un medio poroso saturado está compuesto por una matriz y un espacio saturado por un fluido. El *espacio poroso conectado* es el espacio a través del cual ocurren intercambios de fluidos. Dos puntos del fluido que satura este espacio pueden siempre ser unidos por una trayectoria que yace completamente dentro de este espacio; por lo tanto esta fase puede ser considerada continua. El espacio complementario restante es la *matriz*. Esta matriz puede estar compuesta por una parte sólida y un espacio ocluido desconectado, ya sea saturado o no. Se asume que no ocurre ninguna filtración a través de este *espacio poroso ocluido* (ver Coussy^[1]).

Consideramos el volumen elemental dV , que rodea a un punto geométrico, caracterizado por su vector de posición \mathbf{x} en el sistema de referencia adoptado. La matriz (parte sólida + porosidad ocluida) y el espacio poroso conectado del volumen elemental, forman la *partícula esqueleto*. El fluido que satura el espacio poroso conectado, junto con el espacio complementario restante, forman la *partícula fluida*. Ambas, la partícula esqueleto y la partícula fluida, coinciden en el mismo punto geométrico definido por el vector de posición \mathbf{x} .

Cuando el espacio poroso conectado está ocupado por varios fluidos en lugar de uno solo, se denomina *medio poroso parcialmente saturado*. Las fases fluidas saturantes del espacio poroso conectado se asume que son y se mantienen continuas. Para describir la deformación y la cinemática de un medio poroso parcialmente saturado, este último puede ser visto como la superposición de $n+1$ continuos, n de los cuales representan las n fases fluidas saturantes, y el restante representa el esqueleto.

MARCO TERMODINÁMICO

La termodinámica es el estudio de las transformaciones que afectan la energía de un sistema en evolución. La primera ley expresa la conservación de la energía en todas sus formas. La segunda ley, en cambio, expresa, a través de una desigualdad, que la calidad de la energía, es decir, su transformabilidad en trabajo mecánico eficiente, sólo puede deteriorarse. Todo modelo matemático que pretenda representar la evolución de un proceso termodinámicamente admisible debe respetar estos dos principios de la termodinámica.

En esta sección 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. Se supone que el sólido a estudiar es un medio poroso. Los poros se encuentran saturados por dos fases fluidas, la fase reactiva y la fase producto. Estas fases fluidas pueden reaccionar químicamente entre sí. Es decir que 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

Se considera una única fase reactante y una única fase producto de tal forma que ocurre una reacción química entre ellas cuando: $A \rightarrow B$, siendo A la fase reactante y B la fase producto (ver Prato^[3]). 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:

$$\frac{dm_A}{dt} = M_A^0 - m_{A\delta B}^0 \quad (1)$$

$$\frac{dm_B}{dt} = M_B^0 + m_{A\delta B}^0 \quad (2)$$

donde M_A^0 y M_B^0 : tasa de incremento externo de la masa de los fluidos A y B
 $m_{A\delta B}^0$: tasa de formación de la masa B debido a la reacción química
 m_A y m_B : masa reactiva (A) y masa reactante (B).

Si consideramos un sistema químico cerrado, es decir aquél donde no existe aporte exterior de masa, las ecuaciones anteriores quedan:

$$\frac{dm_A}{dt} = -m_{A\delta B}^0 \quad \frac{dm_B}{dt} = m_{A\delta B}^0 \quad (3)$$

Si se aplican estas ecuaciones al caso particular del hormigón, la reacción química corresponde al proceso de hidratación del cemento, cuya fase A es el agua libre y la B es el agua combinada con el cemento, formando los hidratos.

Amplitud de hidratación. Ley de evolución.

Se define la tasa de reacción química v^0 como:

$$v^0 = \frac{m_{A\delta B}^0}{k} \quad (4)$$

siendo k una constante que relaciona la tasa de formación de masa con la tasa de reacción química. Tiene en cuenta la estequiometría y las masas molares de las sustancias que constituyen las fases reactante y producto.

De acuerdo a (3), la tasa de formación de masa ($m_{A\delta B}^0$) es una derivada temporal, así como también lo es la tasa de reacción ξ^0 . De esta manera, se puede escribir:

$$m_{A\delta B}^0 = -\dot{m}_A = \dot{m}_B = k\dot{v} \quad (5)$$

La variable ξ , denominada amplitud de hidratación, puede considerarse como una variable interna ya que su evolución es espontánea y no depende del flujo externo. La misma da una medida del progreso de la reacción considerada. Para definir su ley de evolución se adopta una expresión del tipo de Arrhenius (ver Prato^[3]) de la forma:

$$\dot{v} = \frac{1}{\gamma} \eta A_m \text{TM} e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (6)$$

donde η es un parámetro del material, E_a es la energía de hidratación, R la constante universal de los gases y A_m es la afinidad química.

La segunda ley y las ecuaciones de estado

En el caso de un sistema cerrado, el aporte de entropía se debe sólo al intercambio de calor con el exterior $Q^0 dt$, por lo tanto en torno a la temperatura de referencia T_0 se cumple^[7]

$$\frac{dS}{dt} \mu \frac{Q^0}{T_0} \quad (7)$$

Esta desigualdad se debe a la producción de entropía interna asociada con el fenómeno disipativo. El balance de entropía es, en consecuencia:

$$T_0 \frac{dS}{dt} = Q^0 + \omega \quad (8)$$

donde ω es la disipación. Considerando el hormigón en edades tempranas, esta disipación puede ser primariamente atribuida a las evoluciones irreversibles del esqueleto y a la acción de la reacción de hidratación. Esta última se expresa

$$\omega_{esq} = (g^l - G) \frac{dm}{dt} \mu 0 \quad (9)$$

con g^l : entalpía de masa libre (o potencial químico) del agua libre;

G : potencial químico del agua combinada en la fase sólida.

La diferencia de potenciales $g^l - G$ expresa, entonces, el desbalance termodinámico entre el agua libre y el agua combinada en la fase sólida y es la fuerza de conducción del proceso de microdifusión que gobierna la reacción de hidratación. La ec. (9) puede ser escrita alternativamente como

$$\omega_{esq} = A_m \frac{dm}{dt} \mu 0 \quad (10)$$

Desde el punto de vista de la termodinámica estándar la expresión previa de la disipación de la reacción de hidratación, conduce a identificar formalmente a la afinidad A_m como la fuerza termodinámica asociada con la tasa de solidificación del esqueleto \dot{m} . Considerando la expresión de disipación del sistema cerrado que incluye, tanto la disipación debida a la evolución permanente del esqueleto como la asociada con la reacción de hidratación (ec.10), la disipación resulta

$$\omega = \rho : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - S\dot{T} - \dot{\Psi} \mu 0 \quad (11)$$

con ρ : energía libre de Helmholtz. Esta define el estado termodinámico en función de las variables de estado.

Se puede expresar de la forma

$$\Psi = \Psi(T, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon}_p, \boldsymbol{\xi}, m) \quad (12)$$

donde $\boldsymbol{\chi}$ es un vector de variables internas relacionadas con el comportamiento irreversible del material.

Usando la (12) en la (11) se obtiene (ver Ulm^[7])

$$\omega = \left(\rho - \frac{\Psi}{\epsilon} \right) : \dot{\epsilon} - \left(S + \frac{\Psi}{T} \right) \dot{T} + \rho : \dot{\epsilon}_p + \phi \dot{\xi} + A_m \dot{m} \mu \leq 0 \quad (13)$$

Los primeros cuatro términos de la desigualdad anterior son los de un sólido elastoplástico común, para el cual las ecuaciones de estado son

$$\rho = \frac{\Psi}{\epsilon} = - \frac{\Psi}{\epsilon_p} \quad (14)$$

$$S = - \frac{\Psi}{T} \quad (15)$$

$$\phi = - \frac{\Psi}{\xi} \quad (16)$$

con ξ : fuerza de endurecimiento. El último término de la (13) surge de la (10) e implica que

$$A_m = - \frac{\Psi}{m} = - \frac{\Psi}{v} \quad (17)$$

Es decir, establece que el desbalance entre el agua libre y el agua combinada en la fase sólida proviene, en el caso de un sistema cerrado, de la energía libre Ψ .

ANÁLISIS TERMOQUÍMICO

Grado de hidratación

Se define el grado de hidratación como

$$r(t) = \frac{v(t)}{v_{\infty}} \quad (18)$$

donde $v(t)$: amplitud de hidratación en un tiempo t ;

v_{∞} : valor de la amplitud de hidratación, en condiciones ideales, para $t = \infty$.

El grado de hidratación varía, en consecuencia, entre 0 y 1.

Energía libre

Ulm^[9] propone la siguiente expresión para la energía libre de Helmholtz correspondiente a un material isótropo elástico que envejece

$$\Psi = \frac{9}{2} K(v) \epsilon^2 + G(v) e : e - 9K(v) \epsilon (\alpha(T - T_0) + \beta v) + \frac{q(v)}{T_0} (T - T_0) - \frac{1}{2} \frac{C}{T_0} (T - T_0)^2 + \Psi^N(v) \quad (19)$$

con α : coeficiente de dilatación térmica;

β : coeficiente de dilatación química capilar;
 $\varepsilon = tr(\mathbf{\epsilon})$: deformación volumétrica;
 e : tensor de deformaciones de corte;
 $q(\xi)$: calor latente de hidratación;
 $C = \theta c$: capacidad calórica por unidad de volumen;
 $K(\xi)$: módulo de deformación volumétrico;
 $G(\xi)$: módulo de deformación transversal;
 T_0 : temperatura de referencia;
 $\Psi^N(v)$: energía libre de Helmholtz asociada con la reacción de hidratación.

Para $\hat{\Psi}(\xi)$ usamos la expresión propuesta por Prato ^[3]

$$\hat{\Psi}(v) = \frac{1}{3} \Phi v^3 + \frac{1}{2} \left(\frac{A_{m0}}{v_{\equiv}} - \Phi v_{\equiv} \right) v^2 - A_{m0} v \quad (20)$$

con: A_{m0} : afinidad química inicial;

Φ : constante del material relacionada con la velocidad de hidratación.

De esta manera, la ec.(17) resulta

$$A_m = -\frac{\neq \Psi}{\neq v} = A_{m0} - \left(\frac{A_{m0}}{v_{\equiv}} - \Phi v_{\equiv} \right) v - \Phi v^2 - q_{,v} \frac{(T - T_0)}{T_0} + 9K(v)\beta\varepsilon \quad (21)$$

Esta ecuación indica que el desequilibrio termodinámico entre el agua libre y el agua combinada depende de la amplitud de hidratación y de las variaciones de temperatura y deformación.

Reemplazando la ec.(21) en la (6) y despreciando el término de acoplamiento mecánico ($9K(\xi)\beta\varepsilon$) se obtiene

$$\dot{v} = \frac{\Phi}{\gamma} \left\langle \left[\left(\frac{A_{m0}}{\Phi v_{\equiv}} \right) (v_{\equiv} - v) - \frac{q_{,v}}{\Phi} \frac{(T - T_0)}{T_0} \right] \right\rangle e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (22)$$

Si se escribe la ecuación anterior en términos del grado de hidratación definido en (18) se tiene ^[3]

$$\dot{r} = \bar{\Phi} \left\langle \left[\left(\bar{A} + r \right) (r_{\equiv} - r) - \bar{\alpha} \frac{(T - T_0)}{T_0} \right] \right\rangle e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (23)$$

Ecuación de equilibrio térmico

La ecuación de campo que expresa localmente el desbalance de energía en función de la entropía es

$$T_0 \dot{S} = (\hat{r} - \Xi \hat{q}) + \omega \quad (24)$$

donde el término entre paréntesis representa el aporte de calor debido a conducción ($\nabla \cdot \hat{q}$) y a fuentes térmicas por unidad de volumen \hat{r} y ω representa la disipación total.

Usando la ecuación (15), reteniendo sólo los términos de la derivada temporal de la entropía de primer orden, la ecuación (24) puede expresarse de la forma

$$T_0 \dot{S} = C\dot{T} + 9K\alpha T_0 \dot{\varepsilon} - \dot{q} = \hat{r} - = \Xi \hat{q} + \omega \quad (25)$$

Si se supone que el calor debido a la disipación y el calor debido a las deformaciones ($9K\alpha T_0 \dot{\varepsilon}$) son despreciables respecto al término que representa el calor latente de hidratación (\dot{q}), la ecuación anterior se reduce

$$C\dot{T} - \dot{q} = \hat{r} - = \Xi \hat{q} \quad (26)$$

La relación entre el flujo de calor y la temperatura está dada por la ley de Fourier

$$\hat{q} = -\hat{K} = T \quad (27)$$

donde \hat{K} es el tensor de conductividad térmica, que para el caso isótropo es : $\hat{K} = \hat{k} 1$.
Sustituyendo la (27) en la (26), la ecuación de campo térmico queda:

$$\theta c \dot{T} = \hat{r} + \otimes (\hat{K} \otimes T) + \dot{q} \quad (28)$$

Esta ecuación es la que gobierna el fenómeno de conducción del calor en régimen transitorio y en un medio continuo y homogéneo.

Teniendo en cuenta la definición de grado de hidratación, se puede escribir el último término de la ec. (28) como:

$$\dot{q} = q_{,r} \dot{r} \quad (29)$$

y finalmente, a la ecuación (28) adopta la forma

$$\theta c \dot{T} = \hat{r} + \otimes (\hat{K} \otimes T) + q_{,r} \dot{r} \quad (30)$$

Acoplamiento termo-químico

La solución del acoplamiento termo-químico consiste en la solución de la ecuación del equilibrio térmico, ec. (30), y simultáneamente la ecuación diferencial que representa a la evolución de la reacción de hidratación, ec. (23), ver Prato^[3].

Para resolver este sistema de ecuaciones diferenciales se utiliza en la presente implementación, el método de Euler implícito (*backward Euler*).

La evolución de los parámetros elásticos del material, en función del grado de hidratación, se obtienen usando el modelo de envejecimiento propuesto por Prato^[3].

COMPORTAMIENTO QUÍMICO-PLÁSTICO

En esta sección se describe el comportamiento químico plástico del hormigón. El estado termodinámico del medio poroso elastoplástico considerado está caracterizado por cuatro variables de estado, ε , ε_p , χ y r . El tensor de deformaciones observables, ε , se refiere al esqueleto (agregado, cemento no hidratado). ε_p y χ denotan el tensor de deformaciones plásticas y el vector de variables de endurecimiento/ablandamiento, respectivamente. Desde el punto de vista de la modelación macroposcópica, representan la deformación irreversible del esqueleto como consecuencia de la microfisuración. Finalmente, r representa el grado de hidratación. La modelación del proceso

químico plástico que se describe en esta sección se basa en la teoría propuesta originalmente por Ulm y Coussy^[7] para hormigones en edad temprana.

Criterio de Drucker-Prager y ley de endurecimiento/ablandamiento.

En el presente trabajo se adoptó un criterio plástico de superficie única definido por la función clásica de Drucker Prager que describe la máxima resistencia material en término del primer invariante del tensor de tensiones y del segundo invariante del desviador de tensiones. La función de carga para este criterio, considerando endurecimiento isótropo, es

$$\rho \chi C_E \omega F = \alpha I_1 + \sqrt{J_2} - k_0 + \alpha/3 \phi(|, r) \quad [\quad 0 \quad] \quad (31)$$

con $\phi(|, r)$: fuerza de endurecimiento.

La fuerza de endurecimiento puede ser desacoplada aditivamente en dos términos

$$\phi(|, r) = -r(k_{\infty} - k_0) - r \frac{\neq U_{\infty}(|)}{\neq |} \quad (32)$$

con k_{∞} : presión de cohesión en hidratación completa;

$U_{\infty}(|)$: energía congelada (*frozen energy*) para $t=\infty$.

El primer término de (32) representa el endurecimiento/ablandamiento plástico, mientras que el segundo representa el incremento de rigidez debido al endurecimiento químico, descrito en términos del grado de hidratación.

Se adopta : $| = \epsilon_p = tr \epsilon_p$ (33)

$$y \quad \frac{\neq U_{\infty}(|)}{\neq |} = \frac{\neq U_{\infty}(\epsilon_p)}{\neq \epsilon_p} = \Omega \epsilon_p \quad (34)$$

Reemplazando la (34) en la (32) se obtiene

$$\phi(|, r) = -r(k_{\infty} - k_0) - r \Omega \epsilon_p \quad (35)$$

donde Ω es una constante.

Para la regla de flujo plástico, se considera un potencial plástico no asociado que verifica

$$Q = \beta I_1 + \sqrt{J_2} - k_0 + \beta/3 \phi(|, r) \quad (36)$$

con β factor de dilatación, el cual se asume constante.

ANÁLISIS NUMÉRICO

El modelo constitutivo descrito en la sección anterior fue implementado numéricamente de acuerdo al método Closest Point Projection (full backward Euler) que garantiza el retorno a la superficie bajo condición de convexidad de la misma y que equivale al criterio de máxima disipación plástica. El proceso de integración numérica del modelo se combina con el proceso de evolución del grado de hidratación y de la temperatura del medio continuo, detallado anteriormente.

En la figura 1 se observa la predicción del modelo del ensayo de compresión directa en estado de deformaciones planas para distintas velocidades de carga (diferentes valores de Δu considerando incrementos Δt constantes). Se aprecia que con el aumento de la velocidad de carga, decrece la resistencia pico del material. Esto es debido a que la carga, en edades más tempranas del hormigón, activa un grado de hidratación menor por lo que la resistencia del material no alcanzó su máximo valor. Por otro lado observamos que a mayor velocidad de carga el proceso de endurecimiento-ablandamiento es más acentuado como consecuencia de la gran variabilidad que registra el grado de hidratación (r) conllevando a una ley de variación del endurecimiento-ablandamiento altamente no lineal (ver ecuación 35).

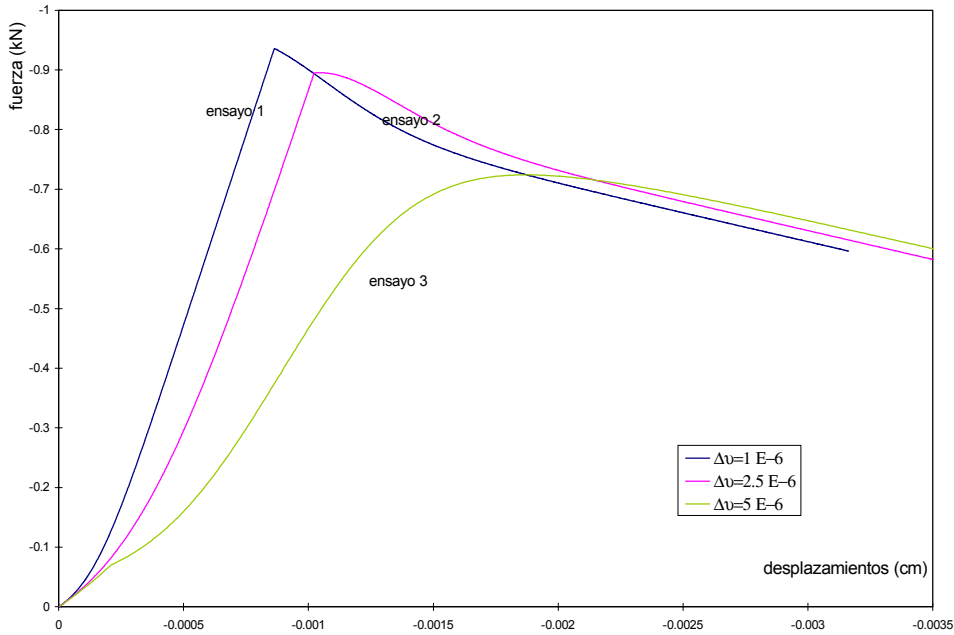


Figura 1: Relación fuerza-desplazamiento para ensayos de compresión uniaxial con distintas velocidades de carga

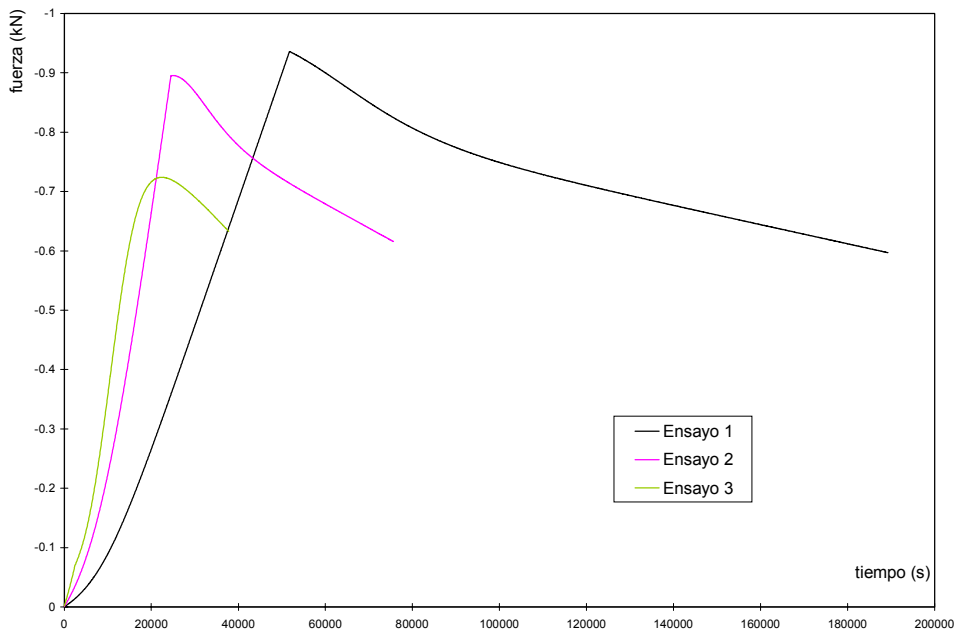


Figura 2 Relación fuerza-tiempo para ensayos de compresión uniaxial con distintas velocidades de carga

En la figura 2 observamos la variación de la fuerza con el tiempo. Claramente, en el ensayo 3 asociado con la mayor velocidad de carga, se completa la historia de deformación en el tiempo mínimo. Resulta entonces evidente que en el ensayo 3, el proceso químico tiene mayor influencia que en los restantes ensayos.

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se ha presentado un modelo constitutivo termo-químico-plástico para simular el comportamiento del hormigón en edad temprana. La formulación considerada se basa en la teoría originalmente propuesta por Ulm y Coussy^[7] la cual fue complementada con una ley de variación de rigidez, en términos del grado de hidratación y del proceso de endurecimiento/ablandamiento plástico.

En la implementación computacional se ha considerado la integración de las leyes de conservación de la energía propuesta por Prato^[3] para la evolución de la temperatura y del grado de hidratación. Dicha implementación se llevó a cabo con el método full backward Euler. Como criterio de máxima resistencia se adoptó la ecuación de Drucker Prager.

Los resultados incluidos en el trabajo demuestran la capacidad del modelo desarrollado para simular el proceso de endurecimiento del hormigón en edad temprana. Los mismos muestran la variación de rigidez en términos del grado de hidratación y del nivel de microfisuración del material, representada por las deformaciones plásticas.

En las investigaciones futuras se analizarán las variaciones de las condiciones de falla difusa y localizada durante el proceso de fraguado del hormigón.

REFERENCIAS

- [1] Coussy, O. , "Mechanics of porous continua". J. Wiley and Sons, Chichester, U.K. 1996.
- [2] Cervera M., Oliver J. y Prato T., "A thermo-chemo-mechanical model for concrete". Public. CIMNE N°146. Barcelona, España, 1998.
- [3] Prato T., Cervera M. y Oliver J., "Simulación numérica del proceso de hidratación del hormigón". Public. CIMNE N°114. Barcelona, España, 1997.
- [4] Prato T., Cervera M. y Oliver J., "Modelo termoquímico de hidratación del hormigón". Mecánica Computacional, Volumen XVIII. Bariloche, 1997.
- [5] Simo J. & Hughes T. J. R., "Elastoplasticity and viscoplasticity. Computational aspects" (monograph). Springer, Berlin, 1997.
- [6] Ulm, F.-J. & Coussy, O. , "Modelling of thermo-chemo-mechanical couplings of concrete at early ages". J. Engng. Mech. ASCE, 121. 1995.
- [7] Ulm, F.-J. & Coussy, O. , "Strength growth as chemo-plastic hardening in early age concrete". J. Engng. Mech. ASCE, 122. 1996.
- [8] Ulm, F.-J., Coussy, O. & Hellmich, C., "Chemoplasticity: a review of evidence".
- [9] Ulm, F.-J., Elouard A. & Rossi P., "Modelling of early age concrete cracking due to thermo-chemo-mechanical couplings". Fracture mechanics of concrete structures, Proceedings FRAMCOS-2, AEDIFICATIO Publishers, Freiburg, 1995.