

MODELO CONSTITUTIVO ACOPLADO PARA CONCRETO

RESUMO

Mostra-se neste trabalho uma visão geral da teoria do acoplamento termo-químico-mecânico para concreto. Este modelo teórico, desenvolvido por pesquisadores do LPCP (Paris), redonda em equações constitutivas acopladas que exibem os efeitos cruzados entre os fenômenos químicos, térmicos e mecânicos que ocorrem na maturação do concreto. A utilização deste modelo constitutivo permite uma previsão da evolução no tempo dos campos de temperatura, maturidade, resistência e rigidez.

ABSTRACT

This work shows an overall review of the thermo-chemo-mechanical coupling theory for concrete. This theoretical model, developed by researchers from LCPC (Paris), leads to coupled constitutive equations which contain the cross-effects between thermal, chemical and mechanical phenomena that occur during the concrete maturing process. Use of this constitutive model allows one to predict the evolution in time of temperature, maturity, strength and stiffness fields.

Iuri Alves Ferreira

*M.Sc. (COPPE), Prof. do
Centro de Ciências
Tecnológicas, UNIFOR.*

Eduardo M. R. Fairbairn

*Dr. Ing., COPPE/UFRJ,
Programa de Eng. Civil.*

1. INTRODUÇÃO

A predição da fissuração do concreto tem sido um dos problemas mais estudados em engenharia estrutural. É sabido que deformações de origem térmica, tanto quanto de retração autógena, quando restritas, podem levar à fissuração, especialmente nas idades jovens do concreto. Para estruturas de

concreto massa, como barragens, sérios danos podem ocorrer.

A modelagem da fissuração do concreto jovem envolve a consideração da reação de hidratação. Tem sido mostrado que a resistência à compressão aumenta proporcionalmente ao montante de produtos da hidratação (MINDESS et al., 1978,

BYFORS, 1980, TORRENTI, 1992, BOUMIZ et al., 1996).

Por outro lado a rigidez observável também aumenta, o que causa maiores tensões para o mesmo nível de deformações. A reação de hidratação é exotérmica e termicamente ativada. O calor latente de hidratação induz deformações térmicas. O desbalanceamento de volume entre reagentes e produtos, tanto quanto efeitos capilares, causam retração (ACKER, 1995).

Essas deformações, se restritas, correspondem a tensões, as quais juntamente com as tensões devidas às forças externas são geralmente superiores à resistência já desenvolvida para uma idade dada do material, resultando em fissuração.

Todos os fenômenos supracitados são acoplados - geração de calor, ativação térmica, retração, aumento da resistência e da rigidez. Para reproduzir o comportamento intrínseco do material ULM e COUSSY estabeleceram um quadro teórico que é baseado na mecânica de meios porosos reativos (COUSSY, 1995). Este quadro teórico fornece a base para análise do comportamento estrutural do concreto que captura, nas equações analíticas que definem o problema, os acoplamentos intrínsecos traduzidos como efeitos cruzados termo-químicos, elasto-químicos e plasto-químicos.

2. MODELO TEÓRICO

O quadro teórico que se segue é uma breve revisão dos desenvolvimentos apresentados por ULM e COUSSY (1995, 1996), no qual o concreto é modelado como um meio poroso reativo.

A fase fluida que preenche os poros é constituída de água livre, e o esqueleto, ou fase sólida, de cimento não hidratado, hidratos e agregados. À medida que a água reage com o cimento anidro, a massa de água livre reduz-se e a massa do esqueleto (hidratos) aumenta na mesma medida.

Desta forma a resistência e a rigidez observáveis, i.e. da estrutura como um todo, aumentam proporcionalmente ao montante de produtos da hidratação. Entretanto, as propriedades intrínsecas da matéria que compõe o esqueleto não mudam.

2.1. Quadro Teórico Termodinâmico

Considerando um sistema, a segunda lei da termodinâmica pode ser expressa por:

$$\frac{dS}{dt} \geq \frac{Q}{T} \quad (1)$$

Onde S é a entropia, t é tempo, Q é o calor trocado com o exterior e T é a temperatura do sistema.

Considerando a taxa de dissipação de energia intrínseca (ϕ), podemos reescrever a desigualdade acima como:

$$T \frac{dS}{dt} = Q + \phi, \quad (2)$$

Onde $\phi \geq 0$ sempre.

2.2. Expressão para a Dissipação no Sistema Fechado

Como pode ser visto em LEMAITRE e CHABOCHE (1988), a forma padrão da dissipação pode ser colocada como:

$$\phi = \sigma : \dot{\epsilon} - S \dot{T} - \dot{\psi} \geq 0. \quad (3)$$

onde ψ é a energia livre (Helmholtz) unitária, σ é o tensor das tensões e ϵ o tensor de deformações. Esta energia é função do estado do sistema, i.e. do valor das variáveis internas.

A escolha de $\psi = \psi(\epsilon, \epsilon^p, T, m, \chi)$ levará a uma formulação apropriada das equações constitutivas, onde ϵ é o tensor de deformações, ϵ^p é o tensor de deformações plásticas irreversíveis, T é a temperatura absoluta, m é a massa do esqueleto por unidade de volume, e χ é um conjunto de variáveis plásticas internas. Este conjunto de variáveis corresponde aos fenômenos físicos e químicos envolvidos no problema.

Derivando ψ em relação ao tempo chegamos a:

$$\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon} : \dot{\epsilon} + \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon^p} : \dot{\epsilon}^p + \frac{\partial \psi}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial \psi}{\partial m} \dot{m} + \frac{\partial \psi}{\partial \chi} \cdot \dot{\chi}, \quad (4)$$

e substituindo (4) em (3), temos:

$$\phi = \left(\sigma - \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon} \right) : \dot{\epsilon} - \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon^p} : \dot{\epsilon}^p - \left(S + \frac{\partial \psi}{\partial T} \right) \dot{T} + \frac{\partial \psi}{\partial m} \dot{m} + \frac{\partial \psi}{\partial \chi} \cdot \dot{\chi}, \quad (5)$$

2.3. Equações de Estado

De (5), as equações de estado podem ser colocadas como:

$$\sigma = \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon} = - \frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon^p} \quad S = - \frac{\partial \psi}{\partial T}$$

$$A = - \frac{\partial \psi}{\partial m} \quad \zeta = - \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (6)$$

Um desenvolvimento mais detalhado pode ser visto em FERREIRA (1998). Em (6), A é a afinidade química da reação de hidratação. A variável ζ é a força de *hardening*.

Usando as equações de estado, a equação (5) toma a forma:

$$\varphi = \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varepsilon^p} : \dot{\varepsilon}^p + \frac{\partial \psi}{\partial x} \cdot \dot{x} \right) \frac{\partial \psi}{\partial m} \dot{m} = \varphi^p + \varphi^c, \quad (7)$$

Onde φ^p é a dissipação plástica e φ^c é a dissipação química.

Usando as simetrias de Maxwell e reescrevendo as equações de estado em uma forma diferencial temos:

$$d\sigma = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varepsilon^2} : (d\varepsilon - d\varepsilon^p) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varepsilon \partial T} dT + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varepsilon \partial m} dm \quad (8)$$

$$dS = - \frac{\partial^2 \psi}{\partial T^2} dT - \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial \varepsilon} : (d\varepsilon - d\varepsilon^p) - \frac{\partial^2 \psi}{\partial T \partial m} dm \quad (9)$$

$$d\zeta = - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} dx - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial m} dm \quad (10)$$

$$dA = - \frac{\partial^2 \psi}{\partial m \partial \varepsilon} : (d\varepsilon - d\varepsilon^p) - \frac{\partial^2 \psi}{\partial m \partial T} dT - \frac{\partial^2 \psi}{\partial m \partial x} dx - \frac{\partial^2 \psi}{\partial m^2} dm \quad (11)$$

2.4. Acoplamento Químico-Mecânico.

Invertendo (8), obtemos a equação constitutiva (mecânica) acoplada (à química) do material:

$$d\varepsilon = C^{-1} : d\sigma + d\varepsilon^p + a dT + b dm, \quad (12)$$

onde:

$$C = \partial^2 \Psi / \partial (\varepsilon - \varepsilon^p)^2$$

$$a = -C^{-1} : (\partial^2 \Psi / \partial \varepsilon \partial T)$$

$$b = -C^{-1} : (\partial^2 \Psi / \partial \varepsilon \partial m).$$

desta forma o tensor elástico C é função de m, assim como os tensores de coeficientes de dilatação térmica a e química b, já que ψ o é.

2.5. Acoplamentos Termo-Químicos

Usando (9) em (2) obtemos:

$$C_\varepsilon T - TA : (d\varepsilon - d\varepsilon^p) - L_m \dot{m} = Q + \varphi, \quad (13)$$

onde:

$$C_\varepsilon = -T (\partial^2 \Psi / \partial T^2)$$

$$A = \partial^2 \Psi / \partial T, \varepsilon$$

$$L_m = T (\partial^2 \Psi / \partial T \partial m)$$

Considerando as hipóteses de desacoplamento parcial (FERREIRA, 1998), a forma padrão da equação do calor pode ser restituída:

$$C_\varepsilon T = \dot{Q} + L_m \dot{m}, \quad (14)$$

onde C_ε é a capacidade térmica, Q o calor trocado e L_m é o calor latente de hidratação.

2.6. Acoplamentos Plasto-Químicos

O estado de tensões admissível é dado pelo critério de escoamento:

$$F(\sigma, \zeta) = f(\sigma) - K(\zeta) \leq 0. \quad (15)$$

Se a fissuração e o esmagamento do concreto jovem devem ser modelados então ζ deve ser uma função de χ e também de m.

A equação (10) pode ser reescrita como:

$$d\zeta = - \frac{\partial^2 U(x, m)}{\partial x^2} dx - \frac{\partial^2 U(x, m)}{\partial x \partial m} dm \quad (16)$$

A energia U é a "energia congelada" (ver ULM e COUSSY, 1996). Tomando como primeira aproximação para U a expressão:

$$U(x, m) = - \zeta_\infty m x + m U_\infty(x), \quad (17)$$

temos:

$$\zeta = m x_\infty - m \frac{\partial U_\infty(x)}{\partial x} \quad (18)$$

Na equação (18), U_∞ pode ser visto como o potencial plástico (SIMO e HUGHES, 1998). A lei de fluxo (19) e a lei de *hardening* (20) não são alteradas pelo acoplamento:

$$d\varepsilon^p = d\lambda \dot{\sigma} g(\sigma, \zeta) \quad (19)$$

$$d\chi = d\lambda \dot{\sigma} h(\sigma, \zeta), \quad (20)$$

onde $g(\sigma, \zeta)$ e $h(\sigma, \zeta)$ são respectivamente o potencial plástico e o potencial de *hardening* (ULM e COUSSY, 1996). O acoplamento das variáveis plásticas com a química se dá por ζ ser função de m , além de χ .

3. A REAÇÃO DE HIDRATAÇÃO

A conservação da massa no sistema fechado pode ser equacionada como:

$$\frac{dm_l}{dt} = - \frac{dm_s}{dt}, \quad (21)$$

onde m_l é a massa de água livre e m_s é a massa do esqueleto. O esquema abaixo mostra, resumidamente, o complexo conjunto de reações que intervêm no fenômeno:

água livre + cimento anidro → hidratos.
(fase fluida) (esqueleto ou fase sólida)

A massa de esqueleto sendo substituída pela massa de água combinada no esqueleto permite colocar a equação química:

massa de água livre (m_l)
massa combinada no esqueleto (m).

Da físico-química:

$$\varphi^c = -(g_l m_l + g_s m) = (g_l - g_s) m \geq 0 \quad (22)$$

Aqui, os termos $g_l > 0$ e $g_s > 0$ são as entalpias, i.e. os potenciais químicos da água livre e da água combinada no esqueleto respectivamente.

O termo entre parênteses é a própria afinidade química. A equação (22) pode ser igualmente escrita como:

$$\varphi^c = A m, \quad (23)$$

o que corrobora (6) e (7).

3.1. A Cinética da Hidratação

O processo dominante que rege a cinética da hidratação do concreto em seu

processo de envelhecimento pode ser explicado através de células de cimento anidro circundadas por camadas de hidratos. Estas células são conectadas entre si formando o esqueleto, e o espaço entre elas é preenchido com água (Figura 1). A água deve penetrar na célula através das camadas de hidrato para combinar-se à matéria no centro da mesma formando novos hidratos. A formação dos hidratos é considerada instantânea em relação à escala de tempo da difusão de água através das camadas de hidratos.

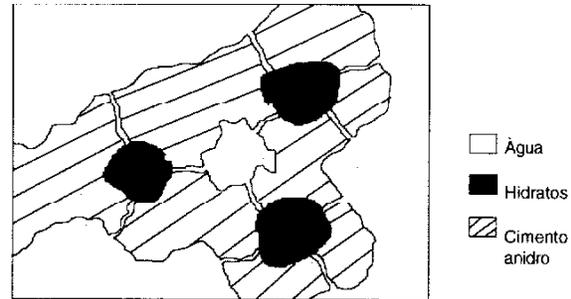


Figura 1: Cinética da hidratação - processo de micro-difusão

O processo de hidratação, i.e. fluxo de água através dos hidratos mais a reação, pode ser modelada com uma lei do tipo Arrhenius (ver FERREIRA, 1998):

$$\frac{dm}{dt} = \frac{1}{\eta} A \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right), \quad (24)$$

onde m é a massa de esqueleto já formado, η é a viscosidade, A é a afinidade química, E_a é a energia de ativação da reação, R é a constante universal dos gases e T é a temperatura absoluta. Leis de evolução do tipo mostrado são universalmente utilizadas na química de pastas de cimento, correspondendo a boas correlações com dados experimentais (ACKER 1988, EMBORG 1989).

3.2. A Afinidade Normalizada

O grau de hidratação é uma normalização da variável m , definido como:

$$\xi = \frac{m(t)}{m_\infty}, \text{ onde } 0 \leq \xi \leq 1 \quad (25)$$

onde m_∞ é o valor alcançado por m quando da hidratação completa. Fazendo a

mudança da variável m para ξ , a relação cinética (24) pode ser reescrita de forma a obtermos a expressão da afinidade normalizada:

$$\tilde{A}(\xi) = \frac{d\xi}{dt} \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right), \quad (26)$$

sendo $\tilde{A}(\xi) = A(m(\xi)) / (m_{\infty} \cdot \eta(m(x)))$. A função $\tilde{A}(\xi)$ pode ser obtida experimentalmente, seja através de ensaios adiabáticos, seja através de ensaios de compressão uniaxial realizados em diversas idades. Maiores detalhes podem ser vistos em FERREIRA (1998) e ULM e COUSSY (1996).

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O formalismo teórico mostrado assegura a coerência do modelo constitutivo acoplado a ser utilizado para modelar o concreto em seu processo de maturação, onde estão evoluindo em conjunto a reação química de hidratação e seus efeitos térmicos e mecânicos. O produto final dos desenvolvimentos arrolados neste trabalho são as seguintes equações constitutivas acopladas:

$C_p T = Q + L\xi$	(a)
$\tilde{A}(\xi) = \xi \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right)$	(b)
$d\varepsilon = C^{-1} : d\sigma + d\varepsilon^p + \alpha dT + b dm$	(c)
$F(\sigma, \zeta) = f(\sigma) - K(\zeta) \leq 0$	(d)
$d\varepsilon^p = d\lambda \cdot \sigma g(\sigma, \zeta)$	(e)
$d\chi = d\lambda \cdot \sigma h(\sigma, \zeta)$	(f)
$\zeta = \zeta(\xi, \chi)$	(g)

As duas primeiras equações compreendem os fenômenos térmicos e químicos envolvidos, i.e. o cálculo das temperaturas (T) e do grau de hidratação (ξ) independe das equações restantes, pois embora em algumas delas apareçam termos que dependam de ξ e T a recíproca não é verdadeira, i.e. ξ e T não dependem destes termos (exemplo: $C(\xi)$, $b(\xi)$, $\zeta(\xi, \chi)$, αdT).

Consideremos uma discretização no tempo, i.e. calcular os campos de temperatura (T), grau de hidratação (ξ), tensões (σ),

deformações (ε) e variáveis plásticas (χ) em determinados instantes de tempo t_n , integrando as equações constitutivas nos intervalos entre estes instantes.

Então, devido às relações de dependência entre as variáveis descritas acima, para cada intervalo de tempo, devemos calcular primeiramente ξ e T , resolvendo (a) e (b), e então, usando ξ e T , calcular ε , σ e χ para o dado intervalo, resolvendo (c-g).

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ACKER, PAUL, 1988, **Mechanical behavior of concrete: a physico-chemical approach**. Technical Report LCPC 152, Laboratoire des Ponts et Chaussées, Paris.
- ACKER, PAUL, 1995, "the shrinkages of concrete". Contribution to RILEM – Technical Committee GMC first meeting, pp. 1-12, Paris, Abril.
- BOUMIZ, A., VERNET, C., TENOUDI, F. C., 1996, "Mechanical properties of cement pastes and mortars at early age", **Advanced Cement Based Materials**, v. 3, pp. 94-106.
- BYFORS, J., 1980, **Plain concrete at early ages**. Technical Report, Swedish Cement and Concrete Research Institute, S-100 44 Stockholm 70.
- COUSSY, OLIVIER, 1995, **Mechanics of Porous Continua**, Chichester, John Wiley & Sons.
- EMBORG, M., 1989, **Thermal stresses in concrete structures at early ages**. Dr. Thesis, Lulea University of Technology, Div. of Structural Engineering.
- FERREIRA, I. A., 1998, **Numerical Modeling of Thermo-Chemo-Mechanical Couplings in Early Age Concrete**, Research Report, projeto CAPES/COFECUB – COPPE/ UFRJ, Rio de Janeiro, março.
- LEMAITRE, J., CHABOCHE, J.-L., 1988, **Mécanique des Matériaux Solides**, 2 ed., Paris, Dunod.
- MINDESS, S., YOUNG, J., LAWRENCE, F.-J., 1978, "Creep and drying shrinkage of calcium silicate pastes. I: specimen preparation and

- mechanical properties”, **Cement and Concrete Research**, v. 8, pp. 591-600.
- SIMO, J. C., HUGHES, T. J. R., 1998, **Computational Inelasticity**. U.S.A., Springer-Verlag, in press.
- TORRENTI, J. M., 1992, **La résistance du béton au très jeune âge**, In: Bulletin Liaison, LPC 179, pp. 31-41.
- ULM, F.-J., COUSSY, O., 1995, “Modeling of thermochemomechanical couplings of concrete at early ages”, **Journal of Engineering Mechanics (ASCE)**, v. 121, n. 7 (Jul), pp. 785-794.
- ULM, F.-J., COUSSY, O., 1996, “Strength Growth as Chemo-Plastic Hardening in Early Age Concrete”, **Journal of Engineering Mechanics (ASCE)**, v. 122, n. 12 (Dec.), pp. 1123-1132.