

TREBALL FI DE CARRERA

Títol

**MODELIZACIÓN AVANZADA DE PROBLEMAS DE
FRACTURA EN HORMIGÓN DEBIDO AL ATAQUE
SULFÁTICO EXTERNO**

Autor/a

Celia Riera Bayo

Tutor/a

**Carlos López Garello
Ignacio Carol Vilarasau
Adriá Pérez (Tutor externo)**

Departament

**ETCG - Departament d'Enginyeria del Terreny, Cartogràfica
i Geofísica**

Intensificació

Data

Junio 2015

RESUMEN

La modelación meso-mecánica en materiales heterogéneos y cuasifrágiles, como el hormigón o las rocas, se ha convertido en una potente herramienta para el modelado de procesos de fractura bajo diferentes situaciones de carga. El grupo de Mecánica de Materiales de la UPC ha desarrollado herramientas que permiten llevar a cabo la modelación meso-estructural capturando de forma excelente los procesos de fisuración que ocurren en el interior del material.

A diferencia de otros estudios, el hormigón no se considera como un continuo homogéneo e isótropo, sino que se emplea un modelo meso-estructural basado en la representación explícita de las diferentes fases que forman el hormigón a nivel meso-escala, como son los áridos de mayor tamaño y la matriz de mortero que los envuelve. La capacidad del modelo de reproducir la no linealidad y la capacidad de fallo del material se logra insertando elementos junta de espesor nulo de forma sistemática, a las cuales se les asigna una ley constitutiva elasto-plástica que incorpora conceptos de mecánica de fractura no lineal y energías de fractura, mientras que a los elementos del continuo se les considera un comportamiento elástico lineal. Las juntas representan los planos potenciales de fractura y se insertan a lo largo de los contactos árido-matriz y a través de la propia matriz, conectando los áridos con sus contiguos, de forma que la fisuración pueda extenderse a lo largo de la muestra.

La geometría del modelo se genera numéricamente empleando la teoría básica de Voronoi/Delaunay, obteniendo áridos y matriz formados a base de triángulos y generando finalmente una malla de elementos finitos. El análisis numérico se realiza a partir de dos códigos independientes desarrollados por el grupo de Mecánica de Materiales: DRAC (análisis mecánico) y DRACFLOW (análisis de difusión).

La presente tesina se centra en la modelación numérica del hormigón al ser sometido a ataque sulfático, siendo una continuación de trabajo desarrollado previamente por el grupo de Mecánica de Materiales; (Idiart *et. al*, 2009).

La modelación se lleva a cabo sobre dos mallas de diferentes tamaños, una de $6 \times 6 \text{cm}^2$, y la otra de $10 \times 10 \text{cm}^2$. Con estas dos probetas se procesa al cálculo de ataque sulfático en el hormigón. Las simulaciones se realizan acoplado el problema mecánico con el problema químico/difusivo. Este acoplamiento se consigue mediante la estrategia “staggered”, herramienta que interactúa con los códigos, mecánico y químico/difusivo, calculando así simultáneamente, y consiguiendo unos resultados óptimos.

Este trabajo se basa en la modelización de varios casos de ataque sulfático en 2D. Cada caso se caracteriza por una variación en el algún parámetro, o bien, según la malla optada para realizar el cálculo. O bien, si el cálculo se ha realizado acopladamente o desopladamente.

En definitiva, este trabajo se acaba resumiendo en seis casos académicos de ataque sulfático, donde se valora la respuesta del modelo numérico, y por tanto su validez, como herramienta de cálculo.

ABSTRACT

The meso-mechanical analysis of heterogeneous and quasi-brittle materials, such as concrete or rocks, has emerged as a powerful tool for the modeling of the fracture processes under different loading situations. The group of Mechanics of Materials at UPC has developed tools to perform the meso-structural modeling by capturing excellently the cracking process that occur inside the material.

In contrast to other studies, the concrete is not considered as a homogeneous and isotropic continuous material, but uses a meso-structural model based on the explicit representation of the different phases that form the concrete at the meso-scale, such as large aggregate and the mortar matrix that surrounds them. The capacity of the model to reproduce the nonlinearity and the capacity of failure of the material is achieved by inserting zero-thickness interface elements systematically, equipped with an elasto-plastic constitutive law that incorporates concepts of nonlinear fracture mechanics and fracture energies, whereas the continuum elements are considered with a linear elastic behavior. The interfaces represent the potential fracture planes and are inserted along the aggregate-matrix contacts and through the same matrix, so that cracking may spread through the sample.

The model geometry is generated numerically using the basic Voronoï / Delaunay theory, obtaining aggregates and matrix formed of triangles and finally generating the finite element mesh. Numerical analysis is performed with two independent codes developed by the Mechanics of Materials group: DRAC (mechanical analysis) and DRACFLOW (diffusion analysis).

This thesis focuses on the numerical modeling of concrete under the action of external sulfate attack, being a continuation of work previously developed by the group Mechanics of Materials (Idiart *et. al*, 2009).

The modeling is performed on two meshes of different sizes, one of 6x6cm², and the other of 10x10cm². With these two samples are processed to calculate external sulfate attack in concrete. The simulations are performed by coupling the mechanical problem with the chemical / diffusive problem. This coupling is achieved through the strategy "staggered" tool that interacts with the codes, mechanical and chemical / diffusive and simultaneously calculating and achieving optimum results.

This work is based on the modeling of several cases of sulfate attack in 2D. Each case is characterized by a change in a parameter, or as the opted mesh for the calculation, or if the calculation was made a coupling or uncoupling.

In short, this work is summarizing in six academic cases of external sulfate attack, where the response of the numerical model is valued, and therefore its validity as a tool for calculation.

RESUMEN	2
ABSTRACT	3
1 INTRODUCCIÓN	7
1.1 Motivación	7
1.2 Objetivos	7
1.3 Metodología	8
1.4 Organización de la tesina	9
2 ASPECTOS BÁSICOS DEL COMPORTAMIENTO MECÁNICO DEL HORMIGÓN.....	10
2.1 Introducción	10
2.2 Comportamiento de materiales cuasi-frágiles	10
2.3 Conceptos básicos de la mecánica de fractura.....	12
2.3.1 Mecánica de Fractura Elástica Lineal (LEFM)	13
2.3.2 Mecánica de Fractura no Lineal	14
3 MODELIZACIÓN MESO-ESTRUCTURAL	17
3.1 Niveles de análisis.....	17
3.2 Modelos numéricos a nivel meso estructural.....	18
3.2.1 Modelos continuos	18
3.3 Ley constitutiva de junta	20
3.3.1 Criterio de Fractura	21
3.3.2 Trabajo disipado en el proceso de fractura.....	23
3.3.3 Dilatancia	23
3.3.4 Evolución de los parámetros	24
3.4 Consideración del efecto de envejecimiento en el modelo constitutivo.....	26
3.4.1 Matriz visco-elástica.....	26
3.4.2 Ley constitutiva de junta con envejecimiento	26
3.5 Acoplamiento.....	27
4 COMPORTAMIENTO DEL HORMIGÓN BAJO ATAQUE SULFÁTICO EXTERNO	28
4.1 Características del ataque sulfático.....	28
4.2 Descripción del modelo de difusión-reacción.....	30

4.2.1	Reacciones químicas que se producen.....	31
4.2.2	Modelo de transporte de iones sulfato	31
4.2.3	Coefficiente de difusión en el medio continuo	32
4.2.4	Difusión de los iones sulfatos a través de las fracturas:	33
4.2.5	Cálculo de la expansión volumétrica.....	34
5	ANÁLISIS NUMÉRICO DEL ATAQUE SULFÁTICO EXTERNO EN MUESTRAS DE HORMIGÓN.....	35
5.1	Introducción	35
5.2	Resultados en la malla 6x6cm²	35
5.2.1	Caso de referencia acoplado.....	35
5.2.2	Influencia de la velocidad de la reacción química.....	39
5.3	Resultados en la malla de 10x10 cm²	44
5.3.1	Comparación de los casos desacoplado y acoplado	44
5.3.2	Efecto del llenado de poros en el proceso de difusión.....	49
5.3.3	Efecto del valor del coeficiente de difusión D ₁	55
6	RESUMEN, CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN	60
6.1	Resumen.....	60
6.2	Conclusiones.....	61
6.3	Futuras líneas de investigación.....	62
7	ANEJO. MODELIZACIÓN 3D. PRELIMINARES.....	63
7.1	Generación de la malla 3D	63
7.1.1	Generación de la geometría	63
7.1.2	Generación de la malla de Elementos Finitos.....	64
7.1.3	Ejemplo de malla generada	64
7.2	Primera prueba	67
7.2.1	Resultado de la primera prueba	68
7.3	Segunda prueba:	69
7.3.1	Resultado preliminar:	69
8	BIBLIOGRAFÍA	71

1 INTRODUCCIÓN

1.1 Motivación

Si bien el hormigón es el material más empleado en el ámbito de la construcción y de lo mucho que se ha investigado acerca de su comportamiento mecánico, siguen existiendo aspectos de su comportamiento que requieren profundizar el análisis, como es el caso de su respuesta frente al ataque sulfático.

Una manera consistente de abordar el estudio del comportamiento del hormigón bajo ataque sulfático, es considerando el hormigón como un material heterogéneo, cuyo comportamiento depende de la geometría y las propiedades de los componentes de la estructura interna del mismo.

El problema químico/difusivo sigue siendo un tema por investigar en el ámbito de la modelización, y este trabajo se ha enfocado en esto. En contrastar que el modelo numérico utilizado para simular este tipo de acción es una herramienta que resulta muy útil y potente en el ámbito de la modelización.

Este trabajo es continuación de un trabajo previo (Idiart, A., López, C.M., and Carol, I., 2011), donde se realizó la formulación del modelo numérico y se presentaron algunos ejemplos de aplicación.

El motivo por el cual se ha realizado esta continuación, es para ampliar el campo de validación del modelo, sobretodo verificar la respuesta variando parámetros y empleando muestras de mayor tamaño.

1.2 Objetivos

El principal objetivo de este trabajo es llevar a cabo el estudio numérico del proceso de fractura que se da en el hormigón al ser sometido a ataque sulfático externo. Se lleva a cabo una modelización mesoestructural 2D del material mediante el uso de un código basado en el Método de los Elementos Finitos, con la finalidad de reproducir numéricamente el comportamiento macroscópico del hormigón observado en ensayos experimentales.

Como objetivos específicos pueden mencionarse:

- Análisis del problema de forma acoplada y desacoplada, diferencias de comportamiento.
- Caracterización del comportamiento del hormigón mediante dos mallas de diferente tamaño, una de $6 \times 6 \text{ cm}^2$ y la otra de $10 \times 10 \text{ cm}^2$.
- Llevar a cabo diferentes análisis variando algunos parámetros.

Durante el proceso se tiene en cuenta los efectos tanto del problema mecánico como del problema químico/difusivo. Se analiza el comportamiento del hormigón mostrando una especial atención a la acción del ataque sulfático según los parámetros impuestos.

De forma esquemática, las tareas llevadas a cabo en este trabajo para cumplir dichos objetivos son:

- Introducción de: modelos mesomecánicos existentes, mecánica de fractura no lineal, ley constitutiva elasto-plástica para juntas empleada, otra ley constitutiva con efecto de envejecimiento para las juntas, comportamiento experimental del hormigón sometido al ataque sulfático... etc.
- Uso del código de EF en casos mecánicos (DRAC) y en difusión del ataque sulfático externo (DRACFLOW) en 2D.
- Uso de máquinas de cálculo, mecmat 3, proporcionada por el departamento.
- Generación de casos de estudio, cálculo y representación de resultados 2D mediante GiD.
- Extracción de conclusiones a partir de los resultados obtenidos.
- Análisis global de resultados y conclusiones.
- Propuesta de mejoras y perspectivas futuras.

1.3 Metodología

Para realizar el análisis mecánico y químico/difusivo acoplado y desacoplado de probetas de hormigón a un nivel de observación mesoscópico, se utiliza un modelo desarrollado dentro del grupo de investigación liderado por Ignacio Carol y Carlos María López, en el que se representan explícitamente los diferentes componentes de la estructura interna del material. De esta manera, se generan mallas en las que se representan los áridos de mayor tamaño (aproximadamente el tercio mayor) rodeados de una matriz, representativa tanto del mortero como de los áridos de menor tamaño, y las interfaces existentes entre los áridos y la matriz, que tienen un espesor nulo. La creación de la geometría de las mallas utilizadas en las simulaciones sigue el procedimiento aleatorio basado en la teoría de Voronoi/Delaunay. Luego, se discretiza esta geometría en elementos triangulares para posteriormente analizar la malla resultante por el método de los elementos finitos (MEF). También se agregan elementos junta de espesor nulo entre elementos triangulares de árido y matriz (interfase árido-mortero) y dentro de la misma matriz en direcciones predeterminadas, con el fin de capturar las principales potenciales tendencias de fisuración. Al medio continuo (elementos triangulares de matriz y áridos), se le asigna un comportamiento elástico o viscoelástico lineal, dependiendo de cada caso. La totalidad de la no linealidad del sistema se concentra en los elementos junta, cuya ley constitutiva no lineal está basada en la plasticidad y la mecánica de fractura, con reblandecimiento por trabajo disipado en procesos de fractura, formulada en términos de tensiones y desplazamientos relativos entre sus caras (Carol y Prat, 1990; Carol et al., 1997; López, 1999; López, et al., 2008).

En el caso de análisis químico/difusivo-mecánico, tanto el análisis mecánico como el análisis de difusión se realizan sobre la misma malla de elementos finitos. Dentro del código de problemas de difusión se cuenta con un modelo de ataque sulfático, que permite conocer para cada instante de tiempo la distribución de sulfato y permite la imposición de régimen estacionario o transitorio e imponer condiciones de contorno del tipo; concentración de sulfato impuesta o flujo prescrito.

1.4 Organización de la tesina

El contenido de la presente tesina consta de 6 capítulos y un Anejo, el primero de los cuales corresponde a esta Introducción.

En el capítulo 2 se presenta una breve descripción de los aspectos básicos del comportamiento del hormigón, y una breve explicación de los conceptos básicos de la mecánica de fractura.

En el capítulo 3 se presenta una descripción del “estado del conocimiento” de la modelización meso-estructural. En primer lugar, se destaca la importancia de un análisis a nivel “meso” en materiales heterogéneos como el hormigón, así como los antecedentes y descripción del modelo meso-mecánico. También se explica la interacción del modelo mecánico y el modelo químico/difusivo que se presenta en el capítulo 4.

En el capítulo 4 se describen las principales problemáticas de los efectos del ataque sulfático y se describe el modelo de difusión de ataque sulfático utilizado en este trabajo.

El capítulo 5 presenta resultados del análisis de la respuesta del hormigón y el hormigón cuando se ven expuestos a un ataque sulfático. En primer lugar se realiza una simulación con la malla pequeña, y luego se prosigue modificando parámetros y simulando con la otra malla, con el objetivo de comparar los resultados, y ver cómo responde el modelo. A la vez, estos análisis se calculan acopladamente y desacopladamente, también con el objetivo de comparar, y consiguientemente sacar conclusiones del modelo.

En el capítulo 6 se presentan las conclusiones del trabajo, un resumen, así como algunas líneas futuras de investigación.

En el Anejo se introduce una nueva línea del trabajo, modelización 3D de ataque sulfático. Se explica que se ha empezado hacer, y que resultados está dando por el momento.

Finalmente, se incluye la lista de referencias bibliográficas.

2 ASPECTOS BÁSICOS DEL COMPORTAMIENTO MECÁNICO DEL HORMIGÓN

2.1 Introducción

En este capítulo se presenta una introducción de los principales aspectos del comportamiento mecánico del hormigón y de los conceptos básicos de la Mecánica de Fractura.

2.2 Comportamiento de materiales cuasi-frágiles

Los materiales cuasi-frágiles se caracterizan por un comportamiento intermedio entre dúctil y frágil, ya que no presentan una caída brusca de la resistencia al llegar a la capacidad máxima, como hacen los materiales frágiles, ni se comportan como los materiales dúctiles; que plastifican al llegar a la carga máxima aumentando las deformaciones, sin disminuir la carga, hasta romperse. En un material cuasi-frágil como el hormigón, sometido a un ensayo de tracción bajo deformación controlada, se aprecia una respuesta formada por dos zonas bien diferenciadas. Una primera zona de endurecimiento hasta llegar a la máxima resistencia, y una segunda zona de reblandecimiento por deformación.

El comportamiento cuasi-frágil clásico se produce cuando las dimensiones de la estructura son del mismo orden de magnitud que el tamaño característico de la heterogeneidad. En el caso del hormigón corresponde a su nivel meso, del orden de centímetros. En este nivel de observación se distingue una composición bifásica formada por los áridos de mayor tamaño, embebidos en una matriz formada por pasta de cemento, arena y áridos de menor tamaño. La interfase entre áridos y matriz es el tercer elemento propio de la heterogeneidad del material a este nivel, siendo la zona más débil al presentar generalmente la menor resistencia del compuesto.

En la **Figura 2.2.1** se presentan esquemáticamente los distintos comportamientos comentados anteriormente.

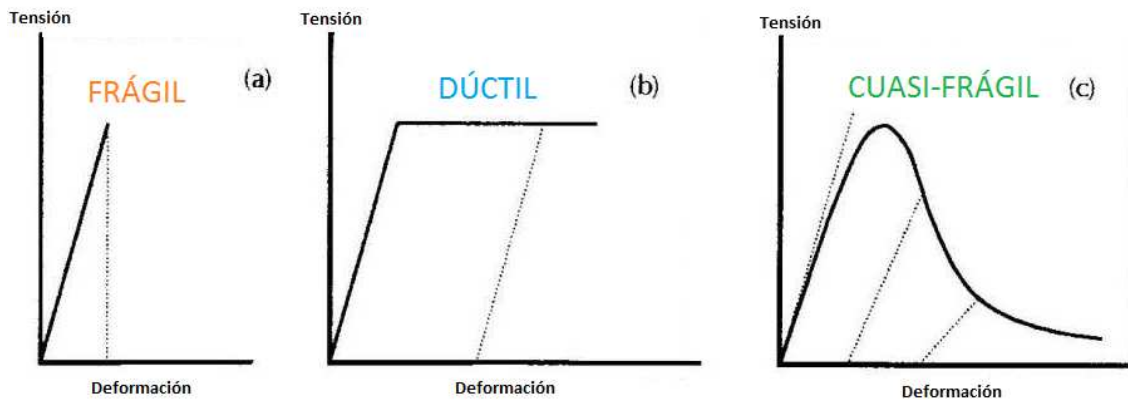


Figura 2.2.1 Comportamiento esquemático de material frágil, dúctil y cuasi-frágil.

En la **Figura 2.2.** Se muestra el comportamiento típico de un material cuasi-frágil, y su explicación física sería la siguiente: en un rango bajo de deformación (tramo OA, **Figura 2.2.**), el comportamiento del material es elástico. A mayores deformaciones empieza un comportamiento no lineal (tramo AB). En este momento, los defectos del material y microporos comienzan a crecer desarrollándose microfisuras distribuidas uniformemente, que provocan una degradación progresiva de sus propiedades mecánicas como la disminución del módulo de Young, y un comportamiento no lineal que se acentúa con el aumento de carga. Se alcanza el valor de máxima resistencia, (punto B), a partir del cual empieza un proceso de reblandecimiento o "*softening*". Durante este proceso, dentro de una cierta zona empieza a desarrollarse una fractura; las microfisuras situadas en una banda se conectan entre sí formando microfisuras. Mientras tanto, las microfisuras situadas fuera de esta banda entran en descarga. La rama de reblandecimiento B-D (**Figura 2.2.**) presenta casi siempre dos tramos en el que influye notablemente la heterogeneidad. La primera zona B-C, donde la pendiente es más pronunciada, corresponde a la formación de la macrofisura debida a la coalescencia de las microfisuras. La parte final corresponde a una rama residual, tramo CD, donde la pendiente se atenúa, debido a la trabazón y puentes de fisuración entre áridos, que dan lugar a mecanismos secundarios de resistencia.

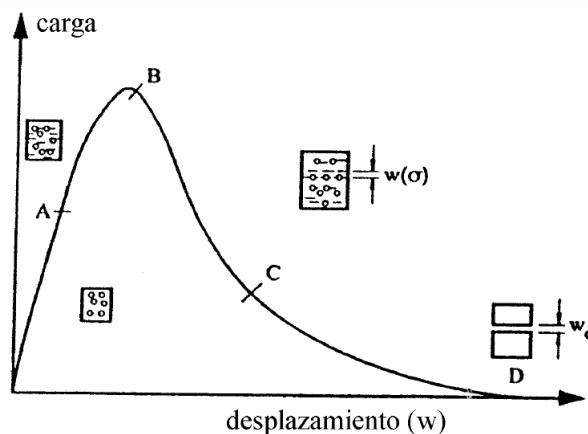


Figura 2.2. Comportamiento característico de un material cuasi-frágil como el hormigón en un ensayo de tracción uniaxial.

Un sólido continuo y homogéneo tiene las mismas características en cada punto. Bajo un estado de carga el comportamiento en cada punto puede determinarse mediante una relación tensión-deformación, única e independiente de la forma y tamaño del cuerpo. En cambio, un hormigón analizado a escala meso, donde la heterogeneidad tiene un papel importante en el comportamiento, con puntos situados dentro y fuera de la zona de localización hace que el concepto de tensión-deformación clásico pierda sentido.

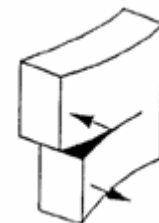
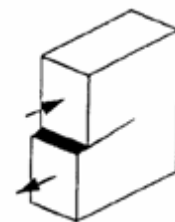
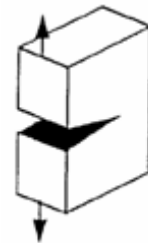
Por todo ello, la mejor manera para interpretar desde un punto de vista físico los fenómenos de localización que dan lugar al "softening", parece razonable considerar el marco teórico proporcionado por la teoría de la Mecánica de Fractura que estudia el comportamiento y propagación de las fisuras y que se comenta brevemente en el apartado siguiente 2.3.

2.3 Conceptos básicos de la mecánica de fractura

La mecánica de fractura es una ciencia que estudia la estabilidad estructural de materiales, considerando la formación y propagación de grietas o defectos en materiales y analizando la concentración de tensiones debida a dichos defectos.

En la mecánica de fractura clásica se distinguen tres modos básicos de propagación de fisura:

- **Modo I** o modo de apertura, en el cual la grieta se abre debido a la aplicación de tensiones normales al plano de fractura.
- **Modo II** o modo deslizante, en el que debido a la aplicación de tensión cortante en el plano de fractura, se producen deslizamientos longitudinales de las superficies en dicho plano.
- **Modo III** o modo de rotura transversal que corresponde al desplazamiento de las superficies de fractura en sentidos opuestos, debido a la aplicación de tensión cortante en planos diferentes al plano de fractura



2.3.1 Mecánica de Fractura Elástica Lineal (LEFM)

Inicialmente esta teoría se formuló para el caso elástico lineal (“Linear Elastic Fracture Mechanic”, LEFM). En un material elástico lineal que presenta algún tipo de imperfección localizada, sometido a una tracción uniforme, el campo de tensiones deja de ser uniforme y se ve forzado a bordear el “obstáculo”, originando una concentración de las líneas de fuerza en las puntas de la imperfección y produciéndose una concentración de tensiones, que depende en gran medida de la forma del defecto (**Figura 2.3**).

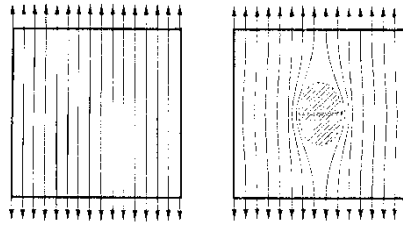


Figura 2.3 Flujo de líneas de tensiones en un panel sometido a tracción uniforme sin entalla (izquierda) y con entalla (derecha).

Son bien conocidas las fórmulas de distribución de tensiones para imperfecciones circulares o elípticas ubicadas en placas de tamaño infinito y bajo tensión uniforme. Concretamente, la solución encontrada por (Inglis, 1913), para analizar un defecto elíptico de semiejes a y b , ubicado en una placa. Esto permitió más adelante a (Griffith, 1920) apreciar que si uno de los semiejes se reducía considerablemente ($b \rightarrow 0$), es decir, achatar la elipse, simulando la forma de una fisura, las tensiones en los dos vértices crecían hasta el infinito. Como alternativa (Griffith, 1920), propuso que se empleara un criterio de balance energético para materiales con comportamiento elástico lineal perfectamente frágil. El criterio de Griffith predice que la propagación de una grieta se produce si la tasa de energía debida a la propagación de grietas, G , es mayor o igual a la tasa de liberación de energía, conocida como energía de fractura (G_f), la cual es una propiedad del material. Además, se supone que esta disipación de energía tiene lugar exclusivamente en la punta de la grieta, mientras que el resto del cuerpo permanece en régimen elástico.

Más adelante, (Irwin, 1958) propuso un criterio de propagación de fisuras en función del nivel de tensión, a través de la utilización de los ‘factores de intensidad de tensiones’. En función de la tensión aplicada, longitud de la grieta y de la geometría de la pieza.

Ambos criterios de Griffith e Irwin son equivalentes, y en resumen, las principales características de la LEFM son (Karihaloo, 1995):

El criterio de propagación de la fractura frágil involucra un solo parámetro material adicional (G_f), además de las constantes elásticas E y ν .

Las tensiones y deformaciones en la zona cercana a la punta de la fisura presentan valores muy altos que tienden a infinito en dicho punto.

Por tanto, en resumen, la principal característica del criterio de LEFM es que supone que la energía sólo se disipa en la punta de la fisura y el resto del cuerpo permanece elástico durante la fisuración. La teoría se adecúa bien para analizar cuerpos que presentan un defecto único y discreto. Pero la teoría LEFM tiene una aplicación muy restringida en materiales que tienen una gran heterogeneidad, como es el caso del hormigón, el cual es el que estamos tratando, por tanto, estas teorías no se adecuan a nuestro problema.

2.3.2 Mecánica de Fractura no Lineal

Para materiales cuasi-frágiles, la situación es diferente al no encontrarnos generalmente con fisuras aisladas sino con microfisuración distribuida, ramificaciones y puenteo de la fisura, fenómenos que se producen en la zona de proceso de fractura (“fracture process zone”, FPZ) de dimensiones relacionadas con el tamaño de las heterogeneidades del material. La mecánica de fractura no lineal considera todos estos procesos. Por tanto, esta parte de la mecánica de fractura sí que se adecúa al problema tratado en este trabajo.

Existen dos grandes familias de modelos a la hora de simular la fisuración:

2.3.2.1 Concepto de la fisura ficticia (FCM)

La primera teoría no lineal de la mecánica de fractura del hormigón fue propuesta por (Hillerborg, 1976) bajo la denominación de “Fictitious Crack Model” (FCM) o modelo de la fisura ficticia. Esta teoría supone que los efectos de la microfisuración en la zona de proceso de fractura se concentran sobre una línea ficticia de espesor nulo que se extiende a partir de la fisura preexistente. A lo largo de esta línea, las tensiones de cierre se incrementan desde cero, en la punta de la fisura preexistente, hasta el valor correspondiente a la resistencia a tracción uniaxial del material, f_t , en la punta de la fisura ficticia, de modo que las caras de la fisura ficticia se cierran suavemente hacia la punta (**Figura 2.4**).

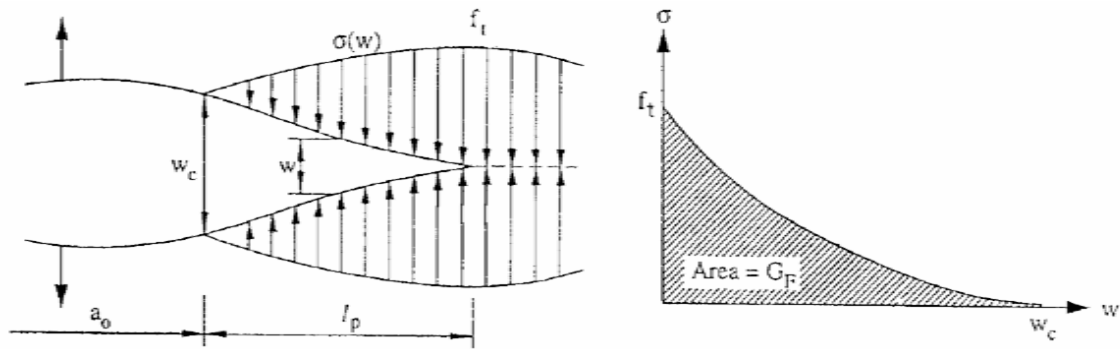


Figura 2.4. Modelo de la fisura ficticia (Hillerborg et al., 1976).

La distribución de las tensiones a lo largo de la FPZ se define mediante una función, $f(w)$, que depende de la apertura de las caras de la fisura ficticia y se considera una propiedad del material. En este caso, a diferencia de la teoría lineal de fractura (LEFM), se requieren al menos dos parámetros materiales. Usualmente, en el FCM se supone conocida la forma de la función de reblandecimiento $f(w)$ en el plano tensión(σ)-apertura(w), y los dos parámetros independientes son la resistencia a tracción, f_t , y la energía de fractura, G_F (área bajo la curva de reblandecimiento, **Figura 2.4**), que puede expresarse de la siguiente manera:

$$G_F = \int_0^{w_c} \sigma(w) dw \quad [2.1]$$

En esta expresión w_c es la apertura crítica de fisura y G_F representa la energía de fractura (energía necesaria para crear una unidad de área de nueva fisura).

Cabe destacar que el FCM, además de predecir la propagación de una fisura existente como en la mecánica de fractura tradicional, permite también determinar la iniciación de la misma. La fisura se inicia cuando la tensión de tracción alcanza el valor de la resistencia f_t , y a partir de ese momento se propaga en dirección normal de acuerdo con una ley $\sigma - w$ decreciente desde f_t , para $w = 0$, hasta $\sigma = 0$ cuando $w = w_c$, situación en la que la fisura se supone completamente abierta en ese punto.

El modelo constitutivo no lineal que se utiliza para el desarrollo de este trabajo se enmarca dentro de la teoría de la mecánica de fractura no lineal, basándose específicamente en el concepto de fisura ficticia FMC descrita.

2.3.2.2 Concepto de la banda de fisuración o “*Crack Band Model*” (CBM)

Teoría introducida inicialmente por Bažant (1976) y desarrollada luego por (Bazant, Z. & Cedolin, L., 1979) y Bažant y Oh (1983) donde se considera la fisura localizada en una banda de cierto ancho h en lugar de en una línea (**Figura 2.5**).

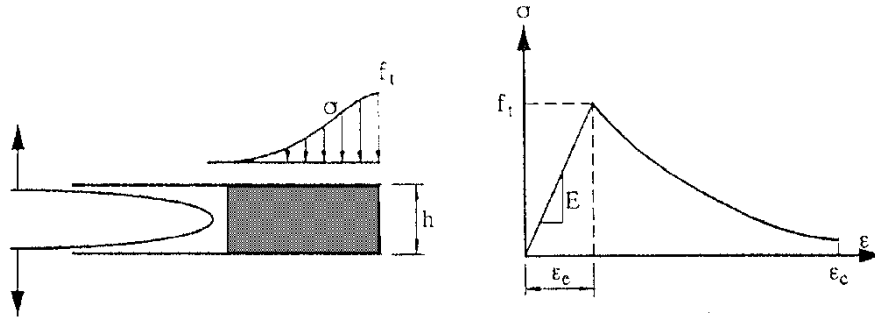


Figura 2.5. Modelo de la banda de fisuración (Bažant, 1976): distribución de la microfisuración en una banda de ancho h (izquierda) y diagrama tensión-deformación (derecha).

En materiales como el hormigón se produce una microfisuración y puenteo de fisura entre áridos de modo que la zona de proceso de fractura no se desarrolla en una banda estrecha y continua. En el CBM el ancho de banda se supone como una propiedad del material que puede relacionarse con la microestructura del hormigón. La ley de ablandamiento puede formularse como una relación tensión-deformación, $\sigma(\epsilon)$, como en los modelos de “*strainsoftening*”, si bien ahora la deformación está relacionada con el desplazamiento inelástico (w) y la energía de fractura (G_F).

3 MODELIZACIÓN MESO-ESTRUCTURAL

3.1 Niveles de análisis

En el estudio de la ciencia de materiales cuasi-frágiles, las investigaciones pueden encuadrarse principalmente dentro de tres niveles de observación-modelización propuestos por (Wittmann, 1983): micro, meso y macro (ver **Figura 3.1**).

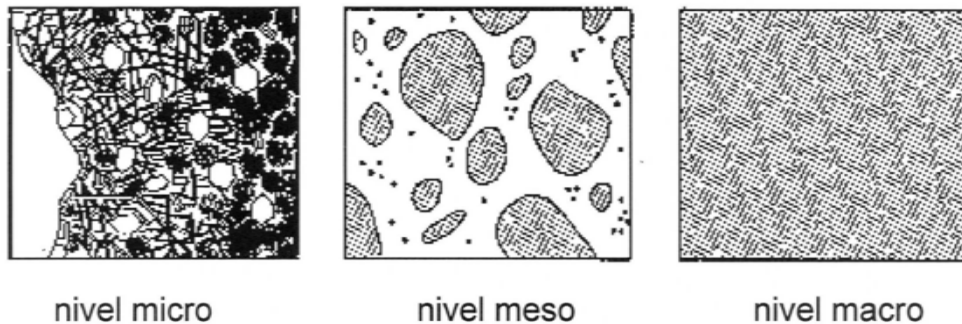


Figura 3.1. Niveles de análisis según Wittmann (1983).

En la modelización **microscópica** se representa el nivel más básico, en el que se considera la estructura interna de la pasta de cemento, interfases árido-mortero, etc. Se utiliza para analizar los procesos químicos que sufre el hormigón. En el nivel intermedio o **meso-estructural**, el hormigón se representa como un material compuesto de partículas que representan los áridos más grandes, incrustados en una matriz porosa homogénea que representa el mortero y los áridos de menor tamaño. La heterogeneidad del hormigón es una de las principales causas de la concentración de tensiones en su estructura y de la posterior fisuración, de modo que el nivel **meso** es el más adecuado para el estudio del comportamiento mecánico del hormigón. Finalmente, el nivel **macroscópico**, donde no se considera la estructura interna de hormigón, y éste es tratado como un material homogéneo y continuo. Se utiliza para el diseño de estructuras.

Está generalmente aceptado que el comportamiento mecánico de cada nivel puede ser explicado a partir de los resultados observados en el nivel inmediatamente inferior.

El estudio del material a nivel meso y micro no está pensado para calcular la respuesta de estructuras completas, sino para adquirir un mejor conocimiento del comportamiento del material a partir del estudio de pequeñas muestras del mismo.

En general, la mayoría de modelizaciones del hormigón se basan en una representación del material como continuo y homogéneo. Esto ha permitido reproducir aspectos más o menos complejos de su comportamiento. Sin embargo, se trata de un material heterogéneo que presenta dos fases principales, árido y mortero, de características muy diferentes.

En este trabajo se utiliza el nivel meso para representar explícitamente las fases mencionadas. Asimismo hay que tener en cuenta la existencia de interfases entre estos elementos, que representan las zonas más débiles del material, y que suponen los principales caminos de rotura en la estructura interna del hormigón.

Es necesario tener presente que las fases consideradas: áridos, mortero, poros y las interfases, entre ellos, determinan el comportamiento macro-mecánico del hormigón.

3.2 Modelos numéricos a nivel meso estructural

El hormigón se ha analizado tradicionalmente a un nivel macroscópico. Sin embargo, al ser un material heterogéneo su comportamiento está influenciado por la geometría y las características físicas y mecánicas de los componentes de su estructura interna, como ya se ha ido explicando en los apartados anteriores. Por consiguiente, para analizar este material resulta conveniente representar explícitamente esta estructura interna, introducir leyes de comportamiento de sus componentes básicos e intentar reproducir el comportamiento "macro" del material como resultado del análisis mecánico a nivel meso.

En la actualidad, el estudio del hormigón a partir de modelos que tienen en cuenta la meso-estructura se pueden dividir en tres grandes grupos: modelos **reticulados** (latticemodels), modelos de **partículas** y modelos **continuos**. Este trabajo se basa en el tercer tipo de modelos; los modelos continuos, el cual se explica a continuación

3.2.1 Modelos continuos

Este modelo representa el material fuera de la zona de fisuración mediante medio continuo. Desde el trabajo realizado por (Roelfstra, P., Sadouki, H. & Wittmann, F., 1985), varios modelos han sido propuestos dentro del grupo de modelos continuos. Entre ellos, y por orden de aparición, pueden citarse (Stankowski, 1990), el (Vonk, 1992), y el (Wang, J. & Huet, C., 1993). En la figura (**Figura 3.2.**) se muestran las mallas de los modelos citados.

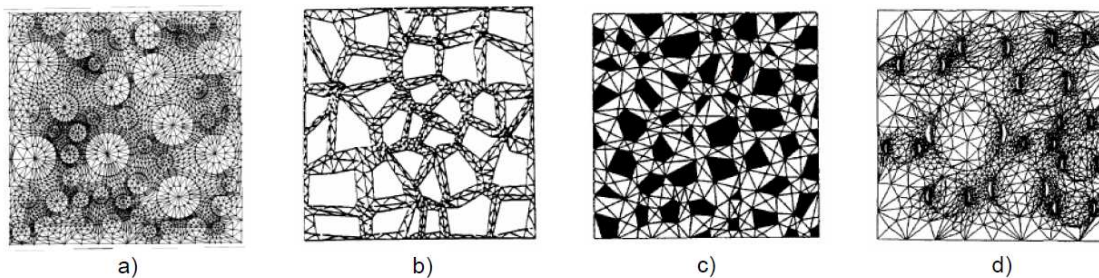


Figura 3.2. Modelos continuos en 2D: a) Roelfstra et al. (1985), b) Stankowski (1990), c) Vonk (1992) y d) Wang y Huet (1993).

En esta tesina se analiza el comportamiento del hormigón sometido a la acción del ataque sulfático, mediante un modelo mesomecánico que ha sido desarrollado dentro del grupo de investigación de la ETSECCPB-UPC. Este modelo ha sido contrastado en la simulación numérica de diversos tipos de ensayos mecánicos tanto a nivel 2D como 3D para distintas situaciones de carga, tales como tracción y compresión uniaxial, biaxial, ensayo brasileño, etc. (López et al., 2008; Caballero et al., 2006, 2007), posteriormente extendido a otros fenómenos acoplados más complejos como son la retracción por secado, el ataque sulfático (del que los trabajos de esta tesina son su continuación) o las altas temperaturas (Idiart et al., 2011; Rodríguez et al., 2011).

El modelo utilizado consiste en representar la estructura interna del material discretizando por un lado las piezas irregulares de los áridos de mayor tamaño, cuya distribución y forma es aleatoria, y están generados por un procedimiento basado en la teoría de Voronoi-Delaunay. Estos están rodeados de una matriz representativa del comportamiento del mortero y los áridos de menor tamaño. Estas dos fases, mortero y áridos de mayor tamaño, se discretizan mediante elementos finitos triangulares a los que se les asigna generalmente un comportamiento elástico lineal. Por otro lado, la no linealidad viene representada por la introducción de elementos junta de espesor nulo, con dos pares de nodos en cada uno, y que representan las diferentes direcciones potenciales de fisuración. Estos elementos se introducen en todos los contactos entre árido-matriz y entre algunos de los contactos de los elementos matriz-matriz.

En la **Figura 3.3.** se muestra de manera esquemática las características de las dos mallas 2D utilizadas en este trabajo. La primera se trata de una malla de 6cmx6cm, (4áridos x 4áridos) y la segunda malla con dimensión de 10cmx10cm, (7áridos x 7áridos). La **Figura 3.3.**(a) muestra la discretización de la matriz en elementos triangulares. En la **Figura 3.3.** (b) se muestra la discretización de los áridos. En la **Figura 3.3.** (c) se representa la disposición de los elementos junta en la interfase entre árido-matriz. La **Figura 3.3.** (d) muestra los elementos junta entre contactos de matriz. En la **Figura 3.3.** (e) se puede apreciar de manera esquemática la disposición de nodos y elementos en una

zona de la malla. En la **Figura 3.3.**(f) se muestra la inserción de un elemento junta entre dos elementos continuos.

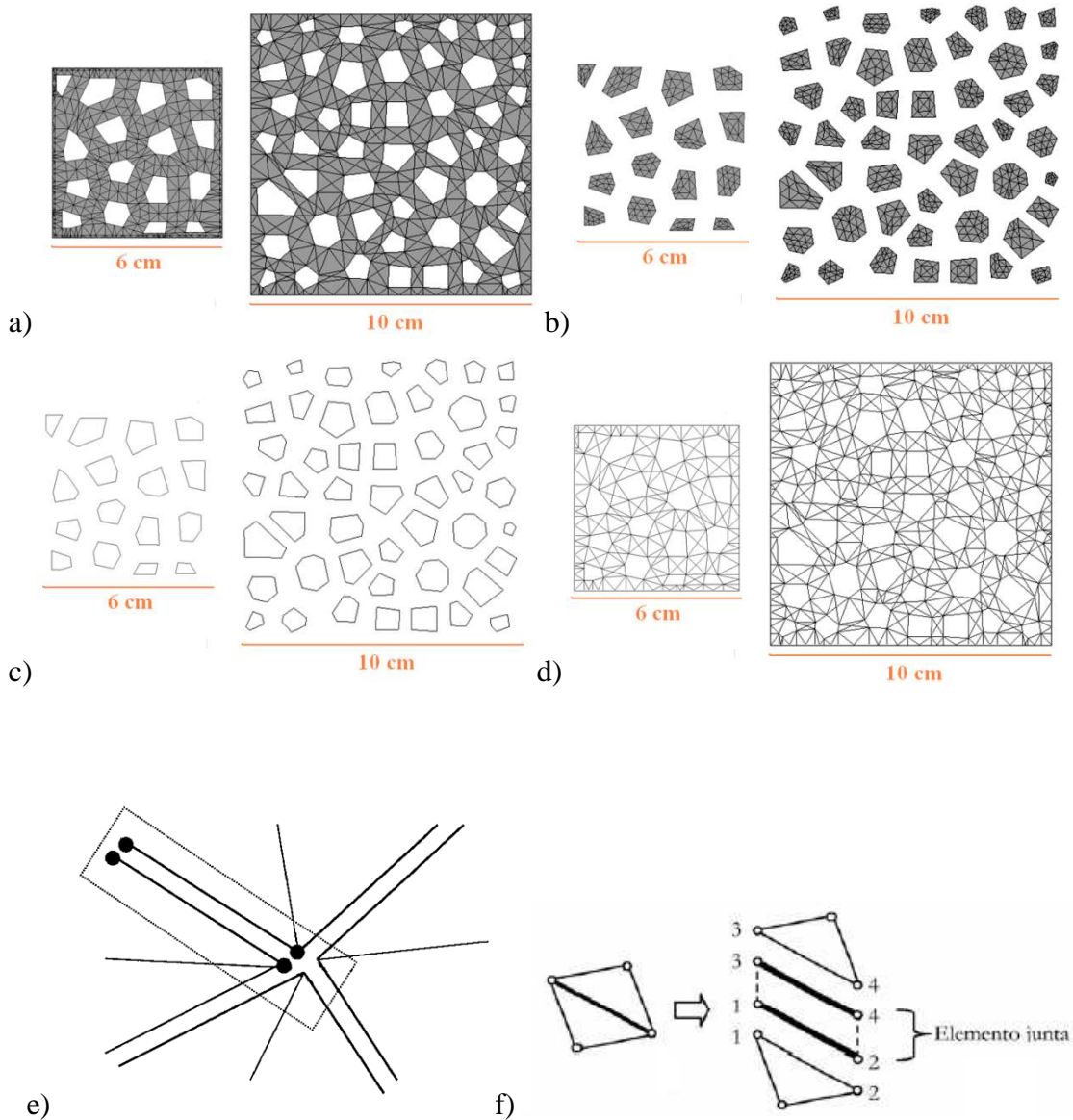


Figura 3.3. Mallas meso-estructurales utilizadas para el estudio de ataque sulfático en el hormigón: a) Discretización de la matriz, b) Discretización de áridos, c) Elementos de interfase entre árido y matriz, d) Elementos de interfase en matriz, e) Detalle de disposición de nodos y elementos y f) Detalle de la inserción de un elemento junta entre elementos continuos.

3.3 Ley constitutiva de junta

Las estructuras de hormigón fisuradas conservan una capacidad resistente debido a fenómenos localizados en las discontinuidades, tales como reblandecimiento por tracción (softening), entrelazamientos de áridos y deslizamientos friccionales. A causa de esta heterogeneidad, la tendencia de la fisuración no es plana, sino que presenta irregularidades, puentes y ramificaciones con caras rugosas.

Por eso, en los análisis numéricos de problemas ingenieriles resulta necesario modelizar adecuadamente el comportamiento de interfases y discontinuidades. A continuación, se va a explicar el modelo constitutivo de junta empleado en este trabajo.

Los elementos junta utilizan una ley constitutiva basada en la teoría de la elasto-plasticidad, incorporando conceptos de la mecánica de fractura (Carol, I., Prat, P., 1990); (Carol, I., Prat, P. y López, C. M., 1997) y las energías de fractura. El comportamiento está formulado en términos de las componentes normal y tangencial de las tensiones en el plano de la junta, $\sigma = [\sigma_N, \sigma_T]$, y los desplazamientos relativos correspondientes,

$\mathbf{u} = [u_N, u_T]$ (ver **Figura 3.4**).

$$\sigma = (\sigma, \tau_1, \tau_2)^t \mathbf{u} = (u, v_1, v_2)^t$$

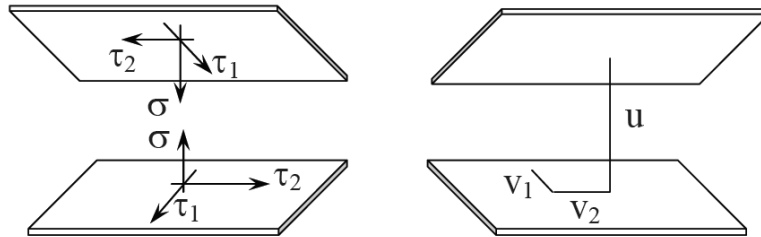


Figura 3.4. Representación 3D de las tensiones y los desplazamientos relativos de junta.

3.3.1 Criterio de Fractura

Es una superficie en el espacio de tensiones ($\sigma_N - \sigma_T$), con la expresión hiperbólica [3.1], que está representada en la **Figura 3.5**.

$$F(\sigma_N, \sigma_T) = \sigma_T^2 - (c - \sigma_N \tan \phi)^2 + (c - \chi \tan \phi)^2 \quad [3.1]$$

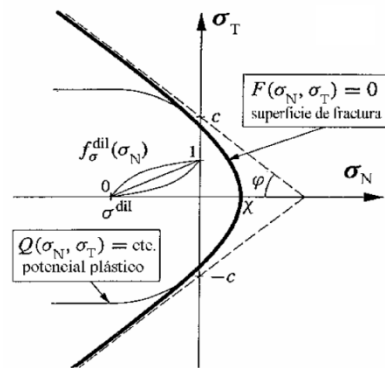


Figura 3.5. Modelo de junta. Superficie de fractura y potencial plástico inicial.

La fisura comienza cuando la tensión en el plano de una junta alcanza la condición $F(\sigma_N, \sigma_T)=0$. Esto quiere decir, que el punto en el espacio $(\sigma_N - \sigma_T)$ se encuentra sobre la superficie de fractura F . En esta situación la teoría de la plasticidad admite dos estados posibles en el comportamiento mecánico: elástico y plástico. A fin de que la junta no presente deformaciones elásticas, imponemos rigideces altas en las juntas, (K_N, K_T) . De esta manera, enseguida que alcanzamos la superficie de fractura, actúan las deformaciones plásticas, las irreversibles.

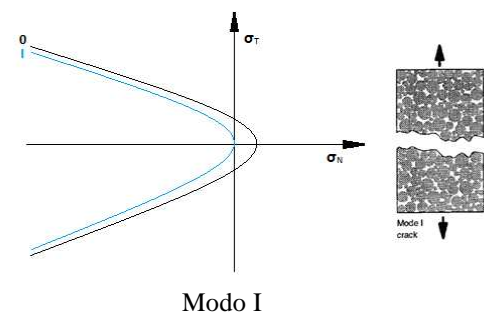
En la expresión [3.1] encontramos tres parámetros: χ , c y ϕ . En la **Figura 3.5**. Se puede ver que χ es el vértice de la hipérbola, c y ϕ son los parámetros de la asíntota. Desde un punto de vista físico, χ es la resistencia a tracción pura, c representa la cohesión aparente y ϕ el ángulo de fricción interna del material.

En la **Figura 3.5**. se puede observar que el comportamiento de los modelos clásicos de fisura cohesiva bajo tracción pura se obtiene al alcanzar la superficie mediante carga creciente a lo largo del eje horizontal, σ_N . Por otro lado, la asíntota representa el criterio de fractura de Mohr-Coulomb. Podríamos decir, que este criterio de fractura define una transición suave entre los dos criterios de *Rankine* (Tracción pura) y *Mohr-Coulomb*.

Una vez iniciada la fisuración la superficie de fractura se contrae y las tensiones decrecen de modo que el estado actualizado de las mismas viene representado siempre por un punto sobre la superficie. Dada una configuración inicial de la superficie de fractura, la forma de su evolución final dependerá del modo de fractura que se desarrolle. Distinguimos dos modos de fractura, explicados a continuación:

Modo I:

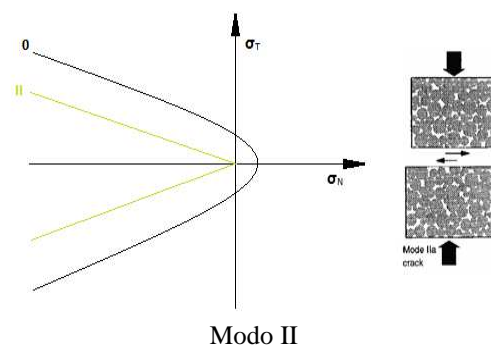
Se trata de la rotura a partir de tracción pura. La formación completa de la fisura requiere como única condición cinemática la separación en dirección normal de ambos lados de la interfase. Debido a la heterogeneidad del material y que en estas condiciones el material aún no ha perdido su cohesión; la fisura presenta una configuración rugosa.



Modo I

Modo II:

La otra situación límite de fisuración se produce bajo corte y alta compresión sin dilatación (en el apartado 3.3.3 se define el fenómeno de dilatación). Se acaba produciendo un deslizamiento en la dirección tangencial. En el estado final del proceso de degradación se ha perdido la cohesión, y lo único que persiste es la resistencia del ángulo de fricción residual. De



Modo II

aquí que la superficie F pase de una hipérbola a dos líneas rectas.

Para controlar los modos de fisuración mencionados, el modelo posee dos parámetros que representan la energía de fractura clásica en modo I, G_F^I (tracción pura) y el segundo modo denominado Modo IIa, G_F^{IIa} . Estos dos parámetros los consideramos característicos del material. La relación de estos dos consumos de energía en hormigón suele ser: $G_F^{IIa} = 10 \cdot G_F^I$.

3.3.2 Trabajo disipado en el proceso de fractura

Una vez iniciada la fisuración, la contracción de la superficie de fractura se produce por el decrecimiento de los parámetros de la hipérbola, como se ha comentado en el apartado anterior, y este decrecimiento está en función de unas leyes basadas en el trabajo consumido durante la formación de la fisura. Por tanto, la evolución de la superficie de fractura está controlada por una sola variable de historia; W^{cr} , que significa el trabajo consumido durante la fracturación:

$$dW^{cr} = \sigma_N \cdot \delta u^{cr} + \sigma_T \cdot \delta v^{cr} \quad \text{si } \sigma_N \geq 0 \text{ (tracción)} \quad [3.2]$$

$$dW^{cr} = \sigma_T \cdot \delta v^{cr} \cdot \left(1 - \left| \frac{\sigma_N \cdot \tan \phi}{\sigma_T} \right| \right) \quad \text{si } \sigma_N < 0 \text{ (compresión - corte)} \quad [3.3]$$

Donde δu^{cr} y δv^{cr} representan los incrementos de desplazamientos relativos de la apertura de fisura en la dirección normal y tangencial, respectivamente. La expresión [3.2] indica que en la zona de tracción todo el trabajo disipado en la junta proviene de procesos de fractura.

En la expresión [3.3]; zona de compresión/corte, la contribución a W^{cr} viene dada por el trabajo de corte al cual se le resta el trabajo por fricción pura.

3.3.3 Dilatancia

En los materiales heterogéneos, los planos de fisura presentan, generalmente, irregularidades debidas a una tendencia de propagación según zonas más débiles, como lo son los contactos entre árido y matriz, y en algunos contactos entre matriz y matriz. Por ello, las tensiones de corte además de generar el deslizamiento entre los planos de la fisura, también inducen una apertura de estos, produciéndose así, el fenómeno de dilatancia.

La dilatancia varía con la intensidad de la tensión de compresión hasta anularse cuando alcanza un valor σ^{dil} , ver **Figura 3.5**, el cual es un parámetro de entrada. Por otro lado,

la dilatación disminuye también a medida que se va degradando la superficie de fractura, hasta anularse cuando la superficie alcanza su estado de fricción residual

3.3.4 Evolución de los parámetros

La evolución de la superficie de fractura se produce mediante el decrecimiento de los parámetros de la hipérbola definida en la ecuación [3.1], y por tanto, en función del incremento del trabajo disipado durante la formación de la fisura, W^{cr} .

Según la propuesta de (Carol, I., Prat, P., 1990), la superficie de fractura se contrae en función del decrecimiento de χ y c , mientras que $\tan\phi$ se mantiene constante. Con posterioridad, se propone en (López, 1999), la evolución del modelo según tres parámetros: χ , c y $\tan\phi$.

Las variables de estado χ y c decrecen a partir de sus valores iniciales, χ_0 y c_0 , en función del trabajo disipado durante el proceso de fractura, W^{cr} , siguiendo una función escalar $S(\xi)$:

$$S(\xi) = \frac{e^{-\alpha\xi}}{(1+(e^{-\alpha}-1)\xi)} \quad [3.4]$$

Esta función provee una familia de curvas diferentes según el valor del parámetro α que se adopte; en la **Figura 3.6** (a) se observa la utilización de esta función en la evolución de χ y c . La evolución de χ viene definida por:

$$\chi = \chi_0 (1 - S(\xi)) \quad [3.5]$$

De esta manera, χ varía desde su valor inicial hasta anularse, cuando $W^{cr} = G_F^I$, **Figura 3.6** (a), esto quiere decir, que ya no resiste tensiones de tracción, estado que se caracteriza por una superficie hiperbólica que pasa por el origen (curva "1" **Figura 3.6**(d)).

El decrecimiento de la variable c es definido indirectamente a través de χ , $\tan\phi$ y el parámetro a que representa la distancia horizontal entre el vértice de hipérbola actualizada y sus asíntotas, que vendría dado por (**Figura 3.6**(c)):

Así definida, c varía según:

$$c = (\chi + a)\tan\phi \quad [3.6]$$

De modo que c decrece de c_0 a 0, momento en el que el trabajo consumido en el proceso de fractura alcanza la energía de fractura en modo IIa, $W^{cr} = G_{FIIa}$ (Figura 3.6a)). En otras palabras, una vez llegado al valor de G_{FIIa} , la superficie de la junta ya no tiene cohesión.

Finalmente, la variación del ángulo de fricción viene dada por:

$$\tan\phi = \tan\phi_0 - (\tan\phi_0 - \tan\phi_{res})S(\xi) \quad [3.7]$$

donde ϕ_0 es el ángulo de fricción inicial y ϕ_{res} es el ángulo de fricción residual. De este modo $\tan\phi$ varía desde su valor inicial a su valor residual cuando se alcanza la superficie de fractura final (Figura 3.6 (b)).

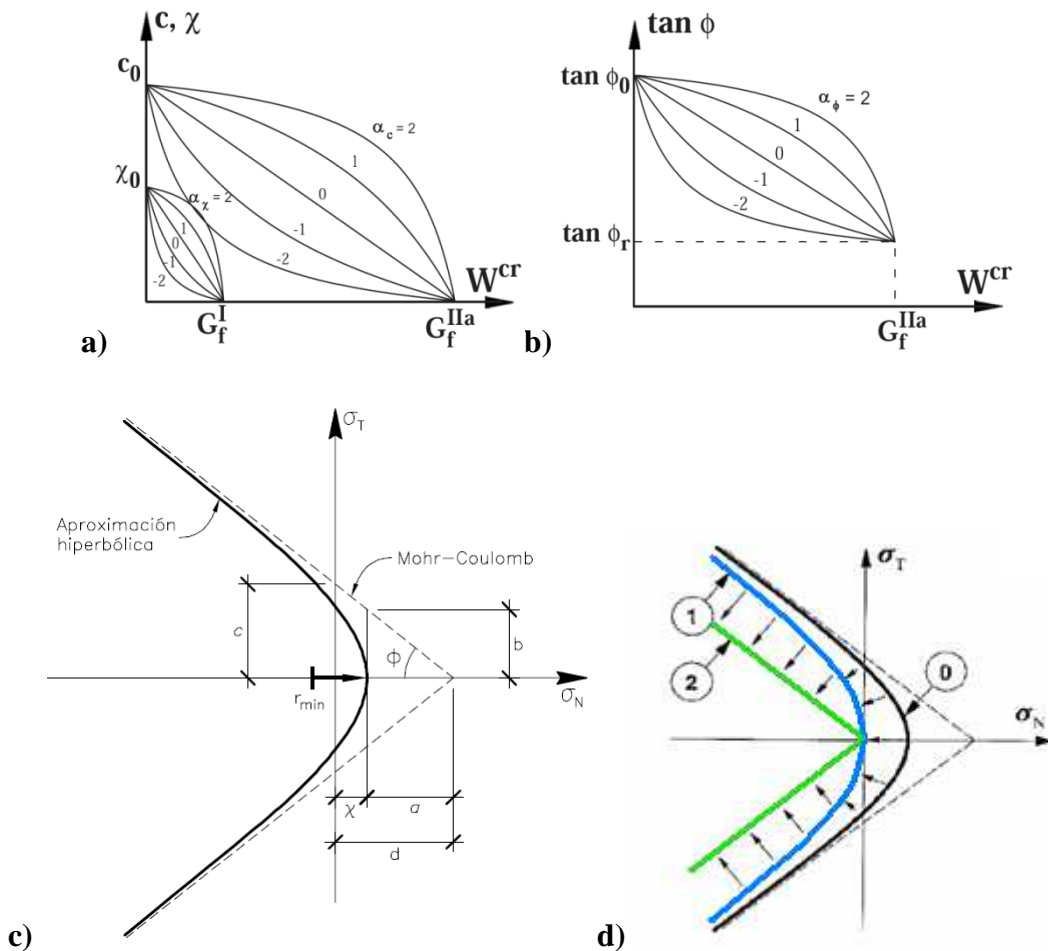


Figura 3.6. Modelo junta: (a) Evolución de los parámetros c y χ , según las leyes de reblandecimiento. (b) Evolución del parámetro $\tan\phi$ según su ley de reblandecimiento. (c) Parámetros de la superficie de fractura. (d) Evolución de la superficie de fractura.

3.4 Consideración del efecto de envejecimiento en el modelo constitutivo

En este trabajo también se presenta la aplicación del modelo en la simulación del comportamiento de envejecimiento del hormigón. Para ello se modifican algunos aspectos hasta ahora explicados, tanto en el comportamiento de la matriz, como en la propia ley constitutiva de las juntas.

3.4.1 Matriz visco-elástica

El comportamiento de los áridos se mantiene elástico lineal, mientras que para la matriz de mortero se considera un comportamiento visco-elástico lineal con envejecimiento mediante el modelo de la "cadena de Maxwell" (**Figura 3.7**).

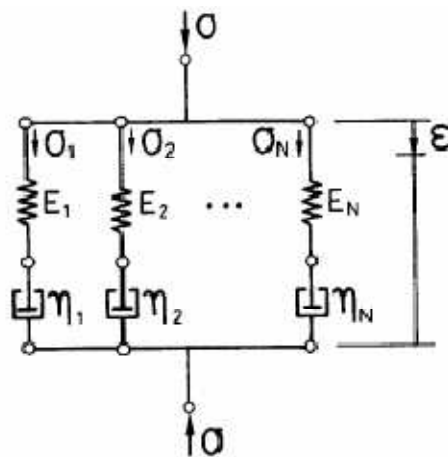


Figura 3.7. Modelo reológico "Cadena de Maxwell".

Este modelo ha sido utilizado en (Idiart, A., López, C.M., and Carol, I., 2011), en donde puede ser consultado en mayor detalle.

3.4.2 Ley constitutiva de junta con envejecimiento

La ley constitutiva de junta con envejecimiento fue propuesta en (C.M.López *et. al*, 2003).

El modelo, basado en la teoría de la elasto-plasticidad, utiliza conceptos de la Mecánica de Fractura a fin de establecer el reblandecimiento debido al trabajo disipado en fractura, e incorpora el tiempo como variable para tener en cuenta el endurecimiento con el paso del tiempo. La superficie de rotura $F=0$ se define mediante la misma expresión [3.1]. Los valores inicial es de las variables de estado $\chi_0(t_0)$, $c_0(t_0)$ y $\tan\phi_0(t_0)$, son constantes que determinan la configuración inicial de la superficie de rotura, representada por la curva "0" en la **Figura 3.8**. Una vez iniciada la fisuración, la superficie se contrae mediante el decrecimiento de los parámetros de la hipérbola en función de las leyes basadas en el trabajo consumido en procesos de fractura W^{cr} , y para

tener en cuenta la madurez del hormigón (el endurecimiento con el paso del tiempo detectado en los ensayos experimentales), se introduce el tiempo como variable de evolución de los parámetros χ , c y G_F^I , ($G_F^{IIa} = 10 \cdot G_F^I$).

De esta manera, la superficie de rotura para una determinada edad inicial de carga se expande con el tiempo como se muestra en la curva "1" de la **Figura 3.8**. Por lo tanto, la posición actualizada de la superficie de rotura dependerá de la combinación resultante entre el estado de cargas y el paso del tiempo.

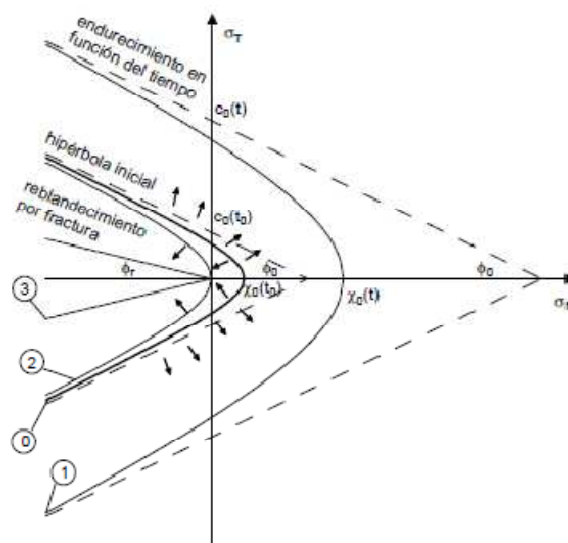


Figura 3.8. Evolución de la superficie de fractura de rotura. Reblandecimiento por trabajo de fractura, y endurecimiento debido al tiempo.

3.5 Acoplamiento

El acoplamiento difusión/químico-mecánico se ha implementado mediante una estrategia en "staggered" que relaciona dos códigos independientes, de manera que sucesivamente el resultado del problema de difusión/químico (que se explica en el siguiente capítulo) se utiliza como entrada en el análisis mecánico y el de este último, como entrada en el primero, hasta alcanzar una tolerancia prefijada. Es decir, el problema difusivo/químico utiliza los desplazamientos que se han producido mecánicamente, luego este envía las deformaciones que se producen debido a la precipitación de elementos, y con este archivo de deformaciones el mecánico vuelve a calcular los desplazamientos producidos, y los vuelve a enviar al problema químico, y así sucesivamente.

En ambos análisis se emplea la misma malla de EF con los mismos elementos junta sin espesor.

4 COMPORTAMIENTO DEL HORMIGÓN BAJO ATAQUE SULFÁTICO EXTERNO

Existen diferentes formas de ataques químicos, a veces con varios tipos de iones presentes simultáneamente, que pueden dar lugar a procesos de degradación en estructuras de hormigón. Nuestro trabajo se centra en el ataque sulfático externo, que es el deterioro mecánico que sufren los materiales cementicios debido al ingreso de iones sulfáticos presentes en medios circundantes ricos en sulfato.

En este capítulo se presenta en primer lugar las principales características del ataque sulfático, qué condiciones se requieren para que se produzca y como afecta al hormigón. Posteriormente se describe el modelo de difusión-reacción utilizado en el siguiente capítulo 5 para reproducir y analizar este fenómeno.

4.1 Características del ataque sulfático

El ataque sulfático externo se puede definir como el deterioro mecánico del material debido al ingreso de iones sulfato presentes en algunos ambientes circundantes a estructuras de hormigón. Debido a los mecanismos expansivos que producen los sulfatos al reaccionar con algunos componentes del hormigón, como consecuencia el material se fractura, aparece el efecto de "spalling" (proceso de desprendimiento), pérdida de resistencia general...,etc, que puede dar lugar a la desintegración completa del material.

Las principales fuentes de sulfatos pueden ser de sodio, magnesio, calcio y potasio, los cuales pueden estar presentes en aguas subterráneas, residuos industriales sólidos o líquidos, fertilizantes.

Las condiciones más importantes para que se lleve a cabo este proceso es primero un ambiente rico en sulfatos, luego que el hormigón se caracterice por una permeabilidad (o difusividad) alta, de esta manera el ingreso de iones sulfatos es más fácil, y por último, un ambiente húmedo, favoreciendo así la difusividad. Se presentan tres procesos:

1) Transporte de los iones sulfato a través de los poros. Este paso se ve totalmente controlado por la permeabilidad y difusividad del hormigón. Un factor clave es el parámetro de relación agua/cemento. También influyen las fracturas presentes en el material.

2) Reacciones químicas entre los componentes de la pasta de cemento endurecida y los iones sulfatos una vez dentro del material. Dependiendo del tipo de cemento y las fases aluminosas presentes en el conjunto del hormigón, las reacciones químicas serán de un grado u otro.

3) Fenómenos de expansión. Debido a la formación de fases cristalinas como consecuencia de las reacciones químicas.

El mecanismo que tiene lugar cuando el hormigón es atacado por sulfatos, es el siguiente:

Los sulfatos que ingresan reaccionan primero con la portlandita ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) presente en el hormigón, para formar yeso (CSH_2), y consecuentemente, el yeso formado, reacciona con las diferentes fases de aluminatos de calcio no difusivos presentes en la pasta de cemento hidratada para formar etringita secundaria.

Por tanto, las dos consecuencias básicas del ataque por sulfatos sobre los componentes del hormigón son la formación de etringita (aluminato de calcio trisulfato 32-hidratado, $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$) y yeso (sulfato de calcio deshidratado, $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). La formación de etringita puede generar un aumento del volumen sólido, provocando expansión y fisuración. La formación del yeso puede provocar ablandamiento, pérdida de la cohesión y resistencia del hormigón debido a la descalcificación de la fase CSH.

Por otra parte, la formación de etringita no necesariamente conlleva expansiones. Debe tenerse en cuenta la presencia de poros, defectos en la pasta de cemento y en las interfases pasta-árido. Todo ello representa huecos en los que la etringita precipita rellenando el espacio sin generar deformaciones expansivas. Las expansiones al principio del ataque son moderadas, el espacio vacío es rellenado por la precipitación de etringita, y recién luego se produce un aumento expansivo general.

La intensidad del ataque o como de extendida es la degradación que producen los sulfatos es muy difícil de predecir en las estructuras reales y depende de varios factores, los cuales los podemos dividir en dos grandes grupos:

La calidad del hormigón: según la categoría de éste, la relación w/c, el estado previo antes del ataques, tipos de contenidos, etc.

Las condiciones ambientales: concentración, distribución y tipo de sulfato (sodio, magnesio, etc.), humedad y temperatura, flujo subterráneo, permeabilidad del suelo en que este en contacto, etc.

Pero hay dos factores muy importantes que determinan considerablemente el ataque de sulfatos. El primero es el tipo de sulfato y el segundo es la cantidad inicial del elemento C_3A en el hormigón.

Según el tipo de sulfato

El tipo de sulfato que ingrese determina como va a ser el proceso, siendo el más agresivo el sulfato de magnesio (MgSO_4), seguido del de sodio (Na_2SO_4) o potasio (K_2SO_4), es decir, sulfatos alcalinos, y finalmente, sulfato de calcio (CaSO_4). Por

ejemplo, el caso de sulfatos de magnesio, la degradación que produce en el hormigón es más acelerada

Este trabajo se enfoca en el ataque sulfático de tipo sódico (Na_2SO_4), ya que este estudio es la continuación de un trabajo anterior del grupo de investigación (Idiart, A., López, C.M., and Carol, I., 2011).

Cantidad inicial de C_3A

Un factor muy importante en la determinación del ataque sulfático es la cantidad inicial del componente C_3A . Este elemento juega un papel muy importante en las expansiones producidas, especialmente en el caso de la exposición de sulfato de sodio. Un bajo contenido en C_3A minimiza este proceso, ya que la fuente de monosulfatos es menor, menos reactantes para que se produzca la reacción entre yeso y C_3A , y por tanto, menos formación de etringita, y por ello, menos expansiones. Las grandes expansiones, y por tanto, una mayor degradación en el hormigón se realizará con el efecto contrario; altas cantidades de C_3A .

Más información sobre el ataque sulfático se puede encontrar en (Idiart *et. al*, 2009) y en (Idiart *et. al*, 2011)

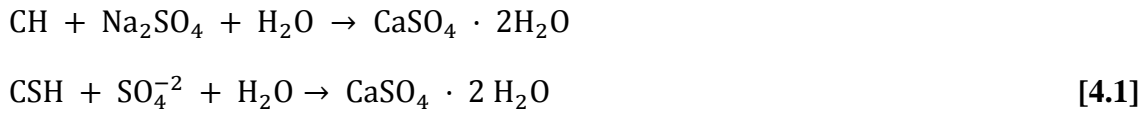
4.2 Descripción del modelo de difusión-reacción

Desde un punto de vista de la ingeniería civil, muchos estudios se han llevado a cabo para desarrollar relaciones empíricas que cuantifiquen la degradación de las estructuras de hormigón, cuando estas son expuestas a una fuente de sulfatos, basados en la experiencia. El inconveniente principal de generar un buen modelo para este fenómeno, es que el ataque sulfático juega con un gran número de factores que determinan la respuesta del hormigón.

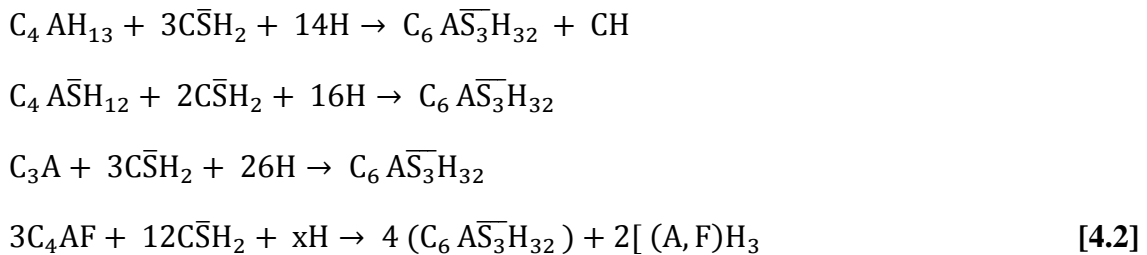
El modelo desarrollado para el análisis de transporte químico utilizado en este trabajo está basado en la formulación propuesta por (Idiart *et al*, 2009), basado a su vez en los trabajos de (Tixier & Mobasher, 2003). El modelo introduce la influencia de las fracturas en el proceso del transporte de una manera explícita. La finalidad del modelo es poder estudiar la degradación debida al impacto de los sulfatos juntamente con la degradación mecánica. Para esto se utiliza una formulación acoplada difusión/reacción-mecánico mediante una estrategia "staggered" explicada en el apartado 3.6 del capítulo anterior.

4.2.1 Reacciones químicas que se producen

Los sulfatos reaccionan con la Portlandita y la descomposición del silicato de calcio hidratado (CSH), dando como producto el yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$):



Una vez formado el yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O} = \overline{\text{CSH}}_2$), este reacciona con las diferentes fases de aluminato de calcio, dando lugar a un total de 4 reacciones:



Todas ellas formando etringita ($\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 32\text{H}_2\text{O} = \text{C}_6\overline{\text{AS}}_3\text{H}_{32}$).

4.2.2 Modelo de transporte de iones sulfato

Dada la complejidad, se considera un punto de vista simplificado del problema, en el cual el ataque sulfático externo puede ser analizado mediante la difusión de un sólo tipo de ion, representado por el ingreso de sulfatos.

Las tres primeras reacciones presentadas en [4.2] se agrupan en una expresión única definida como:



Donde $\text{CA} = (\text{C}_4\text{AH}_{13}, \text{C}_4\overline{\text{AS}}\text{H}_{12}, \text{C}_3\text{A})$, son las diferentes fases de aluminato de calcio, q representa el coeficiente estequiométrico ponderado de la reacción agrupada.

Por otro lado, las reacciones químicas mencionadas tienen lugar de acuerdo con la disponibilidad de sulfatos y aluminatos de calcio, lo cual se determina en espacio y tiempo, a través de una ecuación de difusión-reacción de segundo orden, para la concentración de sulfatos $U(\text{mol}/\text{m}^3)$ y $C(\text{mol}/\text{m}^3)$ cantidad de aluminatos de calcio equivalente de la agrupación de las reacciones (CA en [4.3]):

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_U \frac{\partial U}{\partial x} \right) - kUC \quad [4.4]$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k \frac{UC}{q} \quad [4.5]$$

Donde D_U [m^2/s] es el coeficiente de difusión, k [$m^3/(mol.s)$] es un coeficiente que define la velocidad de cada reacción, y t [s] y x [m] son el tiempo y las coordenadas espaciales, respectivamente.

4.2.3 Coeficiente de difusión en el medio continuo

Una diferencia importante respecto del modelo original (Tixier & Mobasher, 2003), es que el modelo propuesto por (Idiart, A., López, C.M., and Carol, I., 2011), y por tanto, el que se utiliza en este trabajo es considerar una variación del coeficiente de difusión, dependiente del efecto de “llenado del poro”; la difusividad decrece a medida que los poros se llenan con especies precipitadas. Por otro lado, la difusión a través de las fisuras está explícitamente considerada con la introducción de las juntas. De este modo, nuestro modelo considera la disminución de la difusividad debida al efecto de llenado de los poros, simultáneamente con un incremento de la difusividad general efectiva debido a fenómenos de fisuración.

Se ha adoptado la variación del coeficiente de difusión en términos de una función de escala de acuerdo a las siguientes expresiones:

$$D_\Phi (\Phi_{cap}) = D_0 + (D_1 - D_0) f (\beta_D, \Phi_{cap}) \quad [4.5]$$

$$f (\beta_D, \Phi_{cap}) = \frac{e^{-\beta_D \xi}}{1 + (e^{-\beta_D} - 1) \xi} \quad [4.6]$$

$$\xi = \Phi_{cap} / \Phi_{ini} \quad [4.7]$$

$$\Phi_{ini} = v_c \left(\frac{\frac{w}{c} - 0.36\alpha}{\frac{w}{c} + 0.32} \right) \quad [4.8]$$

$$\Phi_{cap} = \Phi_{ini} - \alpha_s CA_{react} \text{ si } \alpha_s CA_{react} < \Phi_{ini} \text{ si no } 0 \quad [4.9]$$

En las cuales D_0 , D_1 , son valores de referencia inferior y superior, respectivamente, β_D es un parámetro que determina la no linealidad de la función, Φ_{ini} es la porosidad capilar inicial, Φ_{cap} es la porosidad capilar actualizada que tiene en cuenta el aumento de estringita, v_c es la fracción volumétrica del cemento, w/c es la relación agua-cemento, α

es el grado de hidratación, y α_s y CA_{react} se definen más adelante. En la **Figura 4.4.1** se muestra la variación de la ley propuesta para $\beta_D = 1.5$, que se compara con otras formulaciones encontradas en la bibliografía (valores normalizados del coeficiente de difusión y la porosidad capilar).

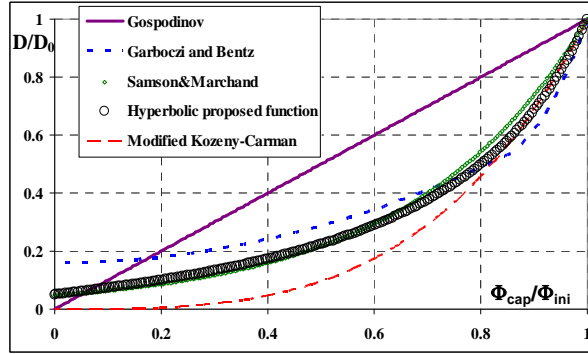


Figura 4.4.1. Comparación de la ley de variación del coeficiente de difusión propuesta en este trabajo con otras formulaciones. Información más detallada en (Idiart *et. al*, 2009)

4.2.4 Difusión de los iones sulfatos a través de las fracturas:

El efecto de las fracturas en el transporte de iones sulfatos es explícitamente considerado en el modelo con la introducción de elementos juntas de espesor cero. Este efecto tiene una gran importancia en la determinación de los frentes de penetración del sulfato.

En este modelo se utiliza una ley cuadrática-lineal en la que se relaciona la difusión en los elementos junta y la apertura de estas.

$$\begin{aligned} K_L(u) &= \kappa \cdot u^2, & \text{si } u < u_{\text{critica}} = 100\mu\text{m} \\ K_L(u) &= \kappa \cdot u^2 \cdot u, & \text{si } u \geq u_{\text{critica}} = 100\mu\text{m} \end{aligned} \quad [4.10]$$

$$\kappa \cong \frac{D_{\text{free}} - 0}{u_{\text{critica}} - 0} = \frac{1 \times 10^{-9} \text{m}^2/\text{s}}{100\mu\text{m}} = 10^{-5} \text{ (m/s)} \quad [4.11]$$

Para obtener una relación difusión-apertura juntas (u), se asume que la difusión aumenta inicialmente con el cuadrado de la apertura. La junta de espesor 0, tiene inicialmente apertura 0, $u=0$, y a medida que se va abriendo la junta, la difusión va aumentando hasta llegar a una apertura igual a $100\mu\text{m}$, que llamamos apertura crítica, u_{critica} , a partir de la cual consideramos una difusión de variación lineal (valor aproximado $1.2 \times 10^{-5} \text{ (m}^2/\text{s)}$).

Esta relación se muestra en la **Figura 4.2**.

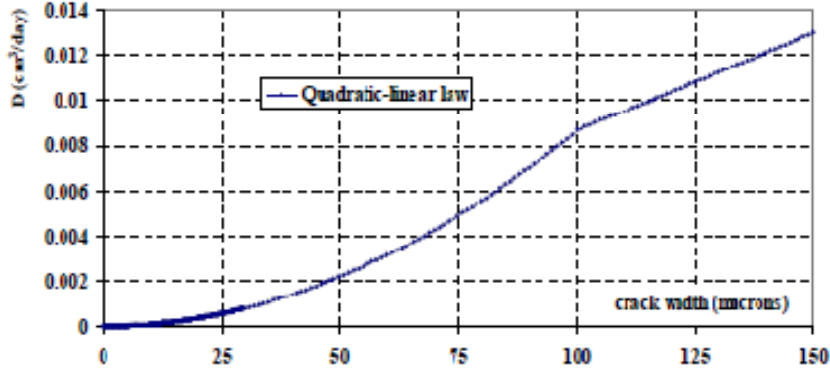


Figura 4.2. Relación entre el coeficiente de difusión en la interfases de espesor cero y la apertura de las fracturas.

4.2.5 Cálculo de la expansión volumétrica

Se supone que la etringita es el único producto de reacción que gobierna las expansiones. La deformación volumétrica $\varepsilon_v(t)$ se obtiene de la cantidad de aluminato de calcio reaccionado y el cambio de volumen asociado con él. Para cualquiera de las reacciones individuales mostradas antes, el cambio volumétrico puede calcularse como:

$$\frac{\Delta V_i}{V_i} = \frac{m^{\text{etr}}}{m^{\text{Pi}} + a \cdot m^{\text{yeso}}} - 1 \quad [4.12]$$

Siendo m^i el volumen molar [m^3/mol] de cada especie y a el coeficiente estequiométrico involucrado en la reacción. Para calcular la deformación volumétrica total, es necesario calcular la cantidad de fases de alúmina que han reaccionado (CA_{react}).

Para la versión completa del modelo, la deformación volumétrica se calcula como:

$$\varepsilon_v(t) = \sum_{i=0}^n C_{\text{react}}^i \frac{\Delta V_i}{V_i} m_i - f \cdot \Phi_{\text{ini}} \quad [4.13]$$

$$C_{\text{react}}^i = C_0^i - C_{\text{unr}}^i \quad [4.14]$$

Donde C_0^i representa la concentración inicial de las diferentes fases de alúmina, C_{unr}^i es la cantidad de los aluminatos no reaccionados (dados por los valores actualizados de las variables internas) y f es la fracción de porosidad capilar que tiene que ser llenada antes de que ocurra alguna expansión. Para el modelo simplificado se emplea nuevamente un esquema promedio para las diferentes fases, en el que el incremento de volumen se relaciona con el aluminato de calcio reaccionado mediante un coeficiente α_s .

Más información sobre las ecuaciones del modelo, con una explicación más detallada se puede encontrar en (Idiart *et. al.*, 2009).

5 ANÁLISIS NUMÉRICO DEL ATAQUE SULFÁTICO EXTERNO EN MUESTRAS DE HORMIGÓN.

5.1 Introducción

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en las simulaciones numéricas llevadas a cabo en este trabajo. Para ello, se han utilizado dos mallas. La primera, con sección de $6 \times 6 \text{ cm}^2$ (4x4 áridos con una fracción volumétrica del 26% y tamaño máximo 15mm). La segunda, sección de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (7x7 áridos). Se han adoptado unos parámetros que caracterizan a un hormigón del tipo CEM I 52.5N/SR.

Se simula que las dos mallas se sumergen en una solución de un 5% de sulfato de sodio, correspondiente a una concentración de $35.2 \text{ (mol/m}^3\text{)}$ de sulfato de sodio. Se ha impuesto, entonces, la concentración de sulfato sódico, $35.2 \text{ (mol/m}^3\text{)}$, en los cuatro bordes externos de las muestras. En la Figura 5.1 se muestran las dos mallas utilizadas.

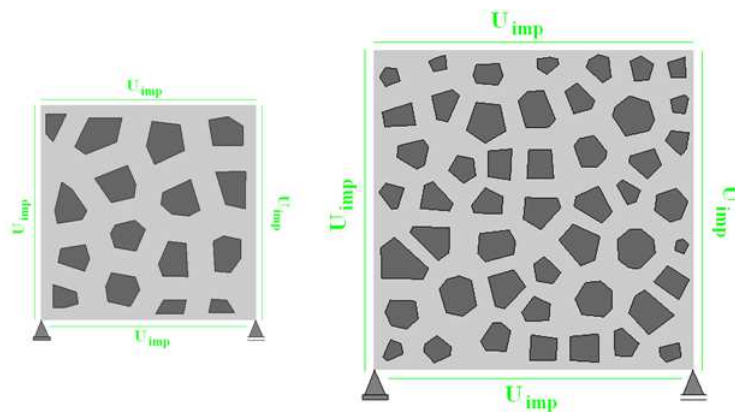


Figura 5.1. Utilizadas en la simulación del ataque sulfático: malla de $6 \times 6 \text{ cm}^2$ (izquierda) y malla de $10 \times 10 \text{ cm}^2$ (derecha).

5.2 Resultados en la malla $6 \times 6 \text{ cm}^2$

5.2.1 Caso de referencia acoplado

En este apartado se va a presentar los resultados de ataque de sulfato sódico con la malla pequeña, $6 \times 6 \text{ cm}^2$. Los parámetros utilizados se ven en las siguientes tablas **Tabla 5.1, Tabla 5.2;**

Parámetros continuo (Matriz y áridos)			
$E_{\text{ÁRIDOS}}$		70.000 MPa	
E_{MATRIZ}		25.000 MPa	
ν		0,20	
Parámetros juntas entre árido-matriz		Parámetros juntas entre matriz-matriz	
χ_0	2 MPa	χ_0	4 MPa
C_0	7 MPa	C_0	14 MPa
$\tan\phi_o$	0,7	$\tan\phi_o$	0,7
$\tan\phi_r$	0,4	$\tan\phi_r$	0,4
G_F^I	0,03 N/mm	G_F^I	0,06 N/mm
G_F^{II}	0,3 N/mm	G_F^{II}	0,6 N/mm
σ_{dil}	40 MPa	σ_{dil}	40 MPa

Tabla 5.1 Parámetros del problema mecánico.

Parámetros de Difusión/Reacción	
D_1	1.70×10^{-3} (cm ² /d)
k	2×10^{-5} (m ³ /(mol·d))
q	3
f	0.05
w/c	0.5
α	0.9
D_0/D_1	5×10^{-2}
β_D	1.5
α_s	1.33×10^{-4}
$[C_3A]$	200 (mol/m ³)

Tabla 5.2 Parámetros del problema químico/difusivo.

En la Figura 5.2 se presentan los resultados de la evolución del ingreso de los sulfatos en la muestra (izquierda) y de la concentración de etringita (derecha) para cuatro diferentes edades. En los gráficos de la izquierda se observa el frente de ingreso de los sulfatos en la fase de mortero desde los cuatro bordes hacia el centro de la muestra. En esta simulación se aprecia que para la última edad graficada (1133 días) prácticamente todo el mortero se encuentra con una concentración de sulfatos similar a la concentración exterior. Por su parte, el frente de formación de etringita (consecuencia de la penetración de los sulfatos) avanza hacia el centro de la muestra a medida a que pasa el tiempo (Figura 5.2 derecha), y va precipitando de una forma retardada respecto al avance de sulfatos debido a que está regida por una velocidad de reacción (se puede apreciar por ejemplo a los 458 días que los sulfatos prácticamente han alcanzado el centro de la muestra, si bien la etringita sólo ha precipitados en los bordes).

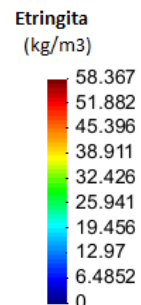
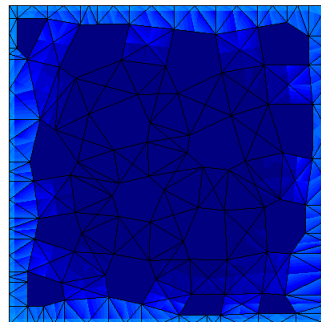
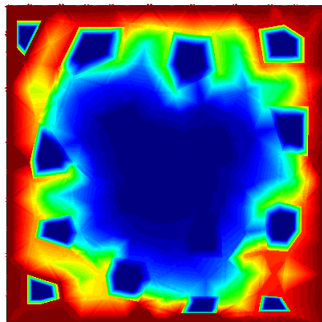
En la Figura 5.3 se presenta la evolución de la deformación de la malla (izquierda) y del estado de fisuración(derecha) para cuatro diferentes edades (en los gráficos de la derecha el espesor de línea representa la energía disipada en las juntas en procesos de fractura, en color rojo si está activa y en azul en descarga elástica). Se puede apreciar en la misma que la fisuración comienza en las esquinas de la muestra en juntas de interfase árido-mortero (Figuras 5.3 a y b). Luego va evolucionando una fisuración perimetral que para el tiempo de 1133 días prácticamente ha formado una línea cerrada (spalling).

Se puede apreciar la correlación de los resultados de las Figuras 5.2 y 5.3, ya que al producirse una conexión de la fisuración con los bordes de la muestra, la modelización acoplada acentúa la influencia de las fisuras como canales preferenciales de penetración, lo que se traduce en un aumento de la producción de etringita e incremento de volumen, y en consecuencia un mayor grado de fisuración interna y degradación de la muestra.

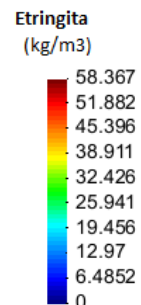
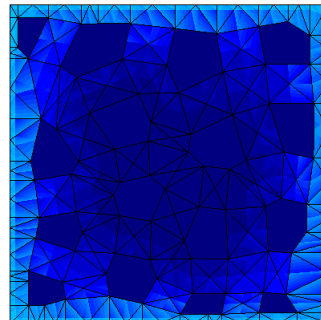
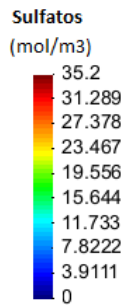
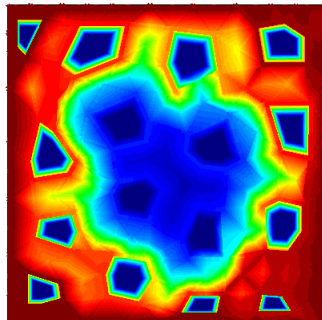
En los resultados a 458 días se ve claramente la formación de la fractura principal perimetral, y a partir de esta edad se puede apreciar como aumenta la fisuración hacia el interior de la muestra y al alcanzar los 1133 días se aprecia que la fisuración rodea completamente cada árido (disgregación árido-mortero), a la vez que entran en descarga las juntas de mortero que unen la fisuración entre áridos. La simulación captura correctamente la fisuración y el spalling (con la consiguiente reducción de área efectiva de la muestra) observados en los experimentos, tal como puede apreciarse en la Figura 5.4 donde se presentan la malla deformada de la simulación numérica (izquierda) y el estado de una muestra real (derecha) extraída de Al-Amoudi, O. (2002).

Todo el proceso señalado se verá con mayor claridad en el apartado 5.3 en el que se analiza una malla de mayor tamaño, de $10 \times 10 \text{ cm}^2$, y se comparan resultados desacoplados y acoplados.

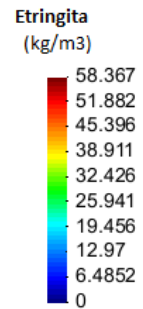
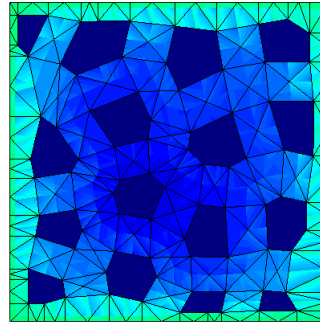
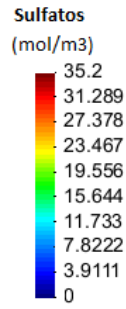
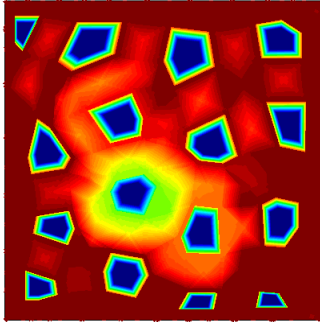
a) 257 días



b) 317 días



c) 458 días



d) 1133 días

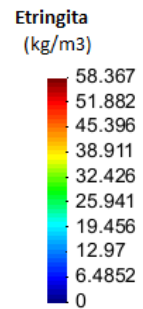
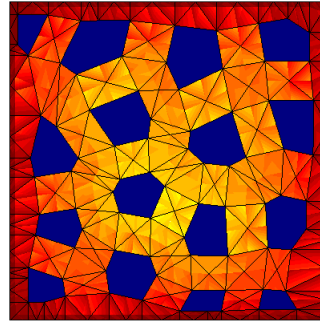
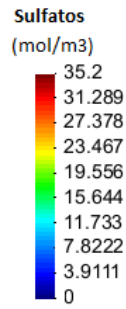
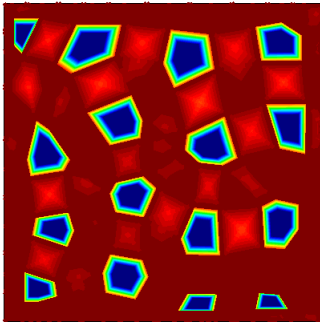
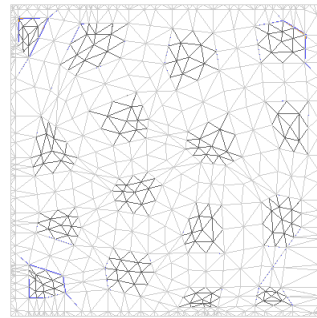
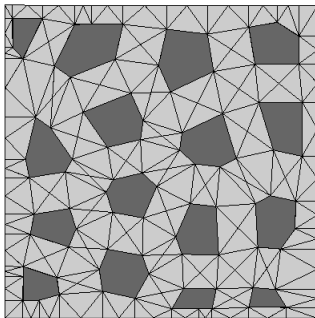
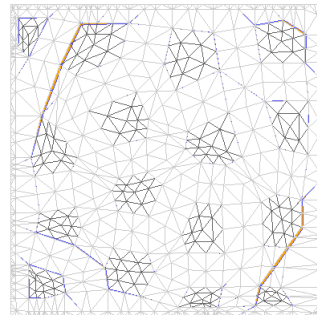
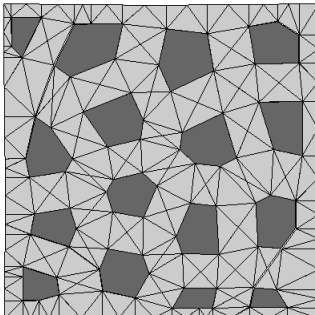


Figura 5.2. Evolución de la penetración de los sulfatos (izquierda) y de la concentración de etringita(derecha) para valores de tiempo: a) 257 días, b)317 días, c)458 días y d)1133 días

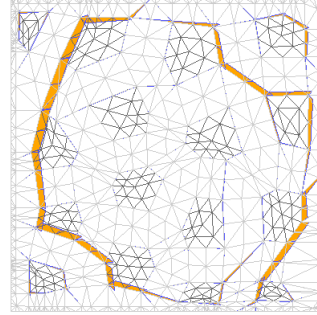
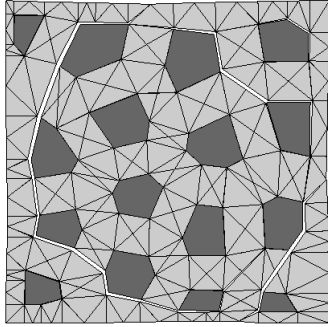
a) 257 días



b) 317 días



c) 458 días



d) 1133 días

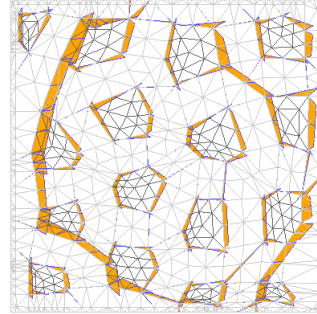
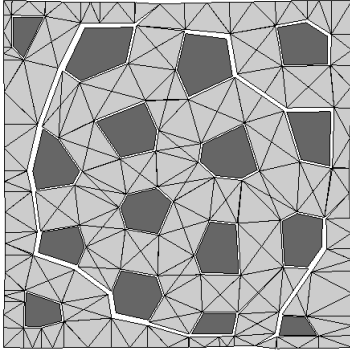


Figura 5.3 Evolución de la malla deformada (izquierda), (factor de magnificación= 9) y del estado de fisuración(derecha) para los siguientes valores de tiempo: a) 257 días, b)317 días, c)458 días y d)1133 días.

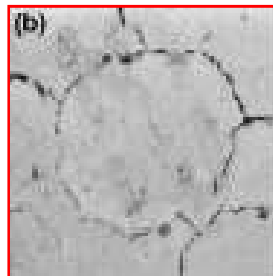


Figura 5.4.Malla deformada de la simulación numérica (izquierda) y muestra real (derecha) extraída de la referencia Al-Amoudi, O. (2002).

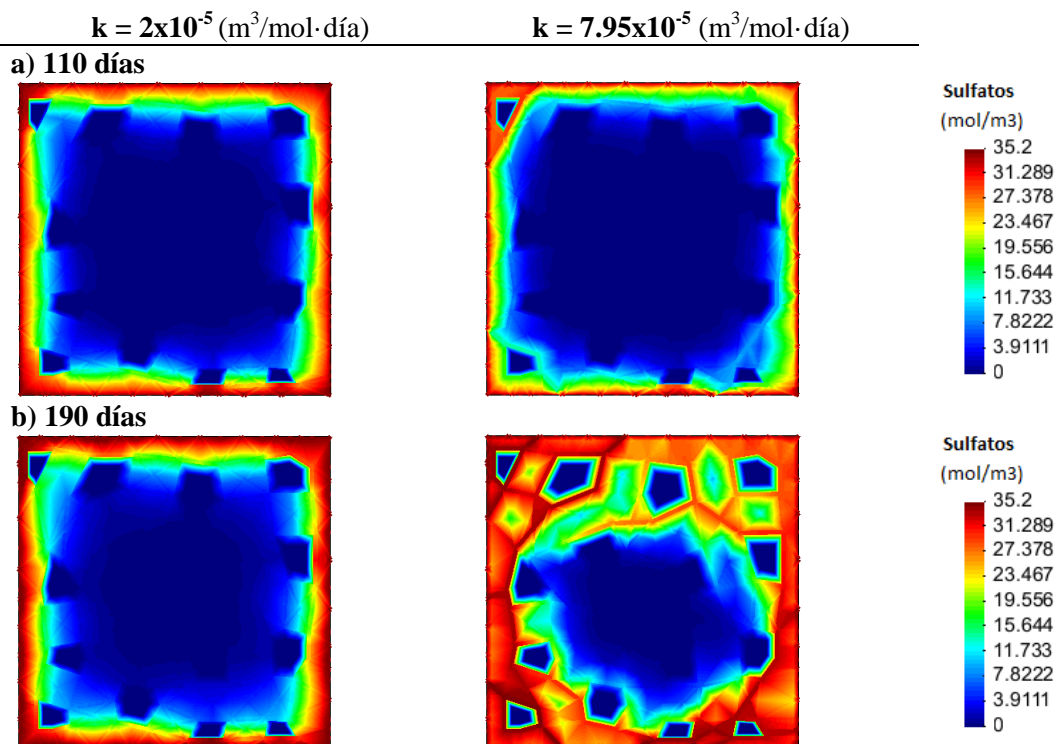
5.2.2 Influencia de la velocidad de la reacción química

Para analizar la influencia de la velocidad de reacción, en este apartado se va a comparar el caso anterior con un parámetro $k=2 \times 10^{-5}$ ($\text{m}^3/\text{mol} \cdot \text{día}$), con un nuevo caso con una $k=7.95 \times 10^{-5}$ ($\text{m}^3/\text{mol} \cdot \text{día}$). Además, se incorpora en este caso, el efecto del envejecimiento en el modelo mecánico (explicado en el apartado **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**). Si bien no son directamente comparables al añadir la variable del envejecimiento en la parte mecánica del nuevo caso, sí permite apreciar el efecto aproximado de elevar unas cuatro veces la velocidad de la reacción. En la tabla 5.3 se presentan los nuevos parámetros de junta que tienen en cuenta el efecto del envejecimiento.

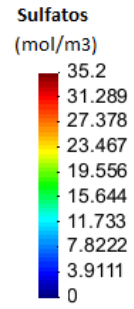
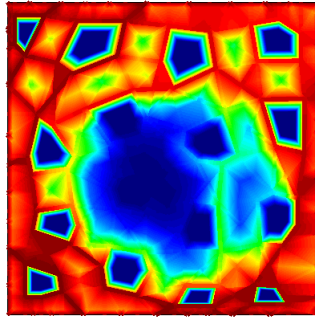
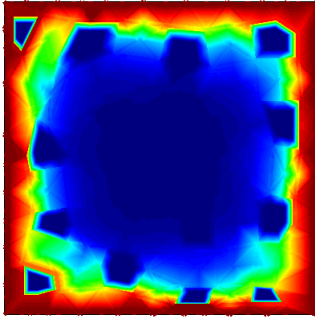
Parámetros juntas entre árido-matriz		Parámetros juntas entre matriz-matriz	
p_p, p_c, p_{GF}	0.4, 0.5, 0.8	p_p, p_c, p_{GF}	0.4, 0.5, 0.8
K_p, K_c, K_{GF}	1.0, 1.0, 1.0	K_p, K_c, K_{GF}	1.0, 1.0, 1.0

Tabla 5.3. Parámetros del problema mecánico para la junta con comportamiento de envejecimiento.

En la Figura 5.5 se comparan los resultados de la evolución del ingreso de los sulfatos en la muestra en el caso de referencia (izquierda) y en el nuevo caso con mayor velocidad de reacción (derecha) para cuatro diferentes edades. En la Figura 5.6 se muestra la comparación de resultados de los mismos casos para la concentración de etringita. Se puede apreciar en estas figuras como al aumentar la velocidad de reacción el proceso de evolución del fenómeno se acelera por lo cual se han tomado más bajas las edades de comparación. En la Figura 5.7 se presenta la evolución de la deformación de la malla (izquierda) y del estado de fisuración (derecha) del nuevo caso $k=7.95 \times 10^{-5} \text{ (m}^3/\text{mol}\cdot\text{día)}$, para las cuatro diferentes edades.



c) 232 días



d) 257 días

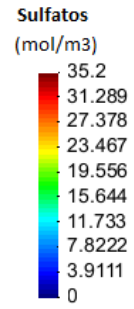
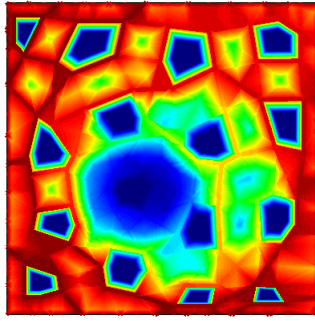
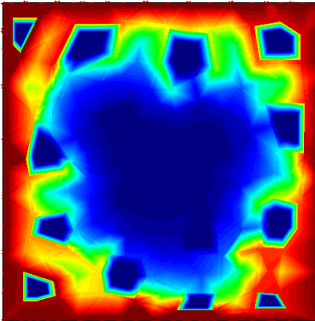
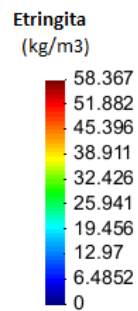
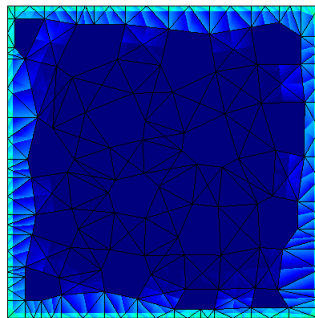
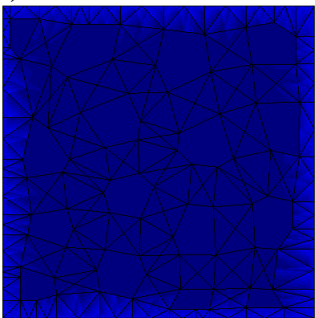


Figura 5.5. Evolución de la penetración de los sulfatos en el caso de referencia (izquierda) y del nuevo caso(derecha) para valores de tiempo: a) 110 días, b) 190 días, c) 232 días y d) 257 días.

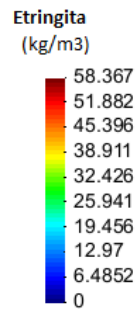
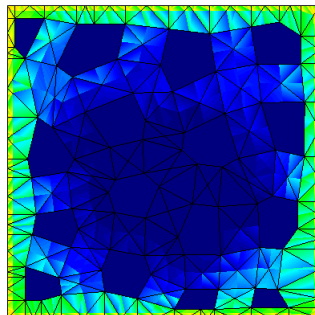
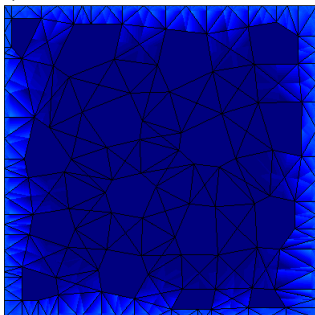
$k = 2 \times 10^{-5} \text{ (m}^3/\text{mol} \cdot \text{día)}$

$k = 7.95 \times 10^{-5} \text{ (m}^3/\text{mol} \cdot \text{día)}$

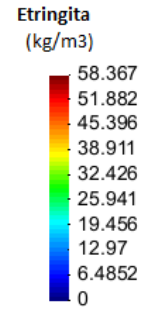
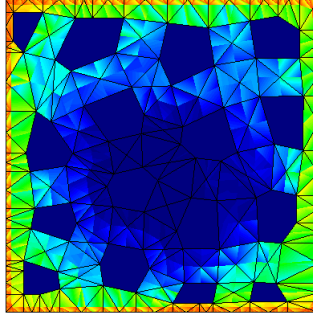
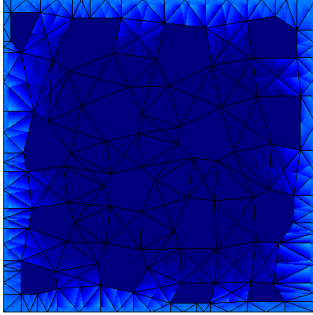
a) 110 días



b) 190 días



c) 232 días



d) 257 días

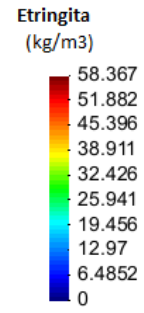
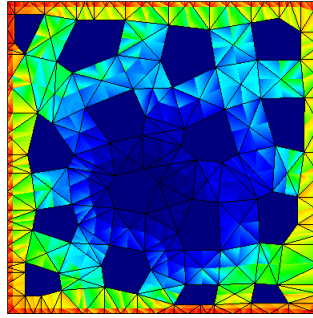
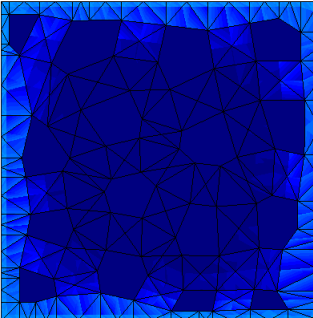
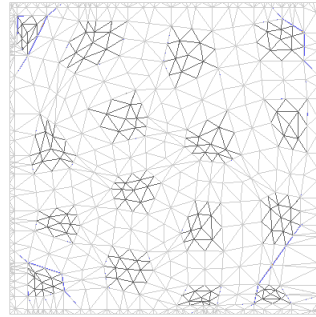
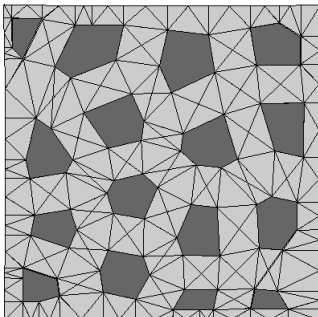


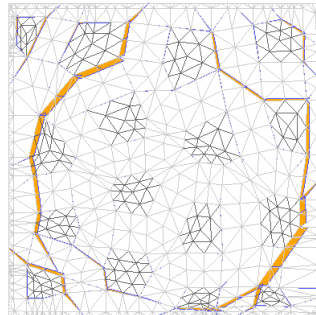
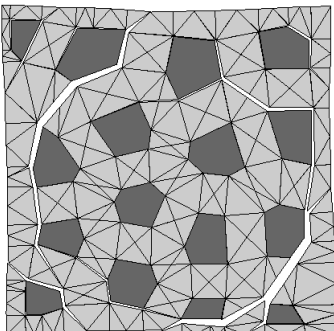
Figura 5.6 Evolución de la concentración de etringita en el caso de referencia (izquierda) y del nuevo caso(derecha) para valores de tiempo: a) 110 días, b) 190 días, c) 232 días y d) 257 días.

$$k = 7.95 \times 10^{-5} \text{ (m}^3\text{/mol}\cdot\text{día)}$$

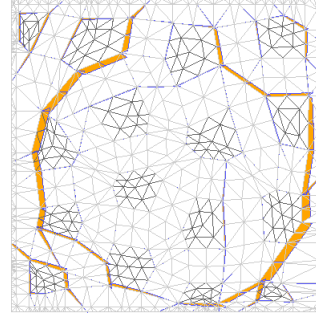
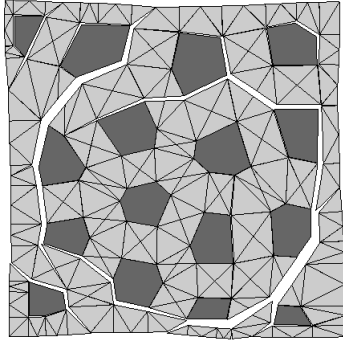
a) 110 días



b) 190 días



c) 232 días



d) 257 días

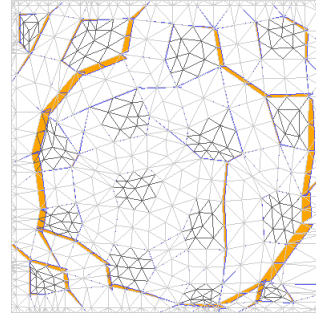
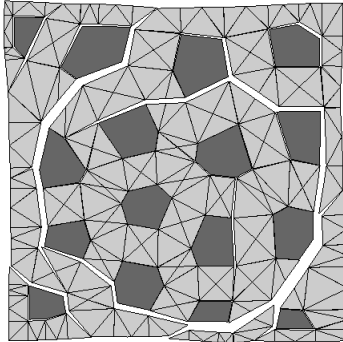


Figura 5.7. Evolución de la malla deformada (izquierda), (factor de magnificación= 11) y del estado de fisuración (derecha) del nuevo caso $k=7.95 \times 10^{-5} (\text{m}^3/\text{mol} \cdot \text{día})$, para los siguientes valores de tiempo: a) 110 días, b) 190 días, c) 232 días y d) 257 días.

Al formarse etringita de forma más acelerada a medida que penetran los sulfatos, como puede apreciarse en la Figura 5.6, aumenta el proceso expansivo y el avance de la fisuración, todo lo cual potencia una evolución mucho más acelerada del proceso de deterioro debido al acoplamiento del proceso difusivo/reactivo y del proceso mecánico.

Se puede apreciar en la Figura 5.5 como la fisuración temprana del nuevo caso propicia una mayor penetración de sulfatos por estas vías preferenciales de ingreso, que ya se aprecian a los 190 días con ramas de color rojo hacia el interior de la muestra que reflejan una mayor concentración de sulfatos en coincidencia con tendencias de fisuración (ver fisuración de Figura 5.7b y en adelante del nuevo caso, en comparación con estas edades del caso de referencia de Figura 5.3a que no presenta fisuración a estas edades).

Por su parte, el efecto de envejecimiento que proporciona una mayor resistencia de las juntas con el paso del tiempo, en este caso queda oculto a causa de la preponderancia del efecto de la velocidad de reacción en la formación de la etringita.

5.3 Resultados en la malla de 10x10 cm²

5.3.1 Comparación de los casos desacoplado y acoplado

Se presentan los resultados de las simulaciones numéricas en régimen acoplado y desacoplado. Se emplean los mismos parámetros que en la malla de 6x6 cm² presentados en las Tablas 1 y 2.

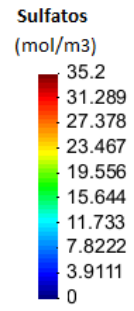
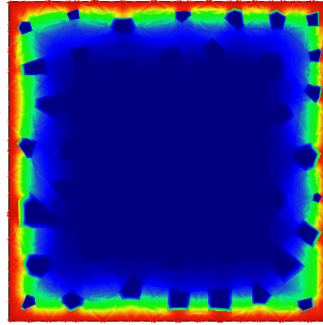
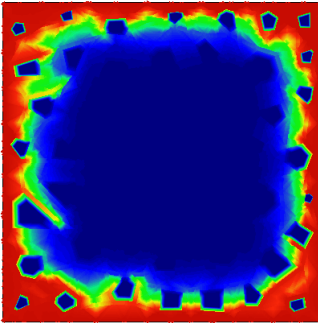
En la Figura 5.8 se comparan los resultados de la evolución del ingreso de los sulfatos en el caso acoplado (izquierda) y el desacoplado (derecha) para cuatro diferentes edades. Desde el primer gráfico a la edad de 272 días ya se pueden apreciar las diferencias: mientras en el caso desacoplado el ingreso de sulfatos es más atenuado y uniforme desde los bordes hacia el centro de la muestra, en el caso acoplado la incidencia de la penetración a través de las vías preferenciales de las juntas además de la fuerte aceleración del proceso genera ramificaciones hacia el interior siguiendo las trayectorias fisuradas. Como consecuencia, para la última edad graficada, en el caso acoplado los sulfatos han ingresado completamente en la muestra, mientras que en el caso desacoplado aún no hay ingreso en la zona central. Este efecto se refleja también en los gráficos que se muestran en la Figura 5.9 donde se comparan los resultados de los mismos casos para la concentración de etringita. Se observa que el frente de formación de etringita (consecuencia de la penetración de los sulfatos) avanza hacia el centro de la muestra a medida que pasa el tiempo, de una forma más acentuada en el análisis acoplado.

En las Figuras 5.10 y 5.11 se comparan la evolución de la deformación de la malla y del estado de fisuración, respectivamente, en ambos casos: acoplado (izquierda) y desacoplado (derecha). Se puede apreciar la correlación de los resultados de las Figuras 5.9 de concentración de etringita y las Figuras 5.10 y 5.11 de fisuración, ya que al producirse una conexión de la fisuración con los bordes de la muestra, la modelización acoplada acentúa la influencia de las fisuras como canales preferenciales de penetración, lo que redundará en un aumento de la producción de etringita e incremento de volumen, y en consecuencia un mayor grado de fisuración interna y degradación de la muestra.

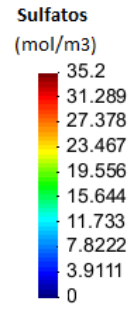
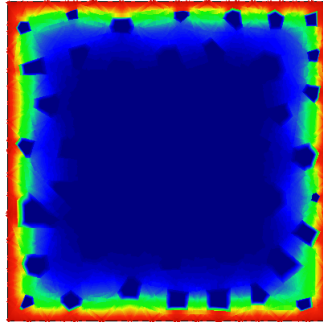
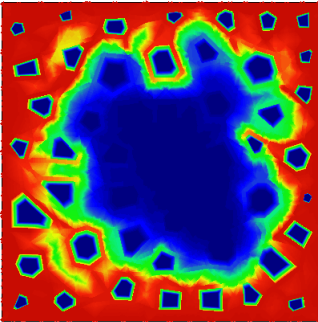
ACOPLADO

DESACOPLADO

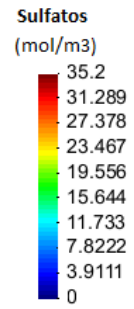
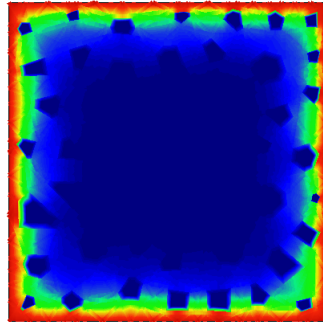
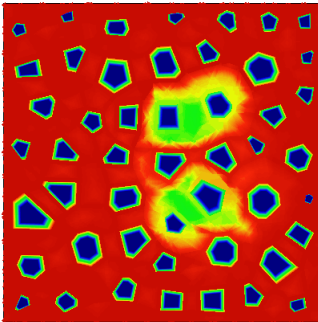
a) 272 días



b) 333 días



c) 508 días



d) 1008 días

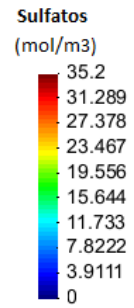
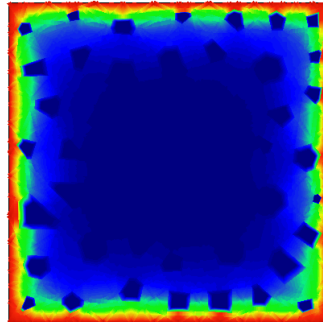
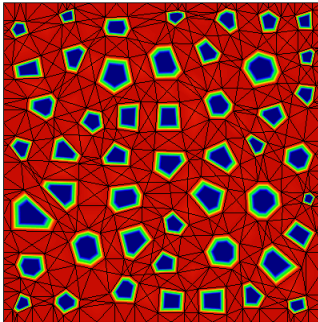


Figura 5.8. Evolución de la penetración de los sulfatos en el caso acoplado (izquierda) y en el caso desacoplado (derecha) para valores de tiempo: a) 272 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días

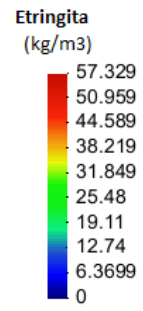
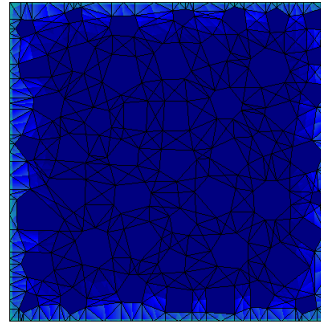
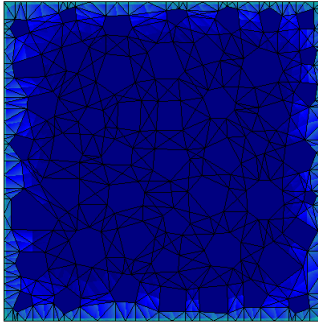
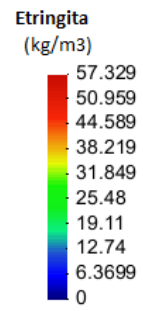
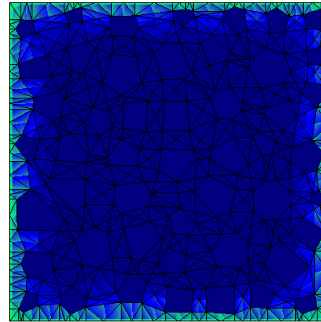
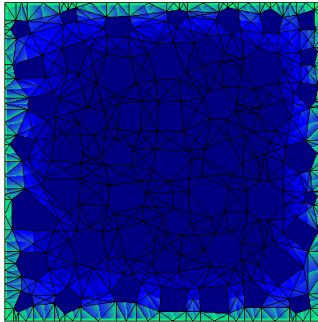
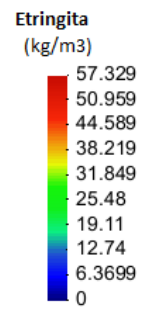
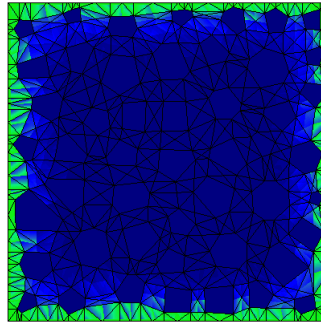
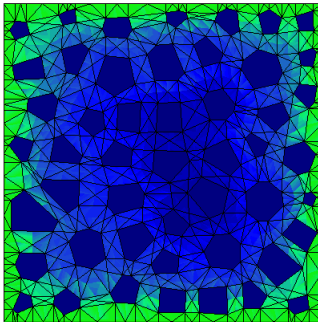
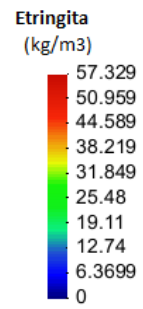
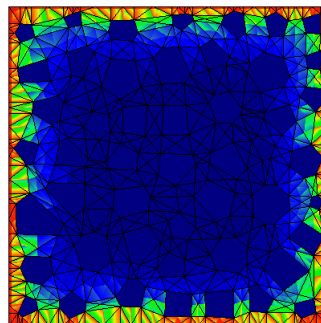
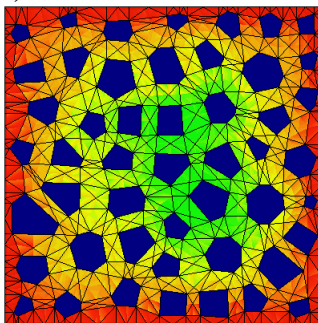
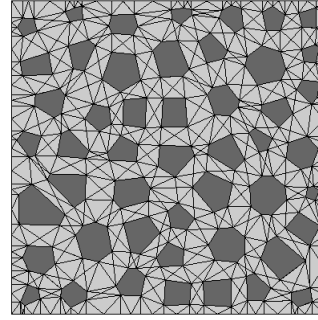
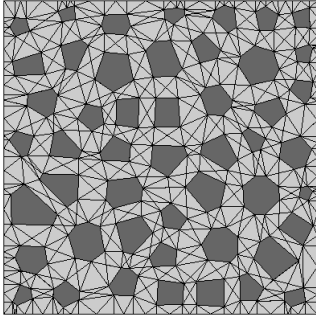
ACOPLADO**DESACOPLADO****a) 272 días****b) 333 días****c) 508 días****d) 1008 días**

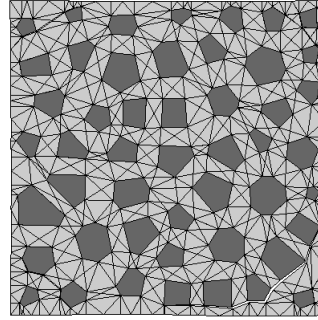
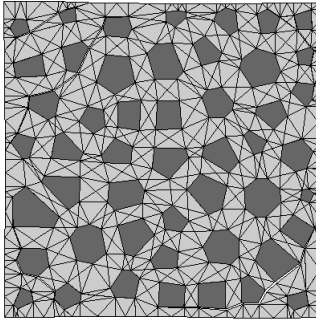
Figura 5.9. Comparación de resultados de sulfato entre cálculo acoplado y cálculo desacoplado, para los días; a) 272 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días.

ACOPLADO**DESACOPLADO**

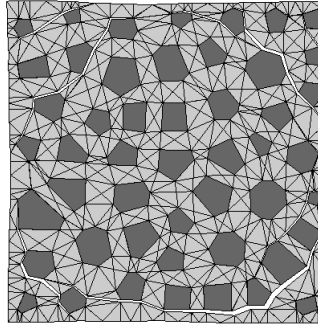
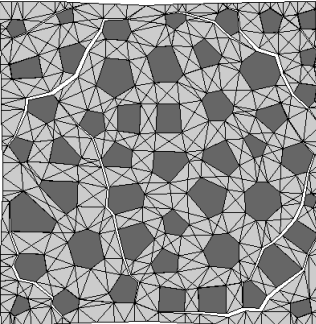
a) 272 días



b) 333 días



c) 508 días



d) 1008 días

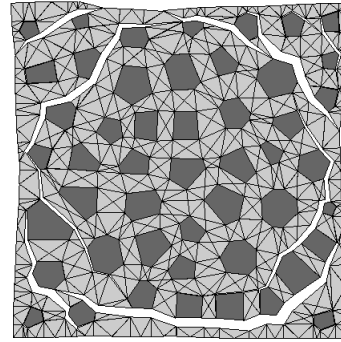
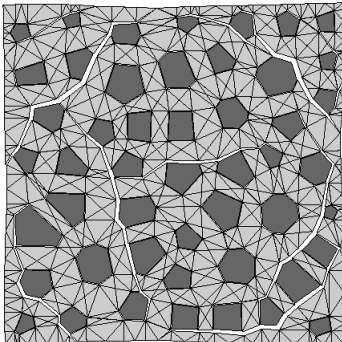


Figura 5.10. Evolución de la malla deformada (Factor de magnificación= 8) en el caso acoplado (izquierda) y en el caso desacoplado (derecha) para valores de tiempo: a) 272 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días.

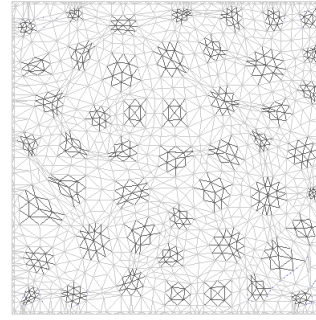
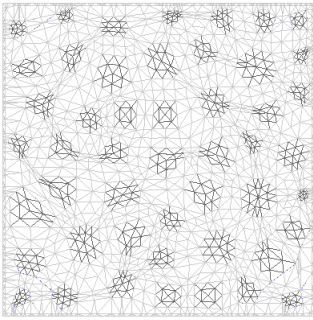
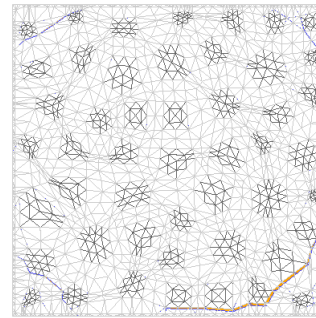
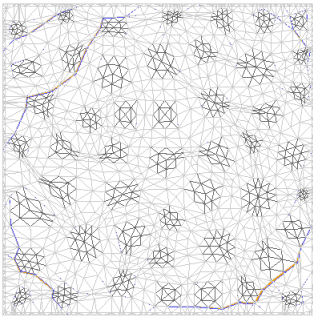
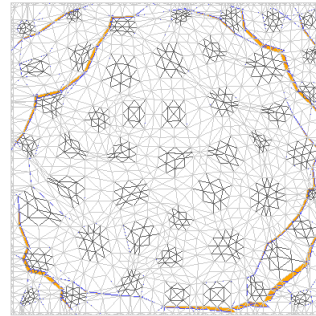
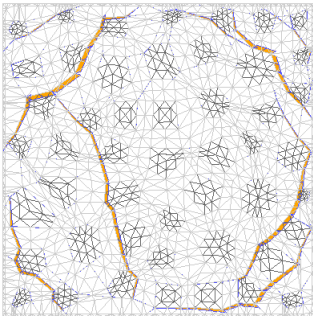
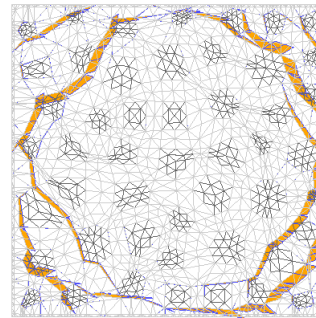
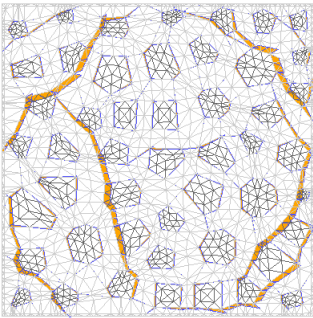
ACOPLADO**DESACOPLADO****a) 272 días****b) 333 días****c) 508 días****d) 1008 días**

Figura 5.11. Evolución del estado de fisuración en el caso acoplado (izquierda) y en el caso desacoplado (derecha) para valores de tiempo: a) 272 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días.

Por tanto, los resultados entre los casos acoplado y desacoplado se diferencian básicamente por el papel que juegan las juntas. Al calcular de forma acoplada, a medida que va precipitando la etringita, el hormigón empieza a fracturar, este va abriendo nuevas fracturas, y estas se convierten en los nuevos frentes de penetración, y por tanto, los sulfatos llegan más rápido al interior de la muestra. Por tanto, se podría concluir que los cálculos acoplados nos dan una aproximación mejor del caso real, ya que relaciona la degradación mecánica, con la difusión/reacción/precipitación de los sulfatos.

5.3.2 Efecto del llenado de poros en el proceso de difusión

Como se ha comentado en el apartado 4.2 del Capítulo 4, el modelo químico/difusivo tiene en cuenta la disminución de la difusividad debida al efecto del “llenado de poros” por la precipitación de las especies de la reacción. Este efecto puede apreciarse en los gráficos de la penetración de los sulfatos del cálculo desacoplado del apartado anterior (Figura 5.8 derecha): una vez alcanzada la distribución de sulfatos en la primera edad graficada, se observa que con el paso del tiempo y hasta los 1008 días del análisis, la configuración prácticamente permanece invariable.

La explicación de este efecto es la siguiente: los cuatro bordes de la muestra alcanzan valores de concentración similares al líquido, y debido a que la capilaridad actualizada tiene en cuenta el aumento de estringita esta tiende a anularse en los bordes. Como puede apreciarse en la Figura 4.1 del capítulo anterior, la variación del coeficiente de difusión depende de la relación entre la capilaridad actualizada y la inicial que para valores bajos tiende a ser igual al coeficiente D_0 . Como el valor adoptado de D_0 en este cálculo es muy bajo respecto del de D_1 (de 5×10^{-2} , ver relación en la Tabla 5.1), se produce un efecto “tapón” en los bordes que cierra la posibilidad de ingreso del sulfato del exterior.

Este efecto, que lógicamente también ocurre en el caso acoplado, queda enmascarado debido al gran aumento de difusión a través de las fisuras contemplado en este caso, tal como puede apreciarse en los gráficos de la Figura 5.8 izquierda.

A fin de poner de manifiesto este comportamiento y la explicación señalada, en este apartado se presenta una comparación del caso desacoplado del apartado anterior con un nuevo caso en el que lo único que se cambia es el valor de la relación D_0 / D_1 que se adopta igual a 1 (es decir que la difusión no varíe durante el proceso y evitar el efecto “tapón”).

En la Figura 5.12 se comparan los resultados de la evolución del ingreso de los sulfatos en el caso desacoplado con $D_0 / D_1 = 5 \times 10^{-2}$ (izquierda) y el desacoplado con $D_0 / D_1 = 1$ (derecha) para cuatro diferentes edades. Se puede apreciar en las figuras de la derecha el avance continuado del ingreso de los sulfatos a diferencia del efecto tapón comentado en el caso anterior. Como cabía esperar este efecto se refleja en los gráficos que se muestran en la Figura 5.13 donde se comparan los resultados de los mismos casos para la concentración de estringita. Se observa que el frente de formación de estringita es más avanzado e intenso en el caso de la derecha.

En las Figuras 5.14 y 5.15 se comparan la evolución de la deformación de la malla y del estado de fisuración, respectivamente, en ambos casos: desacoplado con $D_0 / D_1 = 5 \times 10^{-2}$ (izquierda) y desacoplado con $D_0 / D_1 = 1$ (derecha). Se puede apreciar que el caso con difusión constante muestra una mayor fisuración en el interior de la muestra.

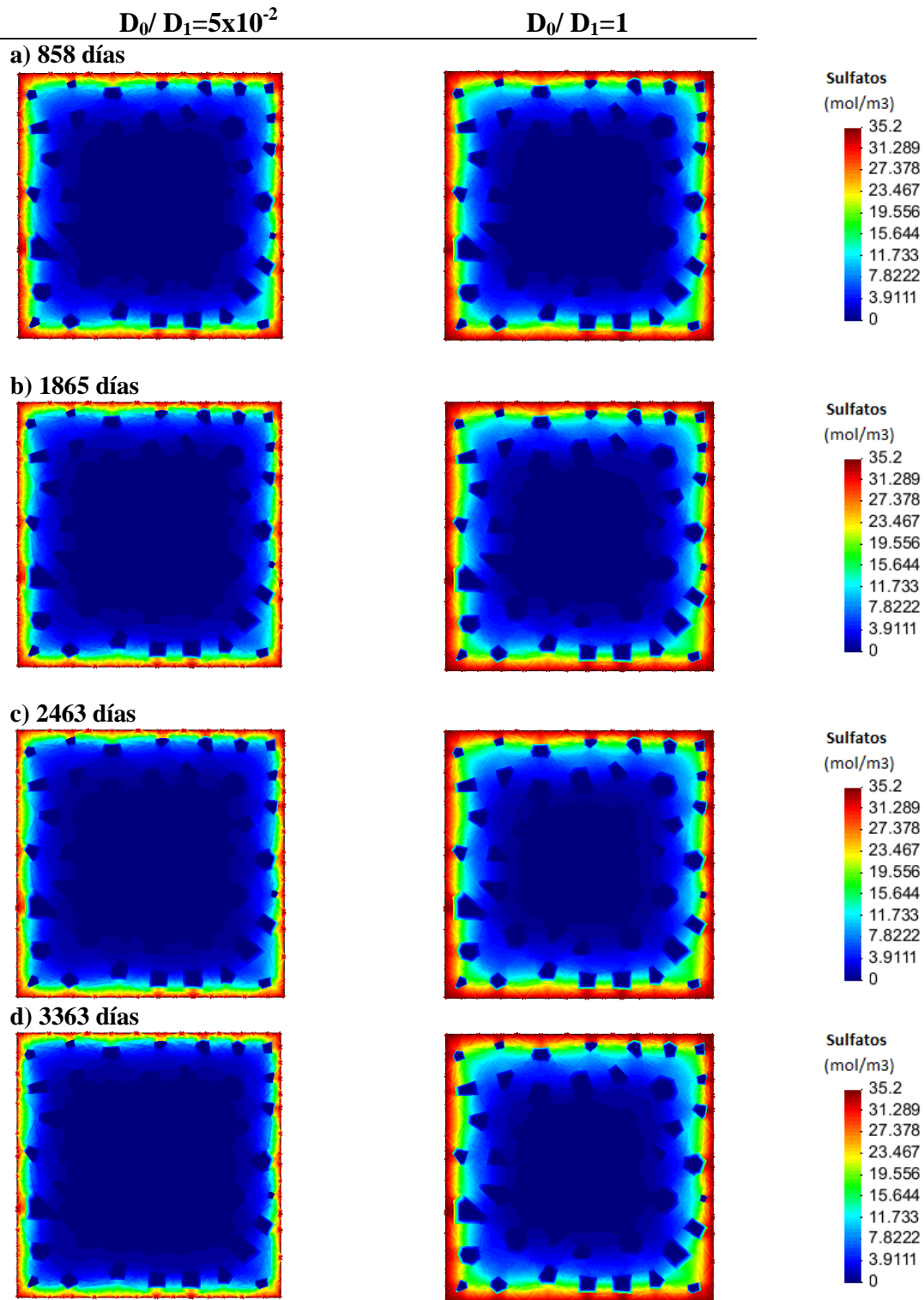
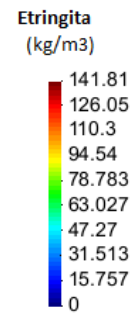
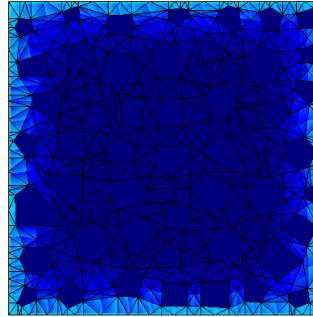
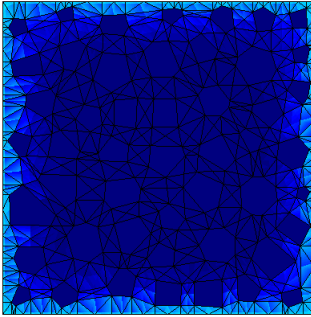


Figura 5.12. Evolución de la penetración de los sulfatos en el caso desacoplado con $D_0/D_1=5 \times 10^{-2}$ (izquierda) y en el caso desacoplado con $D_0/D_1=1$ (derecha) para valores de tiempo: a) 858 días, b) 1865 días, c) 2463 días y d) 3363 días.

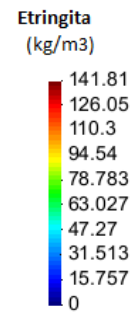
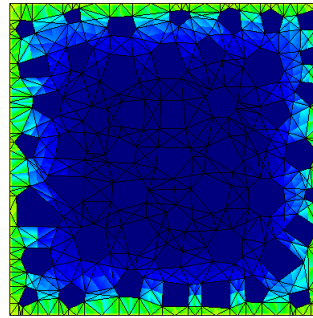
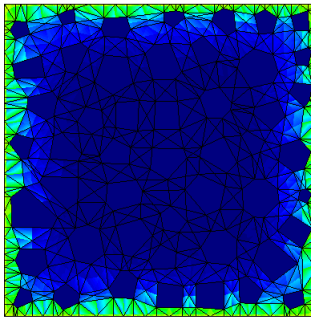
$D_0/D_1=5 \times 10^{-2}$

$D_0/D_1=1$

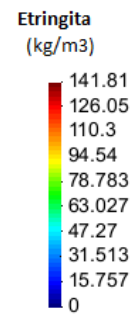
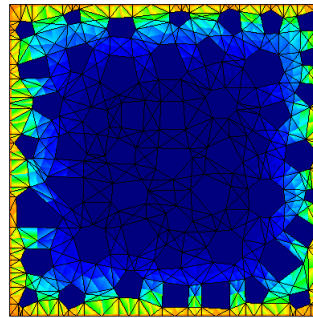
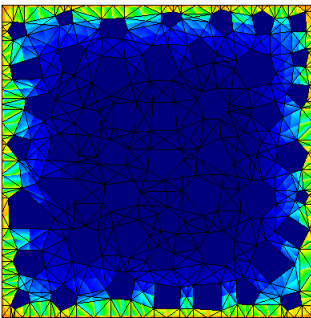
a) 858 días



b) 1865 días



c) 2463 días



d) 3363 días

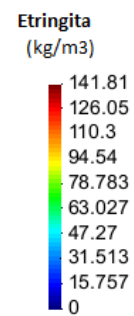
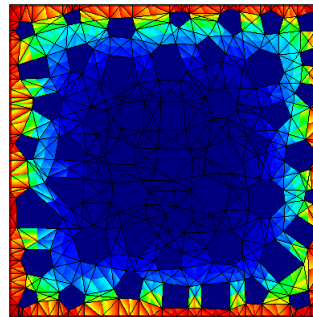
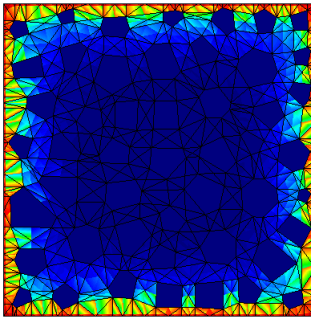
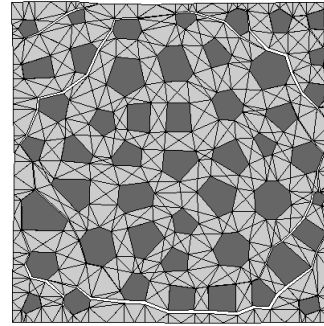
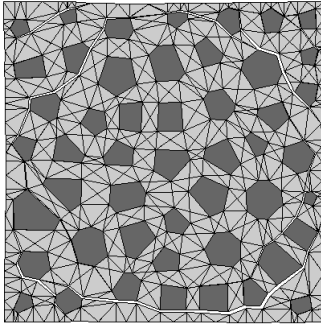


Figura 5.13. Evolución de la concentración de etringita en el caso desacoplado con $D_0/D_1=5 \times 10^{-2}$ (izquierda) y en el caso desacoplado con $D_0/D_1=1$ (derecha) para valores de tiempo: a) 858 días, b) 1865 días, c) 2463 días y d) 3363 días.

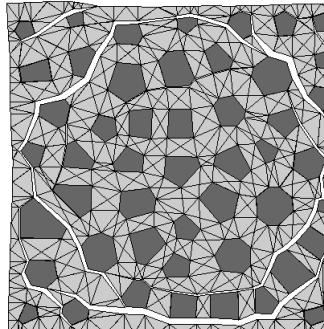
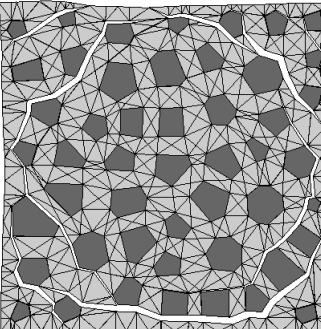
$D_0/D_1=5 \times 10^{-2}$

$D_0/D_1=1$

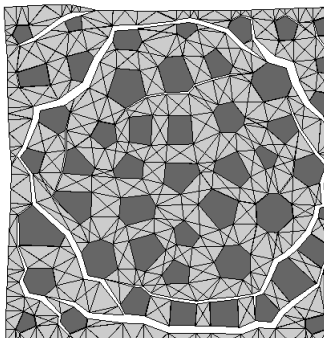
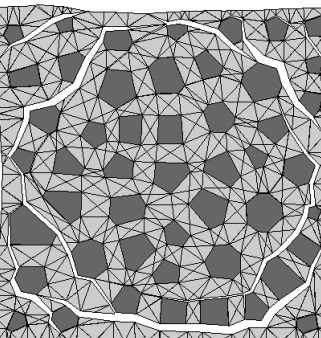
a) 858 días



b) 1865 días



c) 2463 días



d) 3363 días

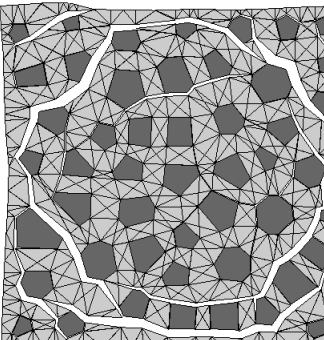
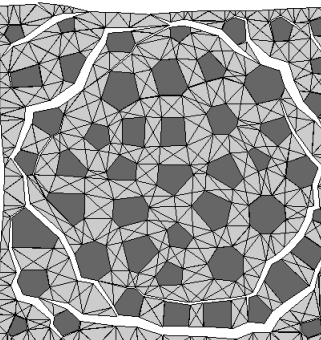
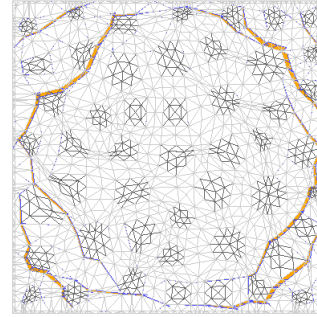
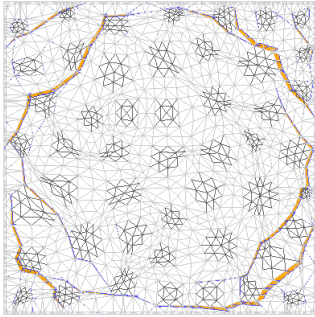


Figura 5.14. Evolución de la malla deformada en el caso desacoplado con $D_0/D_1=5 \times 10^{-2}$ (izquierda) y en el caso desacoplado con $D_0/D_1=1$ (derecha) para valores de tiempo: a) 858 días, b) 1865 días, c) 2463 días y d) 3363 días.

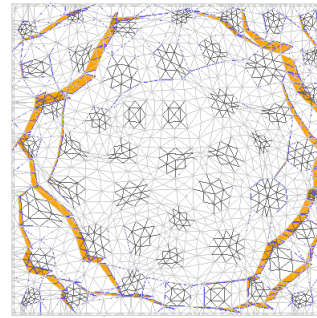
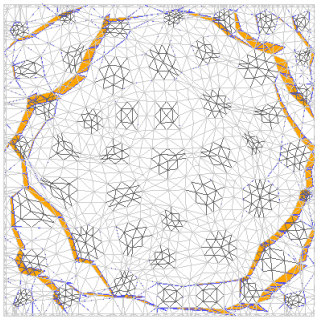
$D_0/D_1=5 \times 10^{-2}$

$D_0/D_1=1$

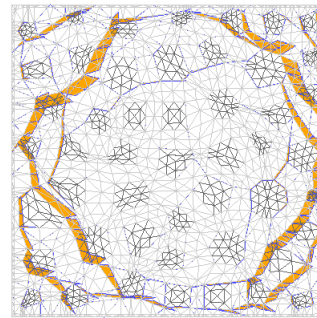
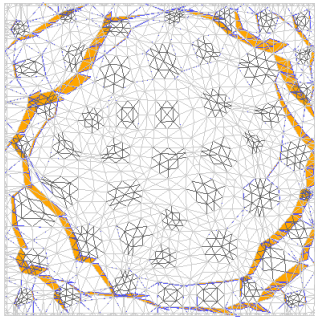
a) 858 días



b) 1865 días



c) 2463 días



d) 3363 días

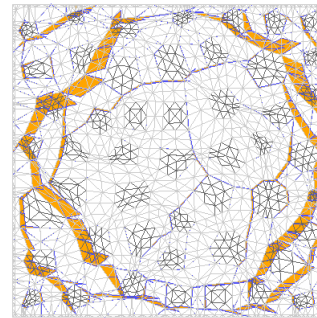
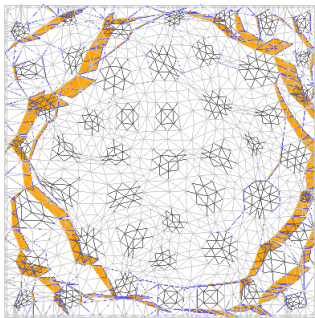


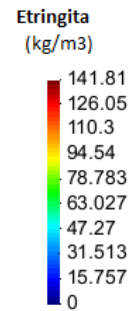
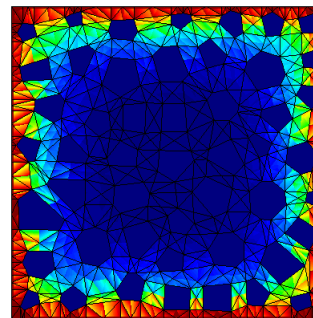
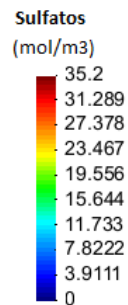
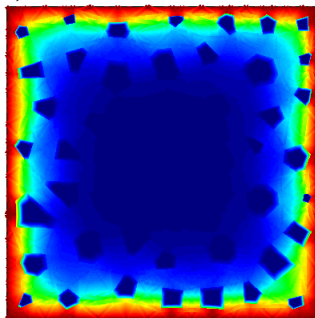
Figura 5.15. Evolución del estado de fisuración en el caso desacoplado con $D_0/D_1=5 \times 10^{-2}$ (izquierda) y en el caso desacoplado con $D_0/D_1=1$ (derecha) para valores de tiempo: a) 858 días, b) 1865 días, c) 2463 días y d) 3363 días.

Se concluye finalmente que el modelo numérico, en función de los valores adoptados para los parámetros D_0 y D_1 , puede generar un efecto de taponamiento debido a la actualización constante del valor de la capilaridad, y por tanto de la difusión.

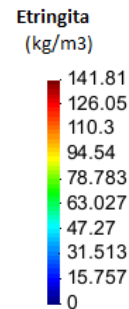
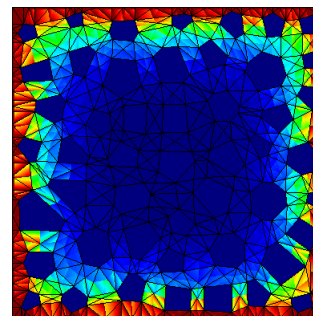
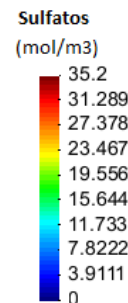
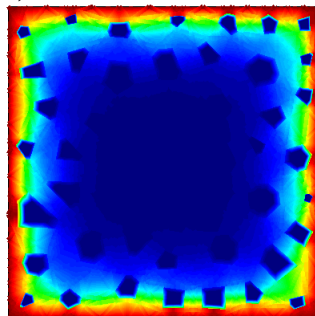
A continuación, se muestran resultados del cálculo para edades más avanzadas del caso donde el coeficiente de difusión se mantiene constante, $D_0/D_1=1$.

En la Figura 5.16 se presentan los resultados de la evolución del ingreso de los sulfatos en la muestra (izquierda) y de la concentración de etringita (derecha) para tres diferentes edades más avanzadas. En la Figura 5.17 se muestran los resultados de la malla deformada (izquierda) y del estado de fisuración(derecha) para tres diferentes edades más avanzadas.

a) 3783 días



b) 4053 días



c) 4653 días

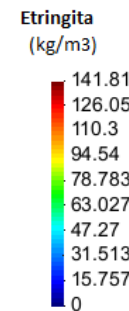
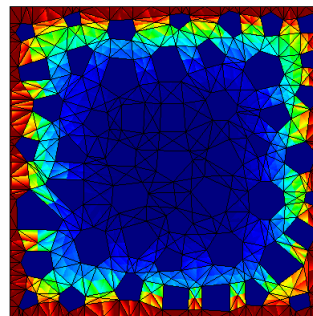
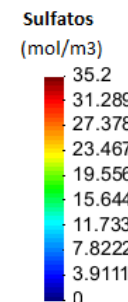
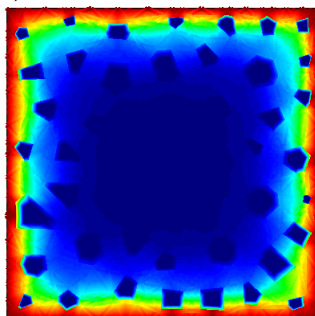
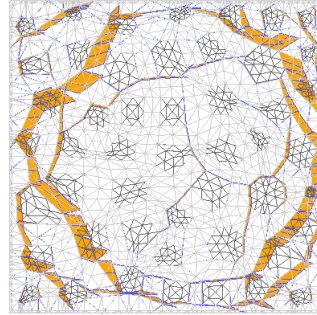
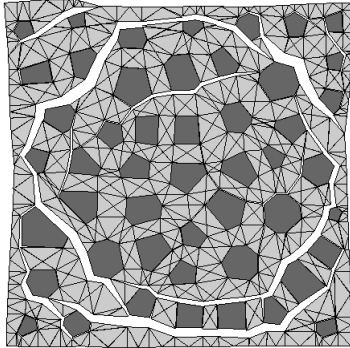


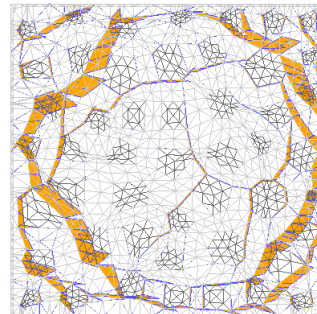
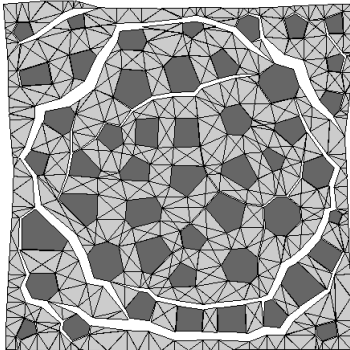
Figura 5.16. Evolución de la penetración de los sulfatos (izquierda) y de la concentración de etringita(derecha) en el caso desacoplado con $D_0/D_1=1$, para valores de tiempo: a) 3783 días, b) 4053 días y c) 4653 días.

Se puede apreciar que a los 4653 días el sulfato aún no ha llegado al interior de la muestra, dado el tamaño de la muestra y sobre todo que una simulación desacoplada no resulta realista de este fenómeno

a) 3783 días



b) 4053 días



c) 4653 días

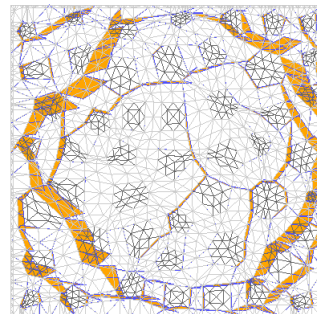
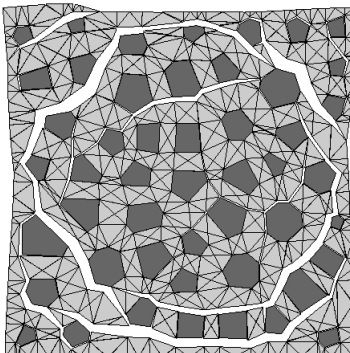


Figura 5.17. Evolución de la malla deformada (izquierda) y del estado de fisuración (derecha) en el caso desacoplado con $D_0/D_1=1$, para valores de tiempo: a) 3783 días, b) 4053 días y c) 4653 días.

5.3.3 Efecto del valor del coeficiente de difusión D_1

En este apartado se va hacer una comparación del caso de referencia con un nuevo caso en que se disminuye en un orden de magnitud el coeficiente de difusión D_1 , que pasa de un valor de $1.70 \times 10^{-3} (\text{cm}^2/\text{d})$, ver Tabla 5.1, a un valor de $1.70 \times 10^{-4} (\text{cm}^2/\text{d})$.

En la Figura 5.18 se comparan los resultados de la evolución del ingreso de los sulfatos en el caso acoplado con menor difusión $D_1=1.70 \times 10^{-4} (\text{cm}^2/\text{d})$ (izquierda) y el caso de mayor difusión $D_1=1.70 \times 10^{-3} (\text{cm}^2/\text{d})$ (derecha) para cuatro diferentes edades. En la

Figura 5.19 se comparan los resultados de los mismos casos para la concentración de etringita.

En las Figuras 5.20 y 5.21 se comparan la evolución de la deformación de la malla y del estado de fisuración, respectivamente, en ambos casos.

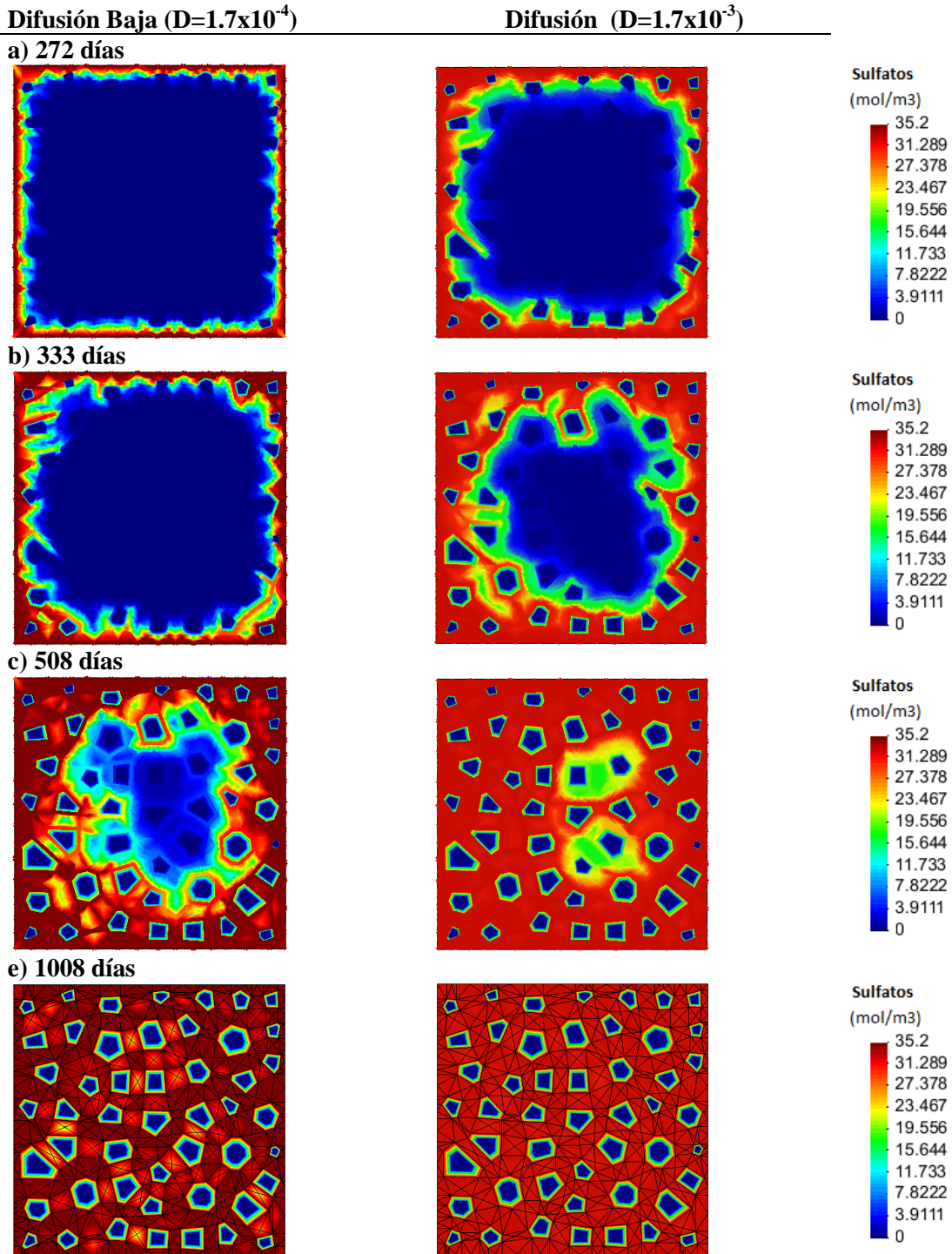
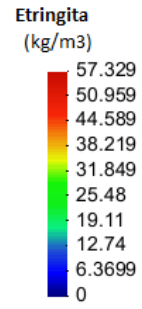
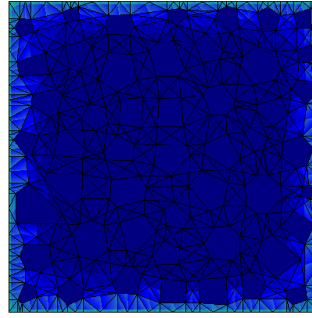
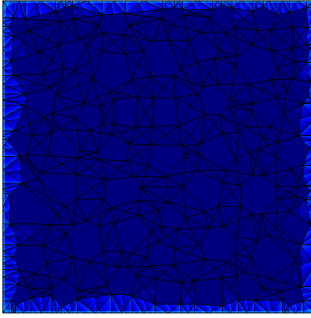


Figura 5.18. Evolución de la penetración de los sulfatos en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-4}$ (izquierda) y en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-3}$ (derecha) para valores de tiempo: a) 72 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días.

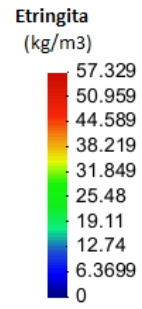
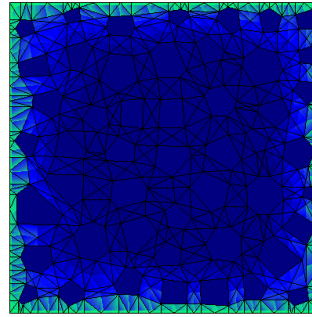
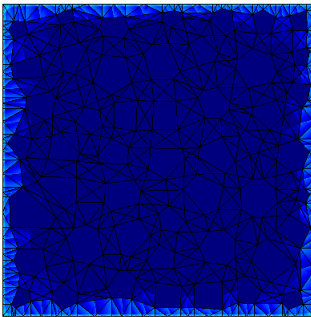
Difusión Baja ($D=1.7 \times 10^{-4}$)

Difusión ($D=1.7 \times 10^{-3}$)

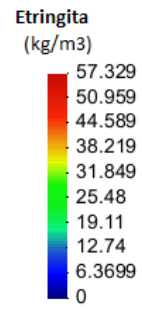
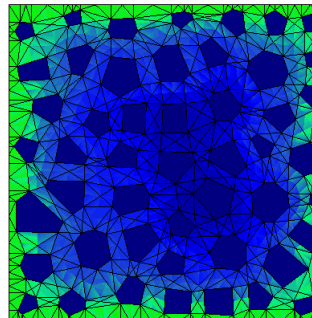
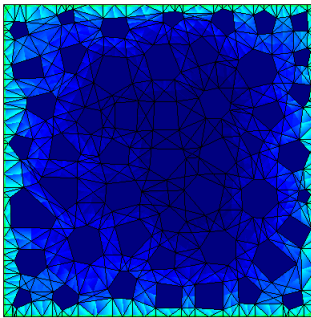
a) 272 días



b) 333 días



c) 508 días



e) 1008 días

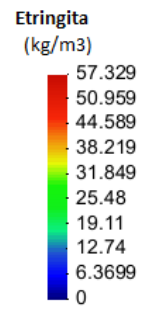
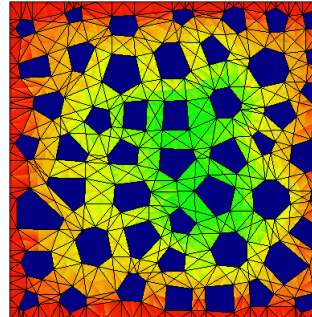
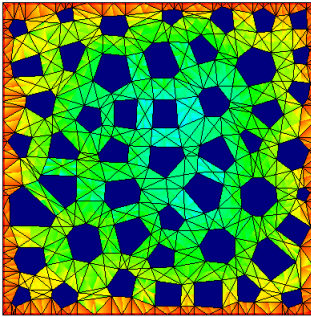
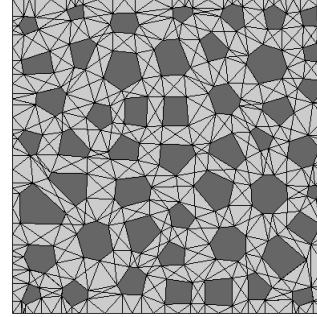
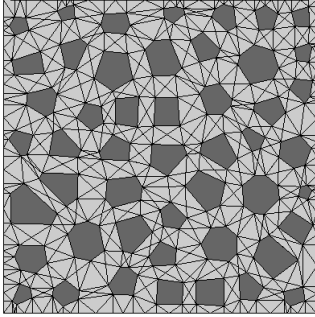


Figura 5.19. Evolución de la concentración de etringita en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-4}$ (izquierda) y en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-3}$ (derecha) para valores de tiempo: a) 72 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días.

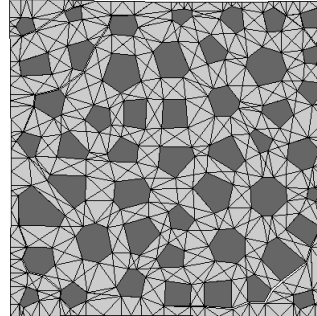
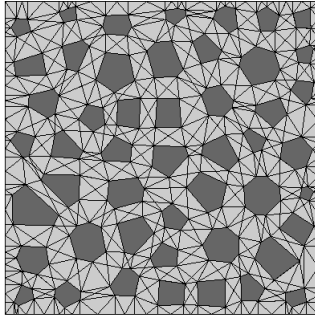
Difusión Baja ($D=1.7 \times 10^{-4}$)

Difusión ($D=1.7 \times 10^{-3}$)

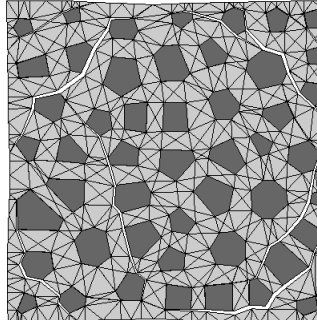
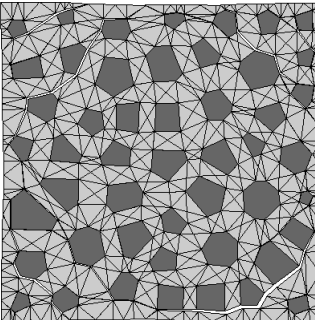
a) 272 días



b) 333 días



c) 508 días



e) 1008 días

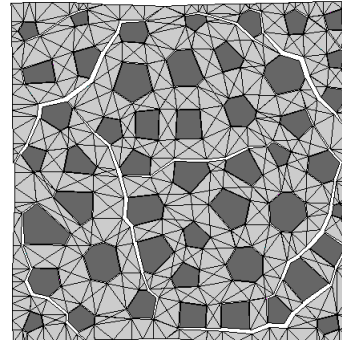
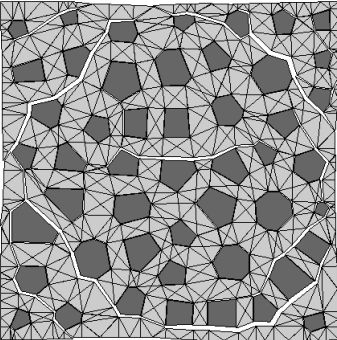
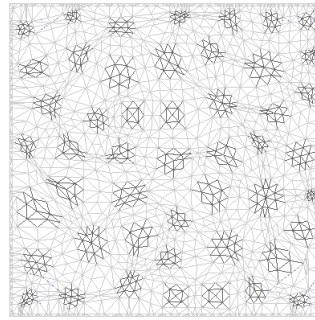
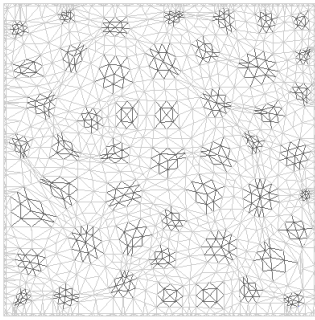


Figura 5.20. Evolución de la malla deformada en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-4}$ (izquierda) y en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-3}$ (derecha) para valores de tiempo: a) 72 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días

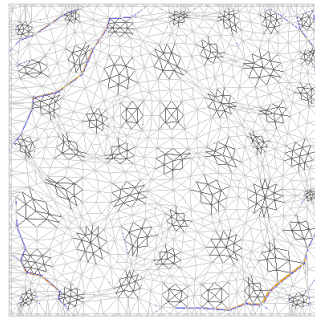
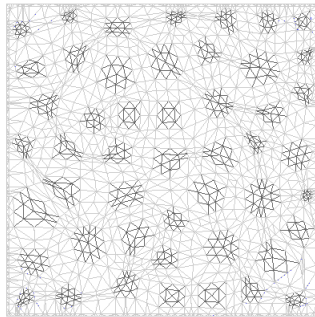
Difusión Baja ($D=1.7 \times 10^{-4}$)

Difusión ($D=1.7 \times 10^{-3}$)

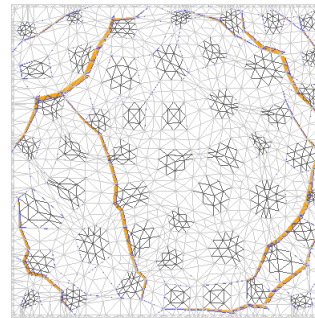
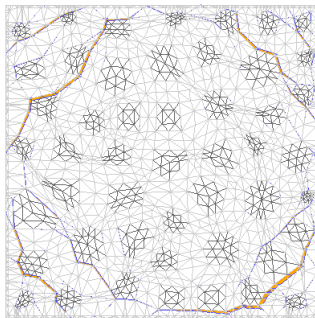
a) 272 días



b) 333 días



c) 508 días



e) 1008 días

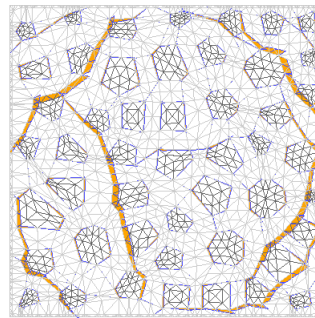
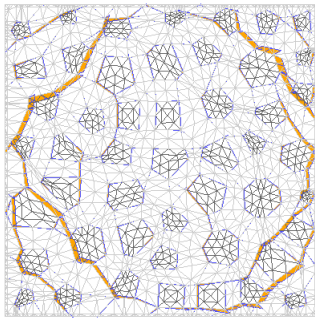


Figura 5.21. Evolución del estado de fisuración en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-4}$ (izquierda) y en el caso acoplado con $D_1=1.7 \times 10^{-3}$ (derecha) para valores de tiempo: a) 72 días, b) 333 días, c) 508 días y d) 1008 días.

6 Resumen, Conclusiones y futuras líneas de investigación

6.1 Resumen

La presente tesina se ha desarrollado en el contexto general del proceso de fractura del hormigón a nivel meso-escala en 2D.

Para ello se ha empleado un modelo numérico meso-estructural basado en la representación explícita de los diferentes componentes que definen el hormigón a nivel meso-escala, como son el los áridos de mayor tamaño y la matriz de mortero que los envuelve. Estas fases se han discretizado mediante una malla de Elementos Finitos y se les ha considerado un comportamiento elástico lineal o viscoelástico, por lo que toda la no linealidad y la capacidad de fallo del material se consigue a partir de la introducción en el modelo de una tercera fase de tipo superficial. En esta línea se emplean juntas de espesor nulo equipadas con una ley constitutiva elasto-plástica basada en conceptos de mecánica de fractura no lineal y energías de fracturas, y que es controlada por una sola variable de historia (el trabajo consumido en el proceso de fractura, W_{cr}). Estas juntas, que representan las zonas más débiles del material, se insertan sistemáticamente a lo largo de planos potenciales de fractura definidos previamente en dos familias diferenciadas, una primera a lo largo de los contactos árido-matriz y una segunda a través de la propia matriz, de cara a conectar los áridos con sus contiguos y permitir que la fisuración se extienda a lo largo de la muestra.

Esta metodología ha sido desarrollada y validada en numerosos trabajos llevados a cabo previamente por el grupo de Mecánica de Materiales de la UPC, habiendo llevado a cabo la modelización para rocas, hormigón o huesos sometidos a diferentes situaciones de carga, tanto en 2D (López *et al.* 2008a, 2008b; Rodríguez 2012; Rodríguez *et al.* 2012; Rodríguez *et al.* 2011a y 2011b; Garolera *et al.* 2005; Ciancio *et al.* 2003; Roa *et al.* 2002) como en 3D (Caballero 2005).

El objetivo de esta tesina se ha centrado en verificar la capacidad del modelo para reproducir el comportamiento del hormigón sometido a la acción del ataque sulfático externo.

Los resultados se han centrado en diversos casos de estudio, con dos mallas distintas, una de $6 \times 6 \text{ cm}^2$ y la otra de $10 \times 10 \text{ cm}^2$. En todos los casos se ha impuesto como condición de contorno una cantidad de concentración de sulfatos de $35.2 \text{ (mol/m}^3\text{)}$ en los nodos de las cuatros caras externas.

6.2 Conclusiones

- El modelo empleado en este trabajo, formulado a un nivel de análisis meso-estructural, es una herramienta potente para representar el complejo comportamiento de degradación del hormigón bajo la acción del ataque sulfático externo.
- El modelo es capaz de simular como, a medida que se abren las juntas, los sulfatos se introducen, creándose así, nuevos canales, y por tanto formando frentes de penetración hacia el interior de la muestra.
- Los resultados acoplados obtenidos han mostrado ser muy consistentes, ya que ponen de manifiesto que la evolución del ingreso de los sulfatos, está directamente relacionado con la evolución de las fracturas.
- El modelo tiene en cuenta la cantidad inicial de C_3A . Su concentración se va agotando en la muestra de hormigón, a medida que esta reacciona con los sulfatos ingresantes en la muestra. Por tanto, el modelo es muy representativo del caso real, porque a medida que se desarrolla el proceso tiene en cuenta la variación de varios parámetros.
- La capacidad del modelo de calcular simultáneamente el problema químico/difusivo y el problema mecánico, puede actualizar el valor del coeficiente de difusión efectivo a través de dos caminos. Por un lado, disminuyendo el coeficiente en el medio continuo debido al llenado de los poros por la precipitación de especies a consecuencia de las reacciones que se producen durante el ataque. Por otro lado, simultáneamente, el coeficiente de difusión aumenta debido al efecto que produce la apertura de las fisuras.
- Se han presentado diversos cálculos en dos tipos de mallas de diferente tamaño y variando parámetros importantes del problema. La malla más grande, $10 \times 10 \text{ cm}^2$ da unos resultados, que desde el punto de vista de la modelización, permiten apreciar más cosas, que con una malla más pequeña. Como por ejemplo, la formación de fracturas importantes interiores. En la malla pequeña solo se puede observar la formación de una fractura principal que rodea la muestra, y luego simplemente el ataque queda finalizado por la disgregación de los áridos interiores respecto de la matriz. En la malla grande se puede ver muy bien cómo evolucionan las aperturas de juntas, como éstas se convierten en frentes de penetración para los sulfatos, y como en los últimos estados, los áridos centrales se acaban disgregando de la matriz.
- En el cálculo desacoplado se ha visto que se producían efectos, como el efecto “tapón”, en el que la penetración de los sulfatos experimentaban un retroceso. Este efecto que puede ser real, queda tapado por la acción preponderante de las aperturas de las fisuras que generan las expansiones, y que pone de manifiesto el cálculo acoplado.
- En 2D, se pueden representar muchos efectos, condiciones, etc., que resultan mucho más económico desde un punto de vista computacional, que en casos tridimensionales. Por lo tanto, nos proporciona muy buenas aproximaciones de

los resultados experimentales, y además se pueden variar fácilmente sus condiciones. Sus resultados nos pueden servir para trasladarlos al 3D, y verificar la respuesta de este último.

6.3 Futuras líneas de investigación

Este trabajo, llegado al punto actual, puede evolucionar por dos caminos distintos muy interesantes los dos:

- Por un lado se puede extender la formulación del modelo para incorporar el aspecto hidro, de modo de obtener el acoplamiento hidro-químico/difusivo-mecánico.
- El trabajo también se puede enfocar en la ampliación del modelo químico/difusivo-mecánico a 3D.
- De hecho, durante el desarrollo de esta tesina, se han llevado a cabo varios esfuerzos para reproducir algún caso sencillo de ataque sulfático en 3D. En el anejo de esta tesina, se muestra que es lo que se ha hecho respecto este tema, y que resultados preliminares está dando. Está previsto continuar con las simulaciones 3D.

7 Anejo. Modelización 3D. Preliminares

Paralelamente a la realización de este trabajo, se ha llevado a cabo la simulación del ataque sulfático externo en la dimensión 3D.

Esta tarea no resulta nada fácil, ya que se han encontrado varios obstáculos. A continuación se van detallar los pasos que se han seguido, los resultados obtenidos por el momento .

7.1 Generación de la malla 3D

El primer paso para lograr la modelización numérica 3D es la generación de una malla que sea capaz de simular el comportamiento de materiales heterogéneos a nivel meso-estructural. Esto requiere dos pasos fundamentales: la determinación de una geometría realista para la meso-estructura del material y el proceso de generación de la malla de elementos finitos.

El desarrollo de una geometría y malla de elementos finitos 3D para el estudio meso-estructural de hormigón implica dificultades añadidas frente a casos bidimensionales. Por ello el grupo de Mecánica de Materiales desarrolló un eficiente generador de mallas para meso-estructura (Caballero 2005), cuyo funcionamiento se puede dividir en dos partes fundamentales: generación de la geometría y generación de la malla de elementos finitos a partir de esta, tal y como se describe en los siguientes apartados.

7.1.1 Generación de la geometría

Para generar la geometría se ha empleado un método basado en la teoría básica de Voronoï/Delaunay (Klein 1989), a partir de la cual se puede obtener la posición y la topología básica de un grupo de poliedros situados en un espacio tridimensional. Estos poliedros representan los áridos más grandes que están incrustados en una matriz que representa el mortero, obteniéndose la geometría de un hormigón como resultado.

La generación de la meso-geometría puede dar lugar a rasgos indeseables (como elementos pequeños o distorsionados), que a su vez requieren subprocesos adicionales para corregirlos. Una vez que la generación de la meso-geometría se ha completado, el proceso de generación de la malla se inicia, dando lugar a la malla final de elementos finitos, que contiene elementos continuos y de interfase. El proceso completo se describe con más detalle en (Caballero 2005).

7.1.2 Generación de la malla de Elementos Finitos

En primer lugar y de cara a generar la malla de EF, se subdividen los elementos de la geometría original en tetraedros elementales. Seguidamente se puede generar la malla convirtiendo directamente los tetraedros elementales obtenidos en malla de EF. (Caballero 2005).

Después de generar los elementos del continuo (áridos y matriz) es necesario insertar los elementos de la interfase a lo largo de todos los planos de fractura definidos anteriormente. La inserción de los elementos de interfase implica modificar las conectividades de los elementos del continuo.

Para ello se emplea un algoritmo que localiza los límites de las interfases (previamente definidas) dentro de la malla de elementos finitos, y una vez realizado, otro algoritmo procede a insertar los elementos de la interfase en el mismo. Este proceso de inserción implica una desconexión nodal de los elementos del continuo que quedan a lado y lado de una interfase o plano de fractura. Para ello se lleva a cabo la duplicación de los nodos de la malla que contiene cada plano de fractura, tal y como se indica en la **Figura 7.1**

Tras la duplicación de los nodos, los elementos del continuo estarán conectados a través de elementos de interfase que se abrirán o no en función de la configuración geométrica, el modelo constitutivo y las cargas a las que sean sometidas. Tras este procedimiento el número de nodos puede aumentar considerablemente. Véase que el número de elementos del continuo se mantiene sin cambios.

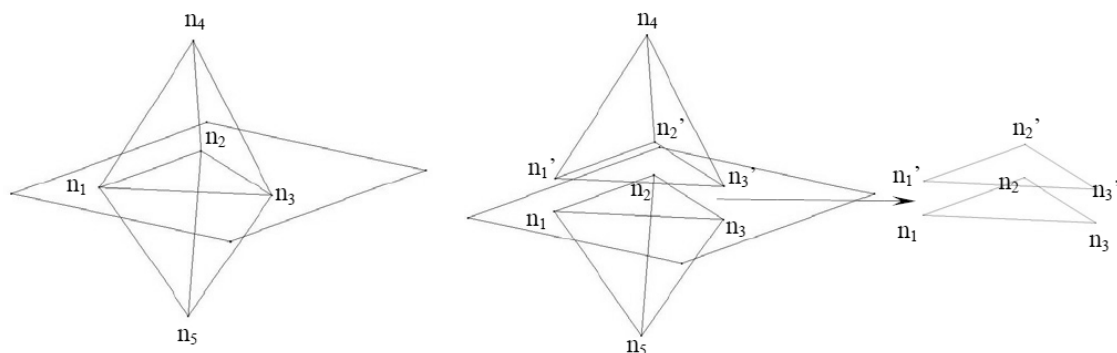


Figura 7.1 : Elementos del continuo situados en lados opuestos de un plano de fractura potencial (izquierda); inserción de un elemento junta duplicando nodos y modificando las conectividades (centro); elemento de interfase resultante (derecha). Caballero (2005).

7.1.3 Ejemplo de malla generada

El presente apartado tiene por objeto mostrar un ejemplo de geometría 3D generada para probetas cúbicas de hormigón así como su discretización en malla de EF, y de este modo apreciar los diferentes elementos del continuo y juntas que se encuentran dentro de la misma. Se muestra una malla cúbica sencilla de 4x4x4 cm que contiene 28 áridos. En la Figura 7.1 se muestran los elementos del continuo (matriz y áridos), así como la discretización en malla de EF de todo el dominio conjunto.

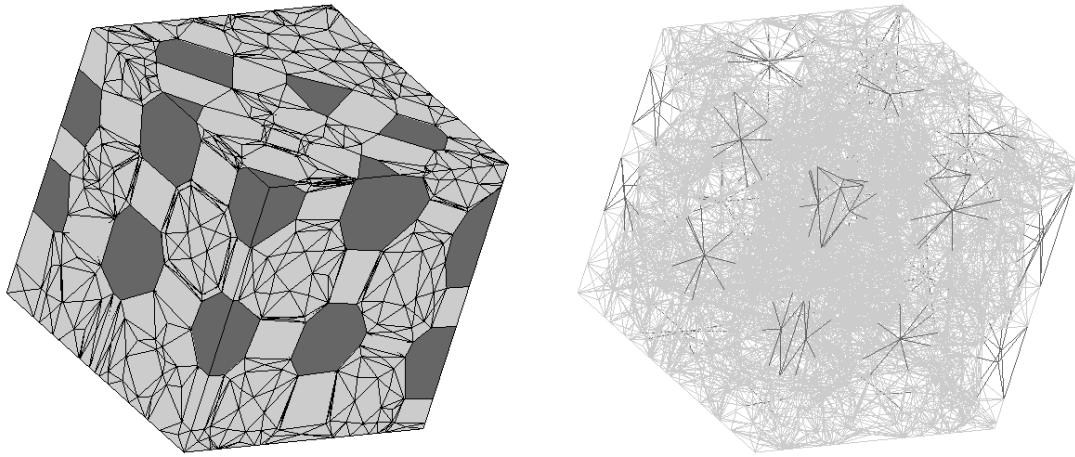


Figura 7.1 Geometría correspondiente a los elementos del continuo (matriz y áridos), a la izquierda; a la derecha su discretización (malla de elementos finitos de todo el dominio).

En las **Figuras 7.2** y **7.3** se muestran la geometría del continuo correspondiente a matriz y áridos, respectivamente, así como su discretización (malla de EF).

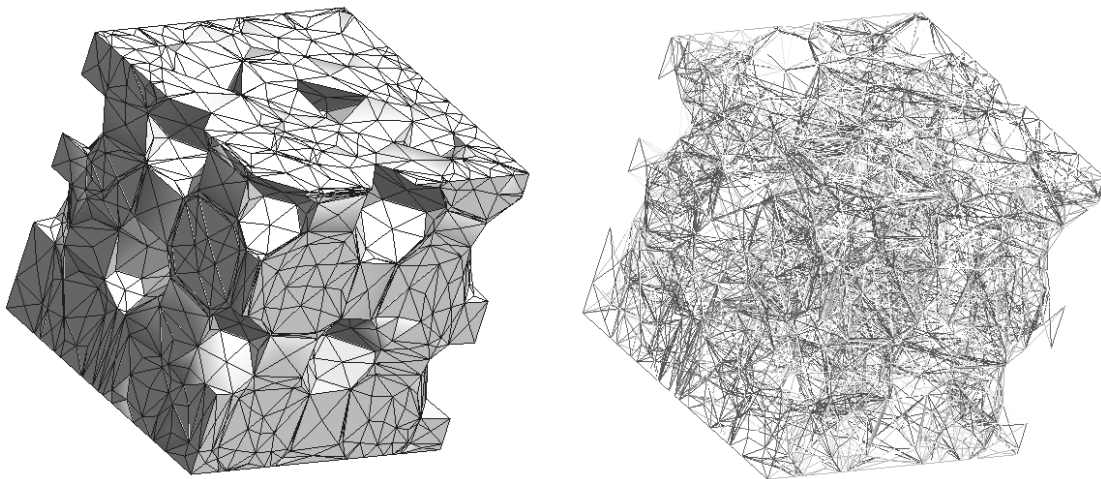


Figura 7.2 Geometría correspondiente a la matriz (izquierda); discretización de la malla de EF (derecha).

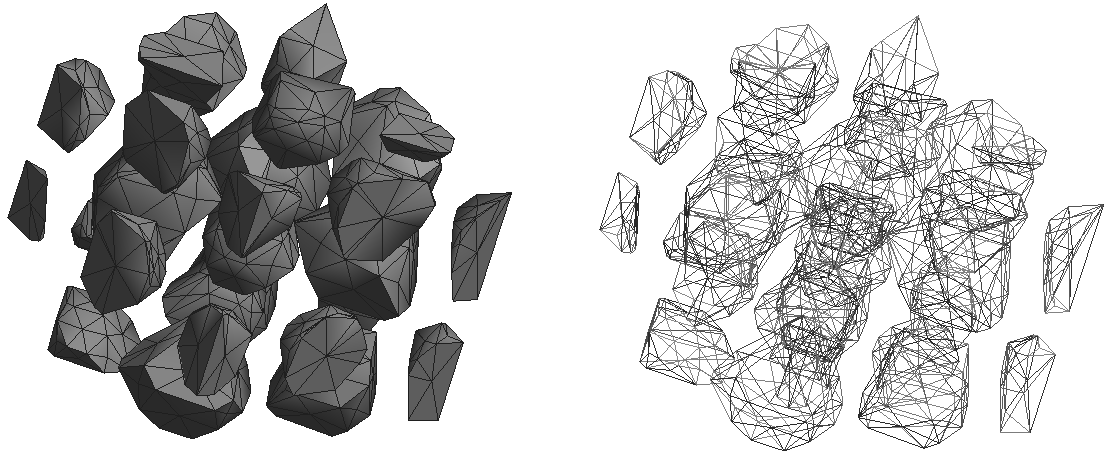


Figura 7.3 Geometría correspondiente a los áridos (izquierda); discretización de la malla de EF (derecha).

Las **Figuras 7.4** y **7.5** muestran la geometría de los elementos junta entre los contactos árido-matriz y matriz-matriz, respectivamente, así como su discretización (malla de EF).

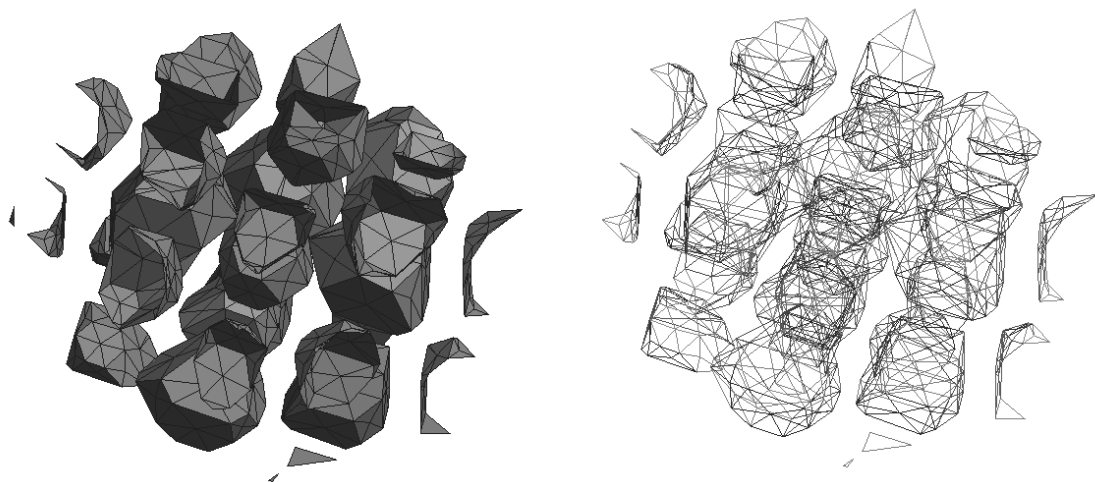


Figura 7.4 Disposición de elementos junta entre contactos matriz-árido (izquierda); discretización de las juntas en EF (derecha).

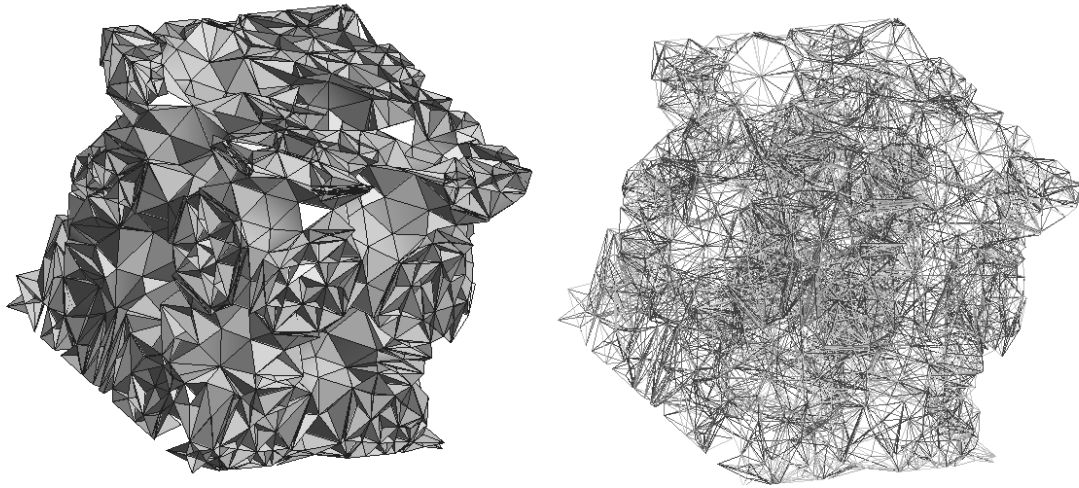


Figura 7.5 Disposición de elementos junta entre contactos matriz-matriz (izquierda); discretización de las juntas en EF (derecha).

Puede verse que los elementos junta de espesor nulo, - que representan los planos potenciales de rotura -, forman planos en el caso tridimensional, y no líneas como ocurre en el caso bidimensional.

7.2 Primera prueba

Primero se ha tratado el problema como una traslación directa del 2D, es decir con los mismos parámetros y aplicando el sulfato externo de la misma forma que el 2D, es decir, imponiendo una concentración de $35.2 \text{ (mol/m}^3\text{)}$ como condición de contorno en los nodos de cuatro caras.

Al aplicar una condición de contorno en una malla sin refinar, el programa no tiene la capacidad de reproducir bien la traslación de las concentración impuesta en el exterior, con lo que acaba aproximando los primeros puntos de gauss que encuentra, mediante oscilaciones es decir pasando primero por la parte negativa. A medida que avanzan estas oscilaciones disminuyen hasta que al final se restablece. Por tanto, nos hemos dado cuenta que imponer una condición de contorno con una malla sin refinar, además tratándose de dimensión 3, nos daba muchos problemas.

Entonces se intentó calcular un primer paso de tiempo grande, es decir, probamos de que el primer paso de cálculo fuera tan grande que estas oscilaciones no aparecerían. Se probó con 80 días de golpe, 100 días de golpe y hasta 200 días de golpe. Pero continuábamos obteniendo resultados negativos.

A continuación los resultados obtenidos en esta primera prueba;

7.2.1 Resultado de la primera prueba

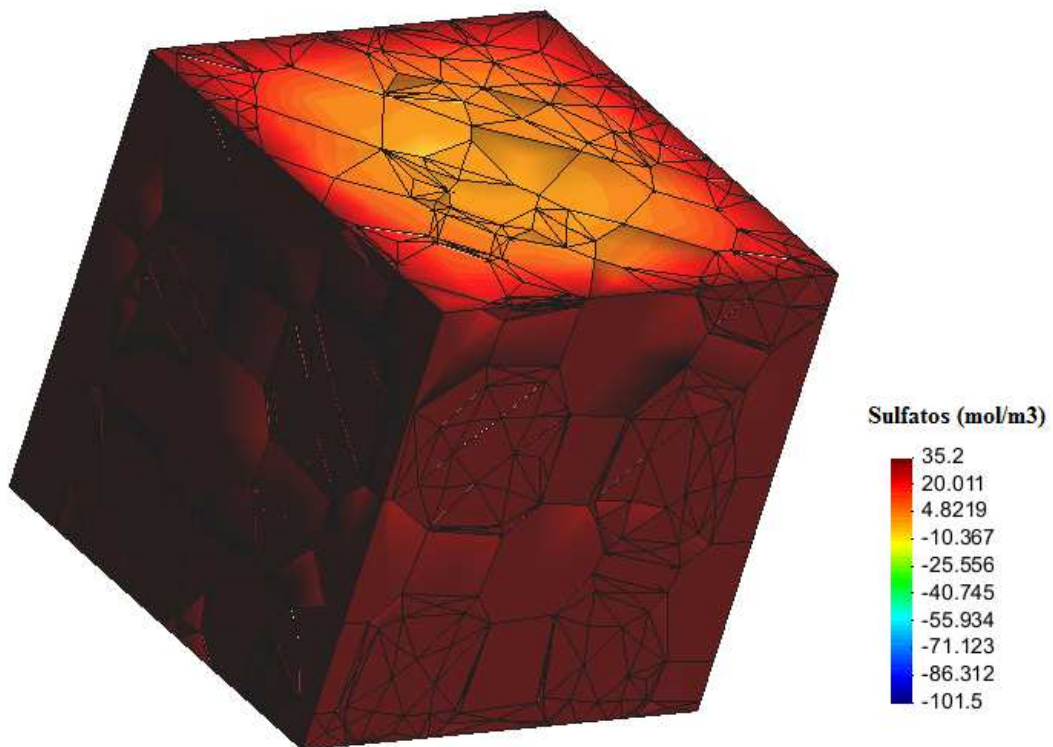


Figura 7.6 Resultado de sulfatos, al aplicarlos como condición de contorno, para 80 días.

Como se puede ver, los valores negativos son muy altos.

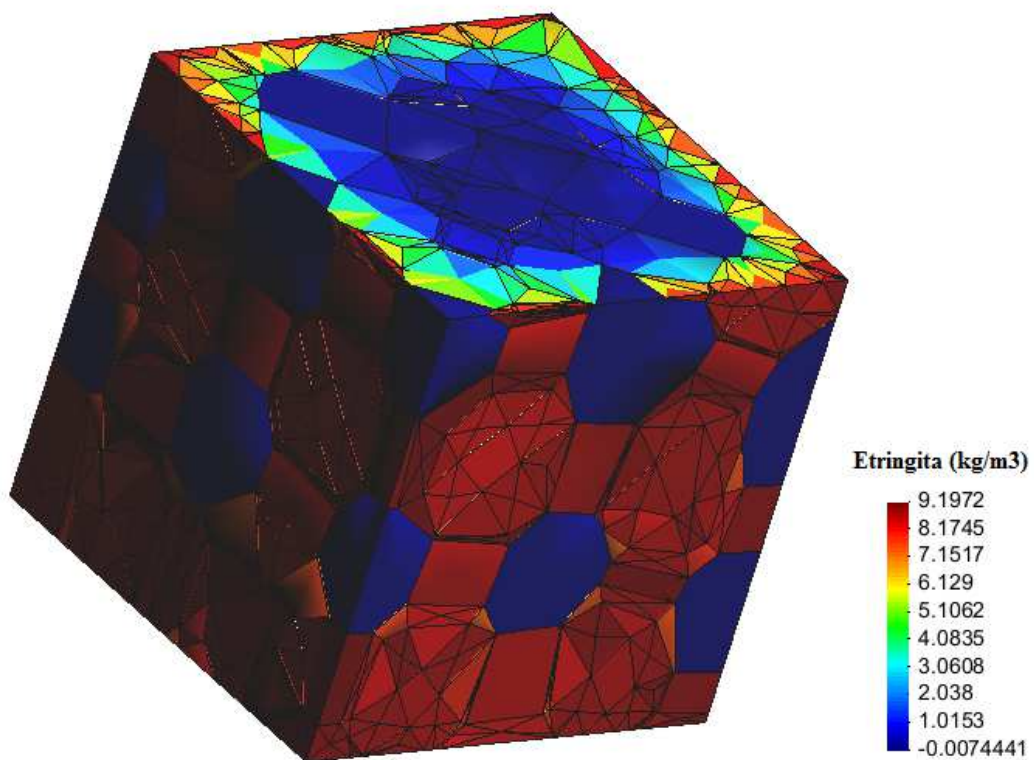


Figura 7.7 Etringita precipitada a los 80 días.

7.3 Segunda prueba:

Como se vio que imponer la concentración de sulfato como condición de contorno en las caras era muy "brusco" para el cálculo, y que de hecho en la realidad tampoco pasa así, sino que cuando se sumerge una probeta de hormigón en una solución de sulfato, este poco a poco se va impregnando de la solución. Con lo cual se pensó hacer una segunda prueba donde el sulfato se imponía como un flujo convectivo. Es decir, aplicar de una forma más lenta la concentración total de sulfatos, para así, evitar las oscilaciones.

Bien en esta prueba también se han obtenido resultados negativos debido a las oscilaciones. A partir de aquí, se simuló un caso muy sencillo para hacer diversas pruebas, ya que con la malla generada el cálculo era muy costoso, y hacer pruebas en él no era muy cómodo. Con este ejemplo se han llegado a un serie de conclusiones, pero que están por demostrar.

A continuación los resultados obtenidos aplicando la solución de sulfato como flujo convectivo;

7.3.1 Resultado preliminar:

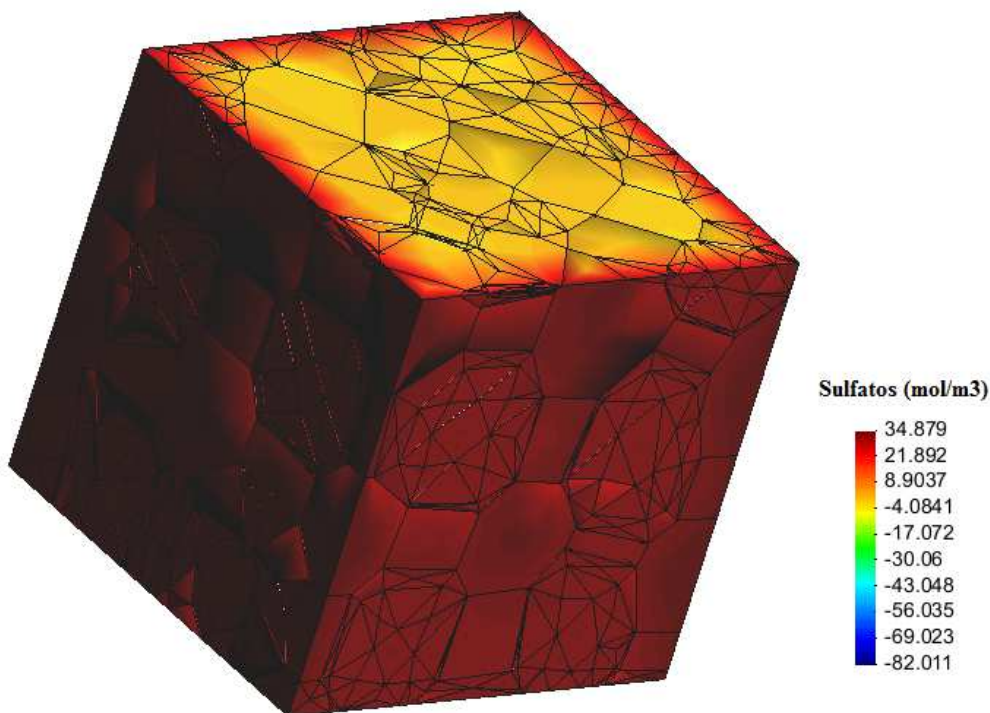


Figura 7.8 Este resultado corresponde al ingreso de sulfatos como flujo convectivo a los 5 días. Prácticamente ha llegado asumido la concentración total.

Como se puede observar fácilmente, los resultados negativos de sulfato.

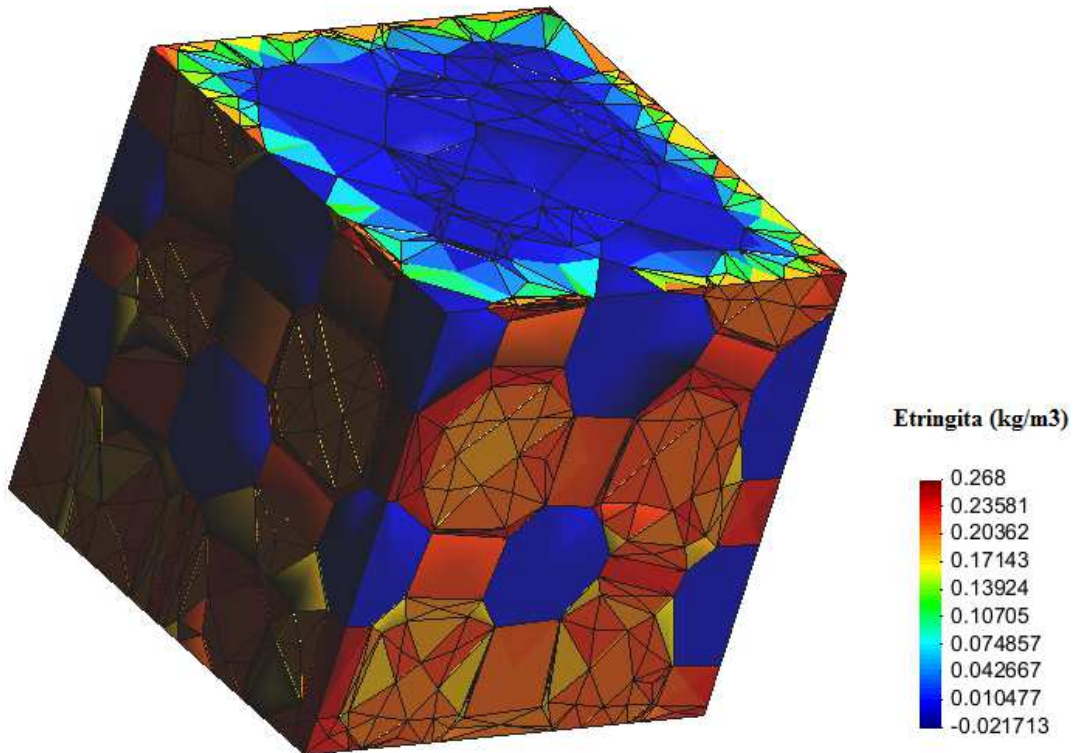


Figura 7.9 Este resultado corresponde al ingreso etringita precipitada a los 5 días.

Al haber sulfatos negativos, se entra ya en una problemática, porque las reacciones químicas alteran su valor, dando así etringita negativa, y etringita negativa da lugar a retracciones. Por tanto, es un camino en el que no se puede seguir de ninguna manera.

Como conclusión de estos resultados preliminares, es que de la primera prueba a la segunda se obtienen mejores resultados, ya que calculando con los sulfatos como condición de contorno impuesto, a 80 días los valores negativos son mucho más altos que en la segunda prueba, que el sulfato se comporta como flujo convectivo que se adentra a la muestra.

8 Bibliografía

Al-Amoudin, O. S .B., "Attack on plain and blended cements exposed to aggressive sulfate environments", *CCC*, 24:305-316, 2002.

Bazant, Z. & Cedolin, L. (1979). Blunt crack propagation in finite element analysis. *J. Eng. Mech. Division, ASCE*, 105 , pp 297-315.

Bazant, Z. P. y Kaplan M. F. (1996). "Concrete at High Temperatures – Mathematical properties and mathematical models". *Concrete Design and Construction Series* , Longman.

Bazant, Z. P. y Thonguthai, W. (1978). Pore Pressure and Drying of Concrete at High Temperature. *Journal of the Engineering Mechanics Division*, 104 , pp 1059-1079.

C.M, L., D, C., I, C., J., M., & M., C. (2033). *Ánalisis microestructural de la fluencia básica del hormigón mediante elementos junta. ETSECCPB, ICMAB-CSIC* .

Caballero, A. (2005). *3D meso-mechanical numerical analysis of concrete fracture using interface elements*. PhD Thesis, UPC, Barcelona, España.

Caballero, A., Carol, I., and López, C.M. (2007). 3d mesomechanical analysis of concrete specimens under biaxial loading. *Fracture and Fatigue of Engineering Materials and Structures*, 30. , pp 877–886.

Caballero, A., López, C.M., and Carol, I. (2006). "3D meso-structural analysis of concrete specimens under uniaxial tension". *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 195(52) , pp 7182–7195. (Special issue FRAMCOS-5, Vail, Aug/2004).

Carol, I., Lopez, C. & Roa, O. (2001). Micromechanical analysis of quasi-brittle materials using fracture-based interface elements. *Int. J. Numer. Meth. in Engrg.*, 52 , pp 193–215.

Carol, I., Prat, P. (1990). A statically constrained microplane model for the smeared anialysis of concrete cracking. En Bicanic, N. and Mang, H., (Eds.), Pineridge Press. En *Computer aided analysis and design of concrete structures*, 2 (págs. 919-930). Zell-am-See, Austria.

Carol, I., Prat, P. y López, C. M. (1997). A normal/shear cracking model. Application to discrete crack analysis. *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 123 (8) , pp 765-773.

Ciancio, D., Lopez, C., Carol, I. & Cuomo, M. (2003). New results in meso-mechanical modeling of concrete using fracture-based zero-thickness interface elements. *Computational Modelling of Concrete. Balkema* . , pp 171–177.

Garolera, D., Lopez, C., Carol, I. & Papanastasiou, P. (2005). Micromechanical analysis of the rock sanding problem. *Journal of the Mechanical Behavior of Materials*, 16 , pp 45–53.

Griffith, A. (1920). The Phenomena of Rupture and Flow in Solids. *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, 221 , pp 163-198.

Hillerborg, K., Modeér, M., y Petersson, P. (1976). Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of Fracture Mechanics and Finite Elements. *Cement and Concrete Research*, 6 , pp 773-781.

Idiart, A. E. (Mayo 2009). *Coupled analysis of degradation processes*. Barcelona: DEPARTMENT OF GEOTECHNICAL ENGINEERING AND GEOSCIENCES. UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA.

Idiart, A., López, C.M., and Carol, I. (2011). “Chemo-mechanical analysis of concrete cracking and degradation due to external sulfate attack: A meso-scale model”. *Cement & Concrete Composites*, 33 , pp 411–423.

Inglis, C. (1913). Stresses in plate due to the presence of cracks and sharp corners. *Trans. Inst. Naval Architects*, 55 , pp 219-241.

Irwin, G. (1958). Fracture. En *Encyclopedia of Physics*, VI (págs. 551-590).

Karihaloo, B. (1995). Fracture Mechanics & Structural Concrete. *Longman Scientific & Technical, Harlow, UK*.

Karihaloo, B. L., Carpinteri, A. y Elices, M. (1993). Fracture mechanics of cement mortar and plain concrete. *Advn. Cem. Bas. Mat.* , pp 92-105.

Lopez, C *Análisis microestructural de la fractura del hormigón utilizando elementos finitos tipo junta. Aplicación a diferentes hormigones*.1999PhD Thesis, UPC, Barcelona, España

López, C. M., Carol, I., Aguado, A. (2008b). “Meso-structural study of concrete fracture using interface element. II: Brazilian test, compression and HS concrete”. *Materials and structures*, vol. 41, N°3 , pp 601-620.

López, C. M., Carol, I., Aguado, A. (2008a). Meso-structural study of concrete fracture using interface element. I: numerical model and tensile behaviour. *Materials and structures*, vol. 41, N°3. , pp 583-599.

Lopez, C., Carol, I. & Aguado, A. (2002). Microstructural analysis of concrete fracture using interface elements. *ECCOMAS2000 proceedings, CIMNE* .

Prat, P., Gens, A., Carol, I., Ledesma, A. y Gili, J.A. (1993). DRAC: A computer software for the analysis of rock mechanics problems. En *In H. Liu, editor, Application of computer methods in rock mechanics*, 2. (págs. 1361-1368). Xian, China. Shaanxi Science and Technology Press.

Rodríguez, M., López, C.M., Carol, I. (2011a). High temperature effects in mortar and concrete specimens using meso-mechanical model with fracture based zero-thickness interface elements. *XI International Conference on Computational Plasticity*:

Fundamentals and Applications (COMPLAS XI), 7-9 September 2011, Barcelona, Spain.

Rodríguez, M., López, C.M., Carol, I., William, K.J. (2011b). Meso-mechanical modeling of thermal spalling in concrete using fracture-base zero-thickness interface elements. *2nd International RILEM Workshop on Concrete Spalling due to Fire Exposure, 5-7 October 2011, Delft, The Netherlands.*

Rodríguez, M., López, C.M., Carol, I., William, K.J. (2012). Meso-mechanical study of high-temperature cracking in mortar and concrete specimens using fracture-base zero-thickness interfaces. *Numerical Modeling (SCSS 2012). May-June 2012. Aix-en-Provence, France.*

Roelfstra, P., Sadouki, H. & Wittmann, F. (1985). Le beton numerique. *Materials and Structures, 18.* , pp 309–317.

Stankowski, T. (1990). *Ph.D. Thesis, “ Numerical simulation of progressive failure in particle composites”* .

Stankowski, T., Runesson, K. & Sture, S. (1993). Fracture and slip of interfaces in cementitious composites. i: Characteristics; ii: Implementation. *J. Engng. Mech. ASCE, 119* , pp 292–327.

Tixier, R., & Mobasher, B. (2003). Modeling of damage in cement-based materials subjected to external sulfate attack. I: Formulation. II: Comparison with experiments". *ASCE J. Mat. Civil Engng., 15:305-322* .

Van Mier, J. G. M. (1997). *Fracture Processes of Concrete.* CRC Press.

Vonk, R. (1992). *Ph.D Thesis , “ Softening of concrete loaded in compression ”* .

Wang, J. & Huet, C. (1993). Micromechanics of Concrete and Cementitious Composites , “A numerical model for studying the influences of pre-existing microcracks and granular character on the fracture of concrete materials and structures”, 229. *Presses Polytechniques et Universitaires* .

Wittmann, F. (1983). Structure of concrete with respect to crack formation. *Fracture Mechanics of Concrete* , pp 43.

