<u>Obtención del calor de hidratación a introducir en Abaqus</u>

Para el cemento que estamos usando (Portland II), tenemos los siguientes porcentajes en peso de los distintos componentes que lo forman:

$pC3S := 0.51 \qquad pC2S := 0.24 \qquad pC3A := 0.053 \qquad pC4AF := 0.166$

$pFreeCaO := 0.004 \qquad pSO3 := 0.025 \qquad pMgO := 0.009$

Cada uno de los constituyentes del cemento tiene un calor de hidratación determinado y el **calor de hidratación total del cemento** cuando se completa la hidratación se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$H_{cem} := 500 \frac{J}{gm} \cdot pC3S + 260 \frac{J}{gm} \cdot pC2S + 866 \frac{J}{gm} \cdot pC3A + 420 \frac{J}{gm} \cdot pC4AF \ldots \\ + 1186 \frac{J}{gm} \cdot pFreeCaO + 624 \frac{J}{gm} \cdot pSO3 + 850 \frac{J}{gm} \cdot pMgO$$

Por lo que obtenemos un calor de hidratación total de cemento de:

$$H_{cem} = 4.61 \times 10^5 \frac{m^2}{s^2}$$

Debido a que en nuestro caso no se añaden aditivos de cenizas volantes ni escoria de alto horno, éste mismo es el calor de hidratación de todos los materiales que forman el cemento al 100% de la hidratación (H_u)

Teniendo en cuenta que el contenido de cemento del hormigón (C_c), es decir, la cantidad de cemento por metro cúbico de hormigón es de 325 Kg/m^3, el **calor total último de hidratación** (H_T) en J/m^3 se calcula con la siguiente expresión:

$$H_T := H_u \cdot C_c$$

Por lo que nos queda un **calor total último de hidratación** de:

$$H_T = 1.498 \times 10^8 \, Pa$$

El siguiente paso es la determinación del **grado de hidratación (α).** El grado de hidratación es la medida del alcance de las reacciones entre el cemento y el agua, y se define como el cociente entre la cantidad de cemento hidratado y la cantidad inicial de cemento. El grado de hidratación es función del tiempo y varía entre el 0%, al principio de la hidratación, y el 100%, cuando la hidratación se completa.

El desarrollo del proceso de hidratación se puede obtener con la siguiente ecuación exponencial:

$$\alpha(t_e) := \alpha_u \cdot \exp\left[-\left(\frac{\tau}{t_e}\right)^{\beta}\right]$$

donde:

$\alpha(t_e)$ grado de hidratación a la edad equivalente, **t_e**

τ constante de tiempo de la hidratación

β constante de forma de la hidratación

α_u grado último de la hidratación

Vamos a utilizar la siguiente función para obtener la edad equivalente, la cual desarrollaron Freiesleben Hansen y Pederser. Dicha función convierte la **edad cronológica de curado (t)** de un hormigón curado a cualquier **temperatura (T_c)** en una **edad equivalente de curado (t_e)**, para un espécimen curado a una determinada **temperatura de referencia (T_r).**

$$te_{t-1} := \sum_{i=1}^{t} \left[\exp\left[\frac{E}{RC} \cdot \left(\frac{1}{T_r} - \frac{1}{T_c}\right)\right] \cdot \Delta t\right]$$

donde:

Δt intervalo cronológico de tiempo (horas)

T_c temperatura media del hormigón durante el intervalo de tiempo, Δt, (ºC)

E energía de activación (J/mol)

R constante universal de los gases (8.3144 J/mol/K)

La energía de activación (E) define la sensibilidad a la temperatura de una mezcla de hormigón. Usando el enfoque de la edad equivalente de madurez, la velocidad de hidratación a una temperatura determinada se puede determinar de una velocidad de hidratación conocida a la temperatura de referencia. Schindler desarrolló el modelo de la energía de activación (E) que se muestra en la siguiente ecuación, la cual es independiente de la temperatura de curado. Esta ecuación está en acuerdo con la teoría de Arrhenius para la velocidad en los procesos de reacciones químicas.

$$E := 22100 \cdot \frac{J \cdot kg^{0.35}}{mol \cdot m^{0.7}} \cdot f_E \cdot pC3A^{0.3} \cdot pC4AF^{0.25} \cdot Blaine^{0.35} = 4.352 \times 10^4 \frac{m^2 \cdot kg}{mol \cdot s^2}$$

donde:

$\mathbf{p_{C4AF}}$ porcentaje en peso de C_4AF en términos del contenido total de cemento

Blaine constante de Blaine, área de superficie específica del cemento (m^2/kg)

$\mathbf{f_E}$ factor de modificación de la energía de activación

El **factor de modificación de la energía de activación,** teniendo en cuenta que no tenemos ni cenizas ni escoria de alto horno, tiene un valor de 1:

$$f_E = 1$$

Para el cemento Portland II el valor de la constante de Blaine tiene un valor de 310 m^2/kg , por lo que la energía de activación nos queda:

$$E = 4.352 \times 10^4 \frac{m^2 \cdot kg}{mol \cdot s^2}$$

Por lo que ya estamos en condiciones de calcular la **edad equivalente de curado**, teniendo en cuenta que la temperatura de referencia es de 0ºC y la temperatura media del hormigón durante el intervalo de tiempo Δt es de 22ºC. Si tomamos intervalor de 1 hora:

te =

	0
0	$1.504 \cdot 10^4$
1	$3.008 \cdot 10^4$
2	$4.512 \cdot 10^4$
3	$6.016 \cdot 10^4$
4	$7.52 \cdot 10^4$
5	$9.024 \cdot 10^4$
6	$1.053 \cdot 10^5$
7	$1.203 \cdot 10^5$
8	$1.354 \cdot 10^5$
9	$1.504 \cdot 10^5$
10	$1.654 \cdot 10^5$
11	$1.805 \cdot 10^5$
12	$1.955 \cdot 10^5$
13	$2.106 \cdot 10^5$
14	$2.256 \cdot 10^5$
15	...

s

Nuestro hormigón tiene una **relación agua-cemento** de 0.431

Para el cálculo de la **constante de tiempo**, la **constante de forma** y el **grado último de hidratación** hacemos uso de las siguientes ecuaciones:

$$\tau := 66.78 \cdot hr \cdot \frac{m^{1.608}}{kg^{0.804}} \cdot pC3A^{-0.154} \cdot pC3S^{-0.401} \cdot Blaine^{-0.804} \cdot pSO3^{-0.758}$$

$$\beta := 181.4 \cdot \frac{m^{1.07}}{kg^{0.535}} \cdot pC3A^{0.146} \cdot pC3S^{0.227} \cdot Blaine^{-0.535} \cdot pSO3^{0.558}$$

$$\alpha_u := \frac{1.031 \cdot wc}{0.194 + wc}$$

Obteniendo los siguientes valores:

$$\tau = 8.053 \times 10^{4}\,\mathrm{s}$$

$$\beta = 0.601$$

$$\alpha_u = 0.711$$

Por lo que ya estamos en condiciones de calcular el **grado de hidratación (α)**:

$\alpha(te) =$

	0
0	0.046
1	0.117
2	0.172
3	0.216
4	0.251
5	0.279
6	0.303
7	0.324
8	0.342
9	0.358
10	0.372
11	0.384
12	0.395
13	0.406
14	0.415
15	...

Por último, la **tasa de generación de calor**, $\mathbf{Q_H}$, depende del grado de hidratación. El **g**rado de hidratación es función del tiempo y de la historia de la temperatura, la cual puede ser caracterizada por la función de la edad equivalente de maduración. Con este enfoque, el ascenso adiabático de temperatura del espécimen de hormigón puede ser evaluado en tiempos discretos. Usando el método de la edad equivalente de maduración y la formulación exponencial para cuantificar el grado de hidratación, la tasa de generación de calor, que es en definitiva el flujo de calor objetivo del presente estudio, puede ser determinada por la ecuación:

$$Q_H := H_u \cdot C_c \cdot \overrightarrow{\left[\left(\frac{\tau}{te}\right)^{\beta} \cdot \left(\frac{\beta}{te}\right) \cdot \alpha(te)\right]} \cdot \exp\left[\frac{E}{RC} \cdot \left(\frac{1}{T_r} - \frac{1}{T_c}\right)\right]$$

Como conocemos todos los términos de la ecuación ya estamos en condiciones de calcular la evolución del calor de hidratación que se genera en el hormigón que estamos estudiando, obteniendo el siguiente resultado:

$Q_H =$

	0
0	$3.142 \cdot 10^3$
1	$2.638 \cdot 10^3$
2	$2.038 \cdot 10^3$
3	$1.61 \cdot 10^3$
4	$1.308 \cdot 10^3$
5	$1.088 \cdot 10^3$
6	923.648
7	796.457
8	695.943
9	614.907
10	548.453
11	493.157
12	446.56
13	406.858
14	372.702
15	...

$\frac{kg}{m \cdot s^3}$

$H_u := H_{cem}$ (ya que no hay añadidos de cenizas volantes ni escoria de alto horno)

$C_c := 325000 \frac{gm}{m^3}$

Constante universal de los gases: $RC := 8.3144 \cdot \frac{J}{mol \cdot K}$

Factor de modificación de la energía de activación: $f_E := 1$ (ya que no hay ni cenizas volantes ni escoria de alto horno)

Superficie específica de cemento: $Blaine := 310 \frac{m^2}{kg}$

Energía de activación: $E := 22100 \cdot \frac{J \cdot kg^{0.35}}{mol \cdot m^{0.7}} \cdot f_E \cdot pC3A^{0.3} \cdot pC4AF^{0.25} \cdot Blaine^{0.35}$

Temperatura de referencia: $T_r := 273 \cdot K$

Temperatura media del hormigón durante el intervalo de tiempo Δt : $T_c := 295 \cdot K$

Intervalo cronológico de tiempo: $\Delta t := 3600 \cdot s$

Edad equivalente a la temperatura de curado de referencia

$t := 1, 2 .. 120$

$$te_{t-1} := \sum_{i=1}^{t} \left[\exp\left[\frac{E}{RC} \cdot \left(\frac{1}{T_r} - \frac{1}{T_c} \right) \right] \cdot \Delta t \right]$$

Relación agua-cemento: $wc := \frac{140}{325} = 0.431$ (tiene que ser <=1)

Grado último de hidratación: $\alpha_u := \frac{1.031 \cdot wc}{0.194 + wc} = 0.711$

Constante de tiempo: $\tau := 66.78 \cdot hr \cdot \frac{m^{1.608}}{kg^{0.804}} \cdot pC3A^{-0.154} \cdot pC3S^{-0.401} \cdot Blaine^{-0.804} \cdot pSO3^{-0.758}$

Constante de forma: $\beta := 181.4 \cdot \frac{m^{1.07}}{kg^{0.535}} \cdot pC3A^{0.146} \cdot pC3S^{0.227} \cdot Blaine^{-0.535} \cdot pSO3^{0.558}$

$$\alpha(t_e) := \alpha_u \cdot \exp\left[-\left(\frac{\tau}{t_e} \right)^{\beta} \right]$$

Tasa de generación de calor $Q_H := H_u \cdot C_c \cdot \overrightarrow{\left[\left(\frac{\tau}{te} \right)^{\beta} \cdot \left(\frac{\beta}{te} \right) \cdot \alpha(te) \right]} \cdot \exp\left[\frac{E}{RC} \cdot \left(\frac{1}{T_r} - \frac{1}{T_c} \right) \right]$