

Anna Paula Guida Ferreira

**MODELAGEM DOS FENÔMENOS DE TRANSPORTE  
TERMO-HÍDRICOS EM MEIOS POROSOS SUBMETIDOS A  
TEMPERATURAS ELEVADAS: APLICAÇÃO A UMA BICAMADA  
ROCHA-CONCRETO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Orientadora: Prof<sup>ª</sup>. D.Sc. Michèle Cristina Resende Farage

Coorientador: Prof. D.Sc. Flávio de Souza Barbosa

Juiz de Fora

2011

Ferreira, Anna Paula Guida.

Modelagem dos fenômenos de transporte termo-hídricos em meios porosos submetidos a temperaturas elevadas : aplicação a uma bicamada rocha-concreto / Anna Paula Guida Ferreira. – 2011.  
121 f. : il.

Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional)–Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora, 2011.

1. Concreto. 2. Fenômenos de transporte. 3. Temperatura I. Título.

CDU 624.012.4

Anna Paula Guida Ferreira

**MODELAGEM DOS FENÔMENOS DE TRANSPORTE  
TERMO-HÍDRICOS EM MEIOS POROSOS SUBMETIDOS A  
TEMPERATURAS ELEVADAS: APLICAÇÃO A UMA BICAMADA  
ROCHA-CONCRETO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional, da Universidade Federal de Juiz de Fora como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Modelagem Computacional.

Aprovada em 31 de Agosto de 2011.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof<sup>a</sup>. D.Sc. Michèle Cristina Resende Farage - Orientadora  
Universidade Federal de Juiz de Fora

---

Prof. D.Sc. Flávio de Souza Barbosa - Coorientador  
Universidade Federal de Juiz de Fora

---

Prof. D.Sc. Luis Paulo da Silva Barra  
Universidade Federal de Juiz de Fora

---

Prof. D.Sc. Jean Marie Désir  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

---

Eng<sup>a</sup>. D.Sc. Rosângela Santarem Rodrigues  
Themag Engenharia

*Dedico este trabalho aos meus pais e à minha irmã. É porque tenho vocês que me sinto capaz de enfrentar todos os desafios.*

## AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Regina e Paulo, e à minha irmã, Anna Elizabeth, pelo amor e pela força. Este trabalho e todas as minhas conquistas são para vocês e por vocês.

À minha família, avô, tios, tias e primos, que compreenderam os longos períodos de ausência. Em especial ao vovô Moacyr por acreditar forte e sonhar alto com o meu futuro.

Aos meus avós, Hilda, Antônia e Osvaldo pela proteção permanente.

Aos professores Michèle Cristina Resende Farage e Flávio de Souza Barbosa por mais uma orientação vitoriosa e dedicada. Obrigada por caminharem comigo e me apoiarem, pelas palavras oportunas de incentivo e esclarecimento, pela disposição e pela paciência. Trabalhar com vocês será sempre um prazer.

Aos membros da banca por terem aceitado o convite e pelas sugestões que muito contribuíram para melhorar a qualidade deste trabalho.

Aos professores do Departamento de Mecânica Aplicada e Computacional da UFJF, Flávia de Souza Bastos, Patrícia Habib Hallak, Elson Magalhães Toledo, Afonso Celso de Castro Lemonge, Leonardo Goliatt da Fonseca e Luis Paulo da Silva Barra pelo coleguismo e simpatia e por criarem um ambiente de trabalho agradável.

A todos os professores do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional que muito contribuíram com os conhecimentos transmitidos com desprendimento e paciência.

À Natália de Mira Braga pela sua atenção, presteza e compreensão no auxílio aos alunos do PPGMC.

Aos professores Albert Noumowé e Norbert Renault que me orientaram em um momento muito importante do meu trabalho e da minha vida enquanto estive na França. Obrigada pelo suporte e pela confiança.

Aos colegas do doutorado da UCP, Zhi Xing e Prosper Pliya, pelo tempo e atenção dedicados ao meu trabalho e às minhas dúvidas.

À Universidade de Cergy-Pontoise pela oportunidade do intercâmbio.

Aos amigos Virgínia Fernandes Mota e Gustavo Teixeira Barbosa pela família constituída enquanto estávamos longe das nossas próprias. Obrigada por continuarem comigo.

Às amigas Bárbara de Melo Quintela, Michelli Marlane da Silva e Franciane Conceição Peters pela colaboração muitas vezes direta que tiveram neste trabalho. Obrigada também

pelo companheirismo e pelos momentos de descontração.

A todos os amigos do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional pelo convívio excelente.

Aos amigos de sempre Isabel Gil, Leandro Manso, Luiza Carneiro e Waldir Neme Felipe Filho por me fazerem sentir, cada um a seu jeito, que sou importante em suas vidas, seja me ajudando com meu trabalho ou simplesmente me ouvindo. Obrigada pelas suas amizades que independem do tempo e da distância.

À Universidade Federal de Juiz de Fora pelo incentivo à pesquisa.

Às agências de fomento que apoiam este e outros projetos relacionados: CAPES, FAPEMIG e CNPq.

Principalmente, agradeço a Deus. Sem Ele nenhuma dessas palavras teriam sentido.

*“Duvidar de tudo ou em tudo  
crer são duas soluções  
igualmente cômodas que nos  
dispensam, ambas, de refletir.”*

*Jules Henri Poincaré*

## RESUMO

O concreto é um meio extremamente complexo, cujas propriedades ainda não são totalmente compreendidas. As dificuldades encontradas na descrição e previsão do comportamento de estruturas de concreto devem-se a aspectos relacionados à heterogeneidade do meio - que é poroso e multifásico - podendo conter em seu interior fluidos na forma líquida e gasosa. Quando exposto a condições de temperatura elevada, tais dificuldades são ainda maiores, devido à ocorrência de fenômenos físicos e químicos, que alteram a estrutura porosa e as propriedades do meio.

Como a reação de hidratação do cimento é reversível e termoativada, a exposição do concreto a temperaturas elevadas pode ter efeitos deletérios, com a ocorrência de desidratação da matriz a base de cimento, fissuração devido a pressões internas geradas pela evaporação da água de amassamento remanescente da mistura e ao deslocamento superficial (“spalling”).

Este trabalho consiste no estudo do comportamento termo-hídrico de estruturas compostas por bicamadas rocha-concreto - comumente encontradas em túneis e repositórios subterrâneos. Foi desenvolvido um programa experimental consistindo em análises térmicas no qual corpos-de-prova bicamada feitos com dois tipos de concreto - convencional e de alto desempenho - foram submetidos a temperaturas de até 750°C. Tais ensaios forneceram dados para a implementação de um modelo termo-hídrico desenvolvido no código Cast3m - que foi empregado para simular os mesmos experimentos desenvolvidos em laboratório.

Os resultados numéricos permitem avaliar a qualidade do modelo proposto, e servem de base para futuros desenvolvimentos que levem em conta o acoplamento termo-hidro-mecânico na descrição do comportamento do material.

**Palavras-chave:** Fenômenos de Transporte. Temperaturas Elevadas. Concreto. CAST3M.

## ABSTRACT

Concrete is an extremely complex material, whose properties are not yet fully understood. The difficulties in describing and predicting the behavior of concrete structures are due to aspects related to the heterogeneity of medium - which is porous and multiphase - presenting fluids in liquid and gas forms.

When exposed to high temperature conditions, such difficulties are even increased because of the occurrence of physical and chemical phenomena, which alters the porous structure and properties of the material.

As the cement hydration reaction is reversible and thermo-activated, exposure of concrete to elevated temperatures causes deleterious effects, such as dehydration of the cement-based matrix, cracking due to internal pressures generated by evaporation of free water and spalling.

This work aims the study of the hygro-thermal behavior of structures composed of bilayers rock-concrete - commonly found in tunnels and underground repositories. It was developed an experimental program consisting of thermal analysis in which bilayer samples made of two types of concrete - conventional and high performance - were submitted to temperatures up to 750 °C. These tests provided data for the implementation of a hygro-thermal model on the Cast3m code - which was used to simulate the same experiments developed in the laboratory.

The numerical results allowed the evaluation of the quality of the proposed model, and serve as a basis for future developments that take into account the thermo-hydro-mechanical coupling to describe the material behavior.

**Keywords:** Transport Phenomena. High Temperatures. Concrete. CAST3M.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

1.1	Panteão Romano em cimento pozolânico e agregado leve . . . . .	16
1.2	Estruturas em concreto danificadas pelo fogo . . . . .	17
1.3	Esquema de um reator GE Mark I BWR da General Electric <sup>1</sup> . . . . .	18
2.1	Constituintes do concreto em três escalas de observação [1] . . . . .	21
2.2	Modelo Feldman-Sereda [2] . . . . .	23
2.3	Mecanismos causadores do “spalling” [3] [1] . . . . .	27
2.4	Variação da pressão nos poros [4] . . . . .	28
2.5	Condutividades térmicas para 4 concretos secos (sem teor de umidade) [5] . . . . .	31
2.6	Limites inferior e superior para a condutividade térmica de concretos normais . . . . .	32
2.7	Valores experimentais para a condutividade térmica do concreto comum e do concreto CAD - Comparação com a evolução sugerida pela norma Europeia . . . . .	33
2.8	Calor específico do concreto segundo a norma Europeia [6] para três teores de água ( $u$ ) diferentes e em função da temperatura . . . . .	34
2.9	Deformação de origem térmica das pastas de cimento [7] . . . . .	35
2.10	Expansão térmica medida para alguns agregados [7] . . . . .	36
2.11	Evolução da porosidade para um concreto comum e um concreto de alto de- sempenho [8] . . . . .	37
2.12	Esquemas para a determinação da condutividade de compósitos com compo- nentes em série e em paralelo - regra das misturas . . . . .	41
2.13	Variação do calor específico para três tipos diferentes de rochas [9] . . . . .	43
2.14	Evolução da porosidade para um calcário de densidade real 2684 kg/m <sup>3</sup> e porosidades iniciais total e efetiva iguais a 11,5% e 7,8% [10] . . . . .	45
2.15	Permeabilidade de alguns tipos de rocha em função da porosidade [11] . . . . .	46
3.1	Geometria e instrumentação . . . . .	48
3.2	Camada de rocha sobre a qual foi fabricada a amostra de concreto . . . . .	49
3.3	Formas e amostras prontas . . . . .	49
3.4	Posicionamento das amostras para aquecimento dentro do forno . . . . .	50
3.5	Superfície que ficou diretamente exposta ao aquecimento do CC-600 . . . . .	52

3.6	Faces do concreto CC-600 após aquecimento . . . . .	52
3.7	Evolução de temperaturas para o CC-600 . . . . .	53
3.8	Superfície que ficou diretamente exposta ao aquecimento do CC-750 . . . . .	53
3.9	Faces do concreto CC-750 após aquecimento . . . . .	54
3.10	Evolução de temperaturas para o CC-750 . . . . .	55
3.11	Superfície que ficou diretamente exposta ao aquecimento do CAD-600 . . . . .	55
3.12	Faces do concreto CAD-600 após aquecimento . . . . .	56
3.13	Evolução de temperaturas para o CAD-600 . . . . .	57
3.14	Concreto CAD-750 após aquecimento . . . . .	57
3.15	Evolução de temperaturas para o CAD-750 . . . . .	58
4.1	Balanco de energia no volume de controle. . . . .	60
4.2	Valores experimentais para a condutividade térmica do concreto comum e do concreto CAD. Comparação com a evolução sugerida pela norma Europeia.	69
5.1	Algoritmo do cálculo termo-hídrico. . . . .	76
6.1	Estrutura modelada e condições de contorno . . . . .	77
6.2	Temperaturas numéricas e experimentais para o concreto comum (CC) em cada ponto de análise . . . . .	80
6.3	Distribuição de temperaturas no concreto comum (CC) no momento em que $T(T1) = 750 \text{ }^\circ \text{C}$ . . . . .	81
6.4	Temperaturas numéricas e experimentais para o concreto de alto desempenho (CAD) em cada ponto de análise . . . . .	82
6.5	Distribuição de temperaturas no concreto de alto desempenho (CAD) no mo- mento em que $T(T1) = 750 \text{ }^\circ \text{C}$ . . . . .	83
6.6	Velocidade das evoluções de temperatura para o concreto comum (CC) em cada ponto de análise . . . . .	84
6.7	Velocidade das evoluções de temperatura para o concreto de alto desempenho (CAD) em cada ponto de análise . . . . .	85
6.8	Evolução da saturação e da porosidade ao longo do eixo analisado do concreto comum (CC) . . . . .	87
6.9	Evolução da saturação e da porosidade ao longo do eixo analisado do concreto de alto desempenho (CAD) . . . . .	88

6.10	Evolução da pressão de vapor ao longo do eixo analisado para o concreto comum (CC) . . . . .	89
6.11	Evolução da pressão de vapor ao longo do eixo analisado para o concreto de alto desempenho (CAD) . . . . .	89
A.1	Criação da geometria e da malha . . . . .	99
A.2	Criação da malha e das superfícies da geometria (concreto, rocha e geometria total) . . . . .	100
A.3	Dados iniciais dos materiais concreto e rocha . . . . .	100
A.4	Definição do modelo e condições de contorno térmicas . . . . .	101
A.5	Definição dos campos de temperatura inicial e saturação inicial . . . . .	102
A.6	Organização dos dados iniciais em tabelas e chamada ao procedimento THCR . . . . .	102
A.7	Primeiras definições do procedimento THCR . . . . .	103
A.8	Início do laço que incrementa o tempo - tabela para cálculo térmico . . . . .	103
A.9	Início do laço que incrementa o tempo - tabela para cálculo hídrico . . . . .	104
A.10	Início do laço que verifica a convergência dos resultados térmicos e hídricos . . . . .	104
A.11	Início do laço de cálculo térmico e cálculo do calor específico volumétrico total . . . . .	105
A.12	Cálculo das condutividades térmicas, definição do material do modelo térmico através do operador <b>MATE</b> , preenchimento da tabela de cálculo térmico e cálculo das temperaturas pelo procedimento <b>TATHER</b> . . . . .	105
A.13	Fim do laço térmico <b>theriter</b> . . . . .	106
A.14	Preparação para cálculo hídrico . . . . .	107
A.15	Preparação para cálculo hídrico - continuação . . . . .	107
A.16	Início do laço do cálculo hídrico . . . . .	108
A.17	Cálculo da saturação e fim do laço do cálculo hídrico . . . . .	108
A.18	Cálculo da quantidade de água evaporada e transferida por convecção . . . . .	109
A.19	Fim do algoritmo de Picard e do laço de tempo . . . . .	110
B.1	Representação de um fluido confinado em um cilindro com pistão móvel que sofre variação de volume através da aplicação da força $F$ . . . . .	111

## LISTA DE TABELAS

2.1	Valores de condutividades térmicas para concretos com diferentes tipos de agregados [2] . . . . .	29
2.2	Condutividades térmicas para concretos saturados em temperaturas entre 5°C e 25°C [4] . . . . .	29
2.3	Informações sobre os quatro tipos de concreto estudados [5] . . . . .	31
3.1	Formulação dos concretos em kg/m <sup>3</sup> . . . . .	48
3.2	Propriedades materiais medidas experimentalmente . . . . .	51
6.1	Dados para o modelo - concretos . . . . .	78
6.2	Dados para o modelo - rocha . . . . .	78
6.3	Calores específicos . . . . .	79
6.4	Condições iniciais em temperatura e saturação . . . . .	79

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>15</b>
<b>1.1</b>	<b>Motivação e objetivos</b>	<b>18</b>
<b>1.2</b>	<b>Estrutura da dissertação</b>	<b>19</b>
<b>2</b>	<b>Descrição do concreto e da rocha e a influência da temperatura</b>	<b>20</b>
<b>2.1</b>	<b>Estrutura do concreto</b>	<b>20</b>
<i>2.1.1</i>	<i>Pasta de cimento hidratado</i>	<i>22</i>
<i>2.1.1.1</i>	<i>Água</i>	<i>22</i>
<i>2.1.2</i>	<i>Agregados</i>	<i>23</i>
<b>2.2</b>	<b>Comportamento do concreto sob temperaturas elevadas</b>	<b>25</b>
<i>2.2.1</i>	<i>Fenômeno do lascamento ou “spalling”</i>	<i>26</i>
<i>2.2.2</i>	<i>Propriedades térmicas do concreto</i>	<i>28</i>
<i>2.2.2.1</i>	<i>Condutividade térmica</i>	<i>28</i>
<i>2.2.2.2</i>	<i>Calor específico do concreto</i>	<i>33</i>
<i>2.2.2.3</i>	<i>Dilatação térmica do concreto</i>	<i>34</i>
<i>2.2.3</i>	<i>Propriedades do concreto como meio poroso</i>	<i>37</i>
<i>2.2.3.1</i>	<i>Porosidade</i>	<i>37</i>
<i>2.2.3.2</i>	<i>Permeabilidade</i>	<i>38</i>
<b>2.3</b>	<b>Estrutura das rochas sedimentares</b>	<b>38</b>
<b>2.4</b>	<b>Comportamento das rochas sob temperaturas elevadas</b>	<b>39</b>
<i>2.4.1</i>	<i>Propriedades térmicas da rocha</i>	<i>40</i>
<i>2.4.1.1</i>	<i>Condutividade térmica</i>	<i>40</i>
<i>2.4.1.2</i>	<i>Calor específico</i>	<i>43</i>
<i>2.4.1.3</i>	<i>Dilatação térmica</i>	<i>43</i>
<i>2.4.2</i>	<i>Propriedades da rocha como meio poroso</i>	<i>44</i>
<i>2.4.2.1</i>	<i>Porosidade</i>	<i>44</i>
<i>2.4.2.2</i>	<i>Permeabilidade</i>	<i>45</i>

3 Programa Experimental.....	47
3.1 Materiais e métodos .....	47
3.1.1 <i>Formulação dos concretos</i> .....	47
3.1.2 <i>Confecção das amostras</i> .....	48
3.1.3 <i>Instrumentação para medição das temperaturas</i> .....	50
3.2 Ensaio térmico .....	50
3.3 Caracterização dos materiais concreto e rocha .....	51
3.4 Resultados experimentais .....	51
3.4.1 <i>Conclusões experimentais</i> .....	55
4 Modelo físico e Formulação termo-hídrica .....	59
4.1 Hipóteses gerais .....	59
4.2 Balanço de energia .....	60
4.3 Descrição das fases: bases para o balanço de massa .....	62
4.3.1 <i>Massas específicas volumétricas aparentes</i> .....	62
4.3.2 <i>Pressão parcial e leis dos gases perfeitos</i> .....	64
4.3.3 <i>Leis de conservação da massa</i> .....	64
4.3.3.1 <i>Conservação da massa de água líquida</i> .....	64
4.3.3.2 <i>Conservação da massa de vapor de água</i> .....	65
4.3.4 <i>Conservação da massa total de água</i> .....	65
4.3.4.1 <i>Equação dos fluxos hídricos</i> .....	65
4.3.4.2 <i>Lei de Clapeyron</i> .....	66
4.3.4.3 <i>Isotermas de sorção e desorção</i> .....	67
4.3.4.4 <i>Modelo hídrico final</i> .....	67
4.4 Evolução das propriedades .....	68
4.4.1 <i>Evolução da condutividade térmica</i> .....	68
4.4.2 <i>Evolução da permeabilidade</i> .....	70
4.4.3 <i>Pressão de vapor saturante</i> .....	71
4.4.4 <i>Cinética de desidratação</i> .....	71
4.4.5 <i>Porosidade total</i> .....	72
4.4.6 <i>Massa volumétrica da água líquida</i> .....	72
4.4.7 <i>Viscosidades dinâmicas</i> .....	72
4.4.8 <i>Calor latente de vaporização</i> .....	73

4.4.9	<i>Calor latente de desidratação</i> .....	73
5	Implementação no CAST3M .....	74
5.1	Descrição geral do CAST3M .....	74
5.2	Implementação do modelo termo-hídrico no Castem .....	75
6	Aplicação do modelo termo-hídrico para a bicamada.....	77
6.1	Resultados do modelo TH .....	79
6.1.1	<i>Temperatura absoluta</i> .....	79
6.1.2	<i>Taxa de variação das temperaturas</i> .....	84
6.1.3	<i>Saturação</i> .....	86
6.1.4	<i>Pressão de vapor</i> .....	86
6.1.5	<i>Considerações sobre os resultados numéricos</i> .....	90
6.1.5.1	<i>Temperatura</i> .....	90
6.1.5.2	<i>Saturação</i> .....	90
6.1.5.3	<i>Pressão</i> .....	91
7	Conclusões e perspectivas .....	92
	REFERÊNCIAS .....	94
	APÊNDICES .....	99
A	Código no CAST3M .....	99
B	Equação de Clapeyron .....	111
B.1	Gás perfeito .....	113
B.2	Líquido incompressível .....	116
B.3	Mudança de fase .....	119

# 1 Introdução

O concreto é o material estrutural mais usado no mundo, e sua história remete a construções de milhares de anos, tendo a sua origem uma relação íntima com a descoberta e o progressivo desenvolvimento de materiais coesivos para realizar a união de pedras e tijolos. Ainda que seja difícil definir onde e quando exatamente surgiu o concreto como o conhecemos hoje, sabe-se que durante o Império Romano (Figura 1.1) houve um notável desenvolvimento da tecnologia do concreto, com seu uso eficaz e em larga escala.

Atualmente, o consumo mundial de cimento ultrapassa bilhões de toneladas, o que pode dar uma estimativa do consumo de concreto. O consumo mundial de cimento em 2009<sup>1</sup> foi de 3 bilhões de toneladas, enquanto no Brasil foi registrado um consumo de 51,9 milhões de toneladas no mesmo período. Esse uso massivo pode ser creditado a fatores diversos como resistência, baixo custo, baixa exigência de especialização da mão de obra e fácil execução.

Ao contrário do que se pode supor através da constatação do uso difundido do concreto, os estudos em relação à sua eficiência e comportamento não param, e tendem a aumentar visto a diversidade de aplicações dada ao concreto, algumas de importância relevante em que a segurança proporcionada por um material com qualidades adequadas é a principal exigência.

Em muitos casos deve-se trabalhar com o objetivo de obter um bom desempenho das estruturas em ambientes agressivos. São exemplos de agressividade ambiental locais muito úmidos (fundações, túneis, tanques), ambientes industriais (presença de substâncias corrosivas), poluição (grandes cidades, tráfego intenso) e temperaturas elevadas (repositórios de rejeitos radioativos, fornos).

O foco do presente trabalho é abordar a influência da temperatura no comportamento do concreto: como se dá a distribuição do calor na estrutura, que modificações e deteriorações o aquecimento pode causar e como isso ocorre quando o concreto está unido a um bloco de rocha.

O concreto pode ser submetido a temperaturas elevadas acidentalmente ou estas podem fazer parte de suas condições normais de trabalho. O aquecimento pode ser causado

---

<sup>1</sup>Números divulgados pelo Sindicato Nacional da Indústria do Cimento através do sítio <http://www.snica.org.br> (acessado em 22/09/2011)



Figura 1.1: Cúpula do Panteão Romano em cimento pozolânico e agregado leve, com alvéolos que reduzem o peso da estrutura

por incêndios (Figura 1.2), com maior risco em locais de difícil acesso como túneis, prédios muito altos e construções subterrâneas; por acidentes em reatores nucleares com o vazamento do líquido de refrigeração (loss-of-coolant accident - LOCA), que pode levar à fusão o revestimento interno de aço do reator, expondo o concreto que reveste a estrutura (Figura 1.3); e ainda pelo depósito dos rejeitos nucleares em tanques subterrâneos de concreto.

Observações e experimentações realizadas em diversos estudos conduzidos nesta área revelam que a elevação da temperatura do concreto gera certas transformações físico-químicas e microestruturais que conduzem a uma modificação das características mecânicas [14]. O “spalling” (desplacamentos que ocorrem no concreto submetido a temperaturas elevadas), por exemplo, pode reduzir a capacidade de carga da estrutura afetada e inicia-se a partir de mecanismos internos que geram gradientes de temperatura e pressão. Segundo KHOURY et al. (2002, [15]) 75% da espessura do concreto foi perdida por “spallings” sucessivos no incêndio do túnel que faz parte do complexo “The Great Belt” em 1994, na Dinamarca, e em 1996 no túnel do Canal da Mancha 100% da espessura do concreto sofreu “spalling”. No caso dos reatores nucleares, ainda de acordo com KHOURY et al. (2002, [15]), a umidade presente no concreto desacelera e captura a radiação emitida pelo núcleo do reator, atuando como um escudo biológico. Sendo assim, é importante o conhecimento do estado estrutural do concreto em reatores tanto em situações normais quanto em acidentes para assegurar a manutenção de sua proteção biológica.

As situações de acidente e de condições normais de trabalho se distinguem pela elevação



(a) Pilar atingido pelo incêndio no Aeroporto Santos Dumont, Rio de Janeiro, 1998 [12]



(b) Armadura exposta após incêndio no Chanel Tunnel, França - Inglaterra [13]



(c) Colapso estrutural do Gotthard Tunnel, Suíça [13]

Figura 1.2: Estruturas em concreto danificadas pelo fogo

brusca ou gradual da temperatura. Uma vez que o concreto é um material poroso, altamente heterogêneo e composto por várias fases, ocorrem fenômenos complexos que incluem transporte de massa, de energia e reações químicas. Seja qual for a forma de exposição, tais fenômenos podem prejudicar profundamente a integridade estrutural do concreto, provocando a degradação das suas características mecânicas e comprometendo a capacidade da estrutura de desempenhar o papel para o qual foi projetada. Pode-se concluir que a estabilidade da estrutura depende da evolução das características do concreto durante a exposição às temperaturas elevadas.

Neste trabalho serão analisados os resultados de um modelo acoplado termo-hídrico aplicado ao problema de transporte de energia e massa em meios porosos compostos por concreto e rocha. Os cálculos térmicos e hídricos foram implementados no código para

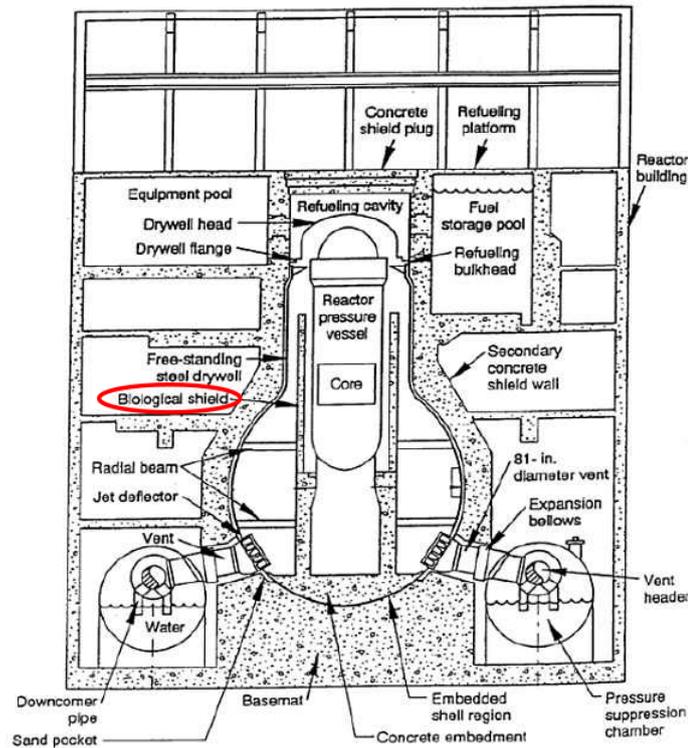


Figura 1.3: Esquema de um reator GE Mark I BWR da General Electric<sup>2</sup>

análise estrutural Castem (DMT/CEA - Département de Mécanique et Technologie du Commissariat à l'Énergie Atomique). O modelo é comparado aos resultados do programa experimental desenvolvido na Universidade de Cergy-Pontoise, na França, e que será posteriormente detalhado.

## 1.1 Motivação e objetivos

O objetivo deste estudo é analisar o comportamento de uma amostra bicamada de concreto e rocha por um modelo que considera os aspectos térmicos e hídricos, e a interferência que um comportamento gera no outro.

Assim como o concreto, a rocha é um meio poroso no qual a matriz mineral forma um esqueleto sólido que é complementado por espaços vazios. Desta forma, o objetivo é analisar a continuidade dos fenômenos térmicos e hídricos entre estes dois meios porosos de propriedades diferentes e apresentar as potencialidades tanto do modelo empregado quanto do código Castem.

<sup>2</sup>fonte: <http://www.constructionknowledge.net>, acessado em 28/09/2011. Maiores informações em <http://www.ge.com>

## 1.2 Estrutura da dissertação

Este trabalho consistiu de uma etapa experimental, na qual foram desenvolvidos ensaios térmicos em corpos-de-prova feitos em bicamadas de concreto e rocha; e da implementação de um modelo que descreve os fenômenos de transporte de calor e de massa nos meios porosos quando aplicadas cargas de elevação térmica.

A dissertação é estruturada em seis capítulos, além desta introdução, da seguinte maneira:

- O **Capítulo 2** traz uma visão geral dos materiais abordados neste trabalho e alguns resultados e modelos existentes na bibliografia relacionada;
- O **Capítulo 3** contém o detalhamento do programa experimental desenvolvido;
- No **Capítulo 4** encontra-se uma descrição do modelo físico que trata o concreto e a rocha como materiais porosos multifásicos e é feita a apresentação da formulação termo-hídrica empregada;
- O **Capítulo 5** introduz noções sobre o código Castem e traz a estrutura da implementação do modelo;
- O **Capítulo 6** traz a descrição da aplicação numérica;
- O **Capítulo 7** apresenta as conclusões e as perspectivas futuras.

## 2 Descrição do concreto e da rocha e a influência da temperatura

Ao contrário de materiais como a madeira e o aço, o concreto é capaz de resistir por longos períodos aos efeitos das altas temperaturas. Ele mantém características de resistência que, mesmo não sendo as adequadas ao seu funcionamento normal, são no mínimo suficientes para garantir certa estabilidade até a tomada das primeiras medidas de segurança.

Muitos são os fatores que determinam a resposta do concreto às elevações térmicas. A composição do concreto interfere na medida em que seus constituintes podem reagir quimicamente com o aumento da temperatura, criando processos mecânicos como expansões, fragmentações, fissurações e perda de resistência. A microestrutura porosa e permeável e a capacidade de conduzir calor, além de dependerem da composição do concreto citada anteriormente, também governam o transporte dos fluidos e o desenvolvimento das pressões internas aos poros. Não menos importante é a taxa de aquecimento, que interfere no comportamento global da estrutura, podendo caracterizar um aquecimento mais ou menos agressivo.

Neste capítulo serão discutidos a composição do concreto e da rocha, e o comportamento de seus constituintes com relação à temperatura. Também noções sobre os parâmetros térmicos e hídricos, como condutividade térmica, permeabilidade e porosidade, serão apresentadas.

### 2.1 Estrutura do concreto

O concreto é um compósito formado basicamente por cimento, água e agregados. Quando seco, o cimento não possui características coesivas (de ligação). Ele adquire esta propriedade ao ser misturado à água, ou seja, após ser hidratado. Os agregados são materiais granulares que normalmente são classificados como finos ou graúdos para o concreto. De uma maneira geral, variando-se a dosagem destes componentes, pode-se obter diferentes tipos de concreto, classificados de acordo com a sua resistência à compressão: concretos de baixa resistência (até 20 MPa), concretos de resistência moderada (entre 20 MPa e 40

MPa) e concretos de resistência alta (resistência à compressão maior que 40 MPa). Os concretos de resistência moderada são os concretos convencionais, usados na maioria dos trabalhos de engenharia civil. Os concretos de alta resistência são também conhecidos como concretos de alto desempenho, e têm aplicações especiais, como em estruturas de grande porte com o objetivo de reduzir as dimensões de pilares e vigas.

Macroscopicamente, verifica-se facilmente a existência de duas fases distintas formadas pelos agregados, de diversos tamanhos e formas, e pela pasta de cimento hidratado. No âmbito microscópico observa-se a maior complexidade do material. As duas fases citadas anteriormente mostram sua heterogeneidade e a distribuição espacial irregular de sólidos e vazios. Segundo MEHTA e MONTEIRO (1993, [2]), para uma pasta de cimento bem hidratado, esta distribuição não-homogênea pode ser ignorada na construção de um modelo de comportamento do material. Entretanto, em análises microestruturais mais minuciosas da pasta de cimento hidratado presente no concreto esta simplificação não deve ser uma regra. Isso decorre do fato de que o elo entre os agregados e a pasta de cimento hidratado costuma ser o ponto fraco do material quando é solicitado por cargas diversas. Por isso, ainda segundo MEHTA e MONTEIRO (1993, [2]), a interface, ou zona de transição, entre os agregados graúdos e a pasta de cimento costuma ser considerada como a terceira fase da estrutura do concreto.

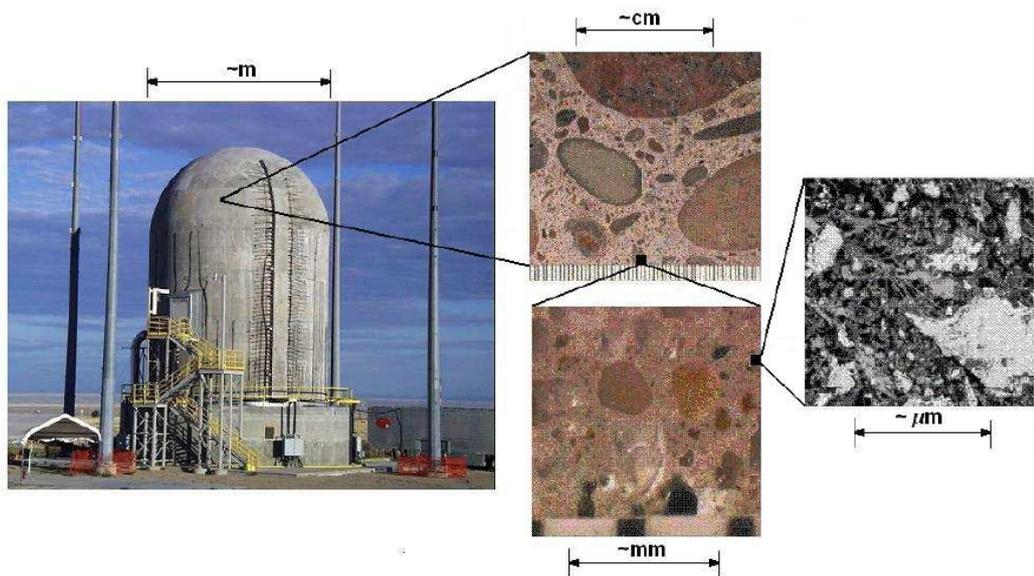


Figura 2.1: Constituintes do concreto em três escalas de observação [1]

### 2.1.1 Pasta de cimento hidratado

O cimento Portland é um pó cinza composto principalmente por clínquer, fonte de silicato tricálcico (C3S ou  $3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ ) e silicato dicálcico (C2S ou  $2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ ). O cimento misturado à água forma uma pasta que adquire resistência mecânica. A água é o agente que provoca o efeito ligante do cimento, sendo essencial na fabricação do concreto. A sua dosagem, bem como os cuidados posteriores à fabricação quanto ao controle da perda de água, são de fundamental importância para a qualidade do concreto.

Os principais hidratos da pasta de cimento são o silicato de cálcio hidratado, ou CSH ( $\text{CaO} \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ), e o hidróxido de cálcio, ou  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , representando aproximadamente 60% e 25% do volume de sólidos da pasta de cimento hidratado, respectivamente. Ambos sofrem a desidratação com a elevação da temperatura no concreto, o que faz com que produtos anidros sejam criados e vapor de água seja adicionado à fase fluida. A desidratação da pasta de cimento interfere nas propriedades mecânicas do concreto, uma vez que o CSH é o principal elemento que confere resistência à matriz cimentícia.

#### 2.1.1.1 Água

A água pode estar presente de diversas maneiras no concreto, como mostrado na Figura 2.2, sendo que a classificação dos tipos de água está relacionada principalmente à dificuldade de “retirar” cada um deles do concreto. Além da água no estado de vapor presente nos vazios, a água no concreto pode ser encontrada nas seguintes formas [2]:

**Água capilar.** É a água que permanece nos vazios do concreto após todo o cimento ser hidratado. Diferencia-se a água capilar presente nos vazios maiores ( $> 0,05 \mu\text{m}$ ), denominada água livre, da água capilar mantida pela tensão capilar em vazios menores (vazios capilares com  $0,005$  a  $0,05 \mu\text{m}$ ). A remoção da água livre não causa alteração de volume no concreto. Já a remoção da água sob tensão capilar causa a retração do sistema.

**Água absorvida.** Sob a influência de forças atrativas as moléculas de água mais próximas das superfícies sólidas estão fisicamente ligadas a esta superfície. Sugere-se que uma camada de água de até  $15\text{Å}$  pode estar ligada através de pontes de hidrogênio. A perda da água absorvida é a principal causa da retração por secagem.

**Água interlamelar.** Água associada à estrutura de silicato de cálcio hidratado (CSH).

Sugere-se que uma camada de água monomolecular entre as camadas de CSH esteja fortemente ligada através de pontes de hidrogênio. Esta água só é perdida sob forte processo de secagem, provocando nessa ocasião intensa retração do concreto.

**Água quimicamente ligada.** É a água que faz parte da composição química dos hidratos da pasta de cimento. Essa água não se perde por secagem, mas apenas por decomposição dos hidratos quando aquecidos.

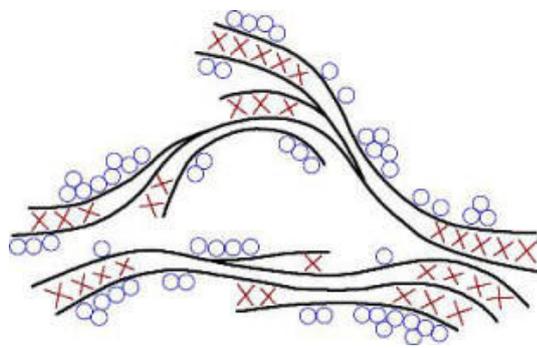


Figura 2.2: Modelo Feldman-Sereda (FELDMAN e SEREDA, 1970 apud MEHTA e MONTEIRO, 1993 [2]) para a microestrutura do concreto: os círculos representam a água absorvida fisicamente, os “x” são a água interlamelar e as linhas são as camadas de silicato de cálcio hidratado (CSH)

### 2.1.2 Agregados

Os agregados podem ser dos mais variados tipos, dependendo da rocha do qual são extraídos, e têm grande responsabilidade no desempenho do concreto. Os agregados influenciam algumas características do concreto como a retração e a resistência à abrasão, sendo uma de suas finalidades a melhoria de tais características. Geralmente são inertes, o que confere maior importância às suas características físicas do que às características químicas em relação à sua atuação no concreto em condições normais. Eles são a fase predominantemente responsável pelo peso (de 65% a 85%) e módulo de elasticidade do concreto. Se um controle adequado da qualidade dos agregados não é feito eles podem interferir negativamente na resistência final do compósito: quando muito grandes, criam zonas fracas devido à tendência de a água se acumular na superfície do agregado e se apresentam elevada porosidade, conseqüentemente são menos resistentes.

Uma vez que constituem o esqueleto pelo qual são transmitidos os esforços, a integridade física dos agregados têm extrema importância na qualidade do concreto. Sob o efeito da temperatura, as propriedades dos agregados podem evoluir, devendo-se então conhecer seus limites para atenuar os riscos de degradação do concreto [16]. Como os agregados constituem uma parcela grande na composição do concreto, as expansões diferenciais resultantes do aquecimento, em relação à pasta de cimento, podem ser destrutivas para o concreto. Essas expansões podem causar microfissuras e contribuir para o “spalling”. Já a maneira como as microfissuras se propagam depende da intensidade das tensões geradas na interface entre o agregado e a pasta de cimento. Agregados com coeficientes de expansão térmica menores se dilatam menos e, conseqüentemente, amenizam a microfissuração.

Propriedades como a condutividade e a dilatação térmicas e os danos sofridos pelo agregado devido à temperatura dependem da sua constituição mineralógica. As rochas mais utilizadas para a produção de concreto na região sudeste do Brasil são o basalto, o calcário, o gnaiss e o granito [17]. O basalto possui baixa condutividade; os calcários calcítico ( $\text{CaCO}_3$ ) e dolomítico ( $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ) possuem condutividade média e o quartzo (presente nos granitos e gnaisses em concentrações diversas), condutividade mais elevada. A presença de sulfeto de ferro ( $\text{FeS}_2$ ) no agregado gera oxidação lenta em torno dos  $150^\circ\text{C}$ , causando desintegração do agregado e conseqüente ruptura do concreto [18] [19]. Agregados silicosos contendo quartzo ( $\text{SiO}_2$ ), como granito e arenito, podem causar um desgaste no concreto quando a temperatura atinge  $573^\circ\text{C}$  [2]. Isso acontece devido à transformação do quartzo, que passa de sua forma estrutural mais comum e estável, conhecida como quartzo alfa, para a forma estrutural de quartzo beta. O quartzo beta tem maior simetria e é menos denso. A conversão de quartzo alfa para quartzo beta é rápida, reversível e é acompanhada de uma ligeira absorção de energia. Esse processo gera uma expansão repentina da ordem de 0,85 % [2]. No caso das rochas carbonáticas (como o calcário) também ocorre um desgaste no concreto à temperatura de  $700^\circ\text{C}$  devido à reação de descarbonatação (decomposição dos carbonatos em óxidos de cálcio e magnésio e em dióxido de carbono). A descarbonatação do calcário é um processo endotérmico, ou seja, absorve calor retardando a evolução da temperatura. Além disso o óxido de cálcio ( $\text{CaO}$ ) pode reagir com a umidade formando assim o  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ , cujo volume é superior ao do agregado inicial, gerando expansão, fragmentação do agregado e fissuração no concreto.

Como se observa, a mineralogia do agregado influencia sua degradação térmica e deter-

mina as expansões diferenciais entre agregado e pasta de cimento, bem como a resistência na zona de transição.

## 2.2 Comportamento do concreto sob temperaturas elevadas

Devido ao caráter heterogêneo de material compósito do concreto observa-se que seu comportamento sob temperaturas maiores que a normal (acima de 60 °C) envolve processos bem mais complexos do que um simples aumento de temperatura pode sugerir. Apenas a consideração das propriedades térmicas não é suficiente para descrever esse comportamento. A fissuração e o fenômeno do “spalling” dependem diretamente de como a temperatura gera tensões na matriz sólida e da pressão exercida pelas fases fluidas presentes nos poros. É necessário então considerar, além das transferências térmicas, o escoamento das espécies fluidas (ar seco, água líquida, vapor d’água), os fenômenos de hidratação e desidratação da matriz e os efeitos termo-mecânicos. Todo esse mecanismo gera profundas modificações na microestrutura do concreto.

Durante o aquecimento, o concreto passa por diferentes fases que descrevem, cada uma, as reações entre seus componentes. DAL PONT (2004, [20]) explica as diferentes fases do concreto aquecido até o aparecimento do “spalling”:

1. Logo que se tem início o aquecimento, observa-se um aumento da temperatura na superfície aquecida. A umidade dentro do concreto, sob forma de água líquida e de vapor, se desloca em direção à zona fria do concreto por difusão.
2. Quando a temperatura atinge 100°C, começa a ebulição da água. O vapor se desloca para as zonas frias: pode-se observar a condensação. O calor latente requerido para a ebulição da água retarda o aumento da temperatura até a completa ebulição da água na porção de interesse do concreto.
3. Ao mesmo tempo, o vapor que condensa na zona fria pode se ligar ao cimento não-hidratado e acontece uma nova hidratação. Nesta fase, a formação de novos CSH promove geralmente uma melhora das propriedades mecânicas do concreto.
4. O aumento da temperatura provoca também o fenômeno da desidratação. A partir da temperatura de 105°C, as ligações químicas que formam o CSH começam a

se destruir, transformando os produtos hidratados em produtos anidros e água. A água livre que é liberada no concreto se vaporiza, absorvendo calor. A reação de desidratação atinge progressivamente vários produtos hidratados que formam o concreto, de acordo com a temperatura alcançada: a partir do momento em que a temperatura aumenta, obtém-se pouco a pouco mais água livre no concreto e mais água que se vaporiza. A vaporização, sendo uma reação endotérmica, influencia o aquecimento do concreto ao retardar a propagação do calor.

5. A água livre tem tendência de se deslocar para as zonas frias do concreto. Como o concreto, e em particular o concreto de alto desempenho (CAD), tem uma permeabilidade baixa, a água líquida e o vapor d'água não podem penetrar tão rapidamente nas zonas frias. Além disso, a formação de água após a desidratação é mais rápida do que a fuga da água e do vapor. O resultado da combinação desses dois efeitos é que a pressão nos poros aumenta e pode chegar a valores da ordem de algumas atmosferas. Observa-se também que o pico de pressão se desloca em direção ao lado frio do concreto aumentando progressivamente seu valor. O aumento da pressão do gás nos poros do concreto é também a base do fenômeno do “spalling” que causa o descolamento da camada externa do material.

### **2.2.1 Fenômeno do lascamento ou “spalling”**

O “spalling” é o destacamento de fragmentos da superfície do concreto exposta a temperaturas elevadas e pode prejudicar seriamente a integridade de toda a estrutura através da exposição do aço estrutural diretamente ao fogo, do aumento do risco de flambagem de elementos sob compressão, da perda de propriedades de isolamento, entre outros danos. Este fenômeno é normalmente explicado por dois mecanismos [21]:

**Processo termo-mecânico:** caracterizado pelos altos gradientes de temperatura, principalmente nos primeiros centímetros da superfície exposta. Estes gradientes podem ser muito importantes nos casos de aquecimento rápido, como no caso de um incêndio, e induzem à altas tensões de compressão próximo à superfície exposta. Estas tensões podem localmente ultrapassar a resistência do concreto e causar a ejeção de pedaços.

**Processo termo-hídrico:** os fluidos movem-se devido aos gradientes de pressão e concentração molar (Lei de Darcy e Lei de Fick). Os fluidos tendem a mover-se para as zonas mais internas e mais frias do concreto. Assim, o vapor d'água começa a condensar e uma obstrução da umidade (“moisture clog”) é gradualmente criada perto da superfície exposta. Esta obstrução é considerada uma região do concreto com grande teor de água. Como esta obstrução atua como uma barreira para o escoamento do fluido, a pressão nos poros aumenta. Estas pressões podem localmente ultrapassar a resistência à tração do concreto e iniciar o “spalling”.

Sabe-se que os concretos de alta performance ou alto desempenho apresentam maiores riscos de sofrer com o “spalling” explosivo devido à sua menor permeabilidade e porosidade. Isso acontece devido ao desenvolvimento de pressões mais altas no interior dos poros, uma vez que o escoamento dos fluidos geradores dessa pressão é dificultada.

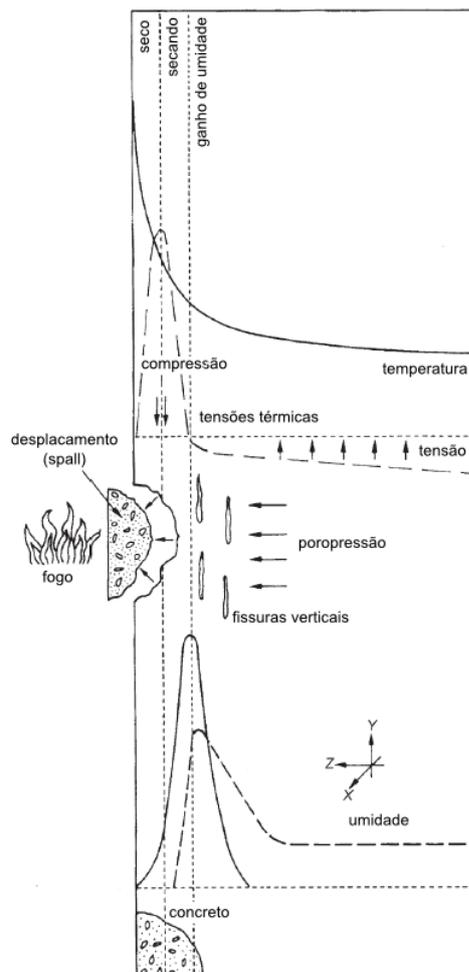


Figura 2.3: Mecanismos causadores do “spalling” (KHOURY [3] apud KUKLA, 2010 [1])

A Figura 2.4 mostra resultados medidos e calculados por ZHUKOV e SHEVCHENKO (1974, apud BAZANT e KAPLAN, 1996 [4]) para a poro pressão em função da distância da superfície aquecida. Esses perfis caracterizam o fenômeno do “moisture clog” que causam o “spalling”.

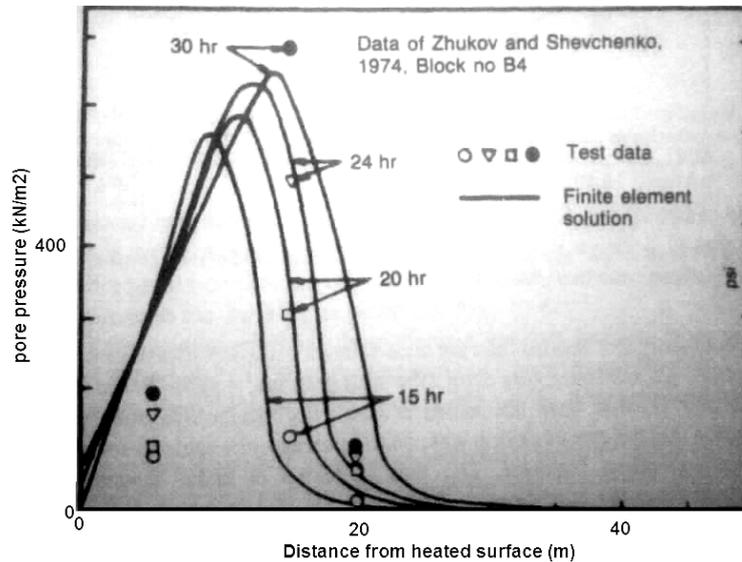


Figura 2.4: Variação da pressão nos poros em função da distância da superfície aquecida e do tempo (ZHUKOV e SHEVCHENKO, 1974 apud BAZANT e KAPLAN, 1996 [4])

## 2.2.2 Propriedades térmicas do concreto

### 2.2.2.1 Condutividade térmica

O calor flui em um meio sólido através de condução sempre que há um gradiente de temperatura. O fluxo de calor ( $q_\lambda$ ) é proporcional, portanto, ao gradiente de temperatura na direção considerada ( $x$ ) multiplicado pela área através da qual o calor é transferido ( $A$ ). Essa relação é representada pela Lei de Fourier, definida pela Equação 2.1, na qual  $\lambda$  representa uma propriedade do meio chamada condutividade térmica. A condutividade térmica representa a quantidade de calor que fluirá por unidade de tempo através de uma unidade de área quando o gradiente de temperatura for unitário.

$$q_\lambda = -\lambda A \frac{dT}{dx}. \quad (2.1)$$

Essa propriedade incorpora as características complexas de um processo submicroscópico que se dá através da interação dos átomos em colisões elásticas e inelásticas para a

propagação de energia [22]. Embora estas colisões também ocorram em âmbito submicroscópico em líquidos e gases, nos fluidos a forma mais eficaz de transporte de energia é a convecção estabelecida pelos gradientes de densidade.

A condutividade térmica do concreto é influenciada pela mineralogia dos agregados, pelo teor de umidade, densidade e temperatura do concreto. A Tabela 2.1, adaptada da referência [2], mostra valores típicos para a condutividade térmica de concretos feitos com diferentes tipos de agregados.

Tipo de agregado	Condutividade térmica
	$Wm^{-1}^{\circ}C^{-1}$
Quartzito	3,5
Dolomita	3,2
Calcário	2,6 - 3,3
Granito	2,6 - 2,7
Riolito	2,2
Basalto	1,9 - 2,2

Tabela 2.1: Valores de condutividades térmicas para concretos com diferentes tipos de agregados [2]

A Tabela 2.2 adaptada de BLUNDELL et al. (1976) (apud BAZANT e KAPLAN, 1996 [4]) também mostra valores para a condutividade térmica de concretos feitos com diferentes agregados para temperaturas entre  $5^{\circ}C$  e  $25^{\circ}C$ .

	Tipo de agregado	Condutividade térmica
		$Wm^{-1}^{\circ}C^{-1}$
1.	Rochas silicosas, ex: quartzito e arenito	2,4 - 3,6
2.	Rochas ígneas cristalinas, ex: granitos Rochas sedimentares, ex: calcário e dolomita	1,9 - 2,8
3.	Rochas ígneas amorfas, ex: basalto	1,0 - 1,6

Tabela 2.2: Condutividades térmicas para concretos saturados em temperaturas entre  $5^{\circ}C$  e  $25^{\circ}C$  (BLUNDELL et al., 1976 apud BAZANT e KAPLAN, 1996 [4])

Ainda segundo BAZANT e KAPLAN (1996, [4]), a condutividade térmica da pasta de cimento Portland saturada é menor do que a condutividade da maioria dos agregados comuns, estando entre  $1,1$  e  $1,6 Wm^{-1}^{\circ}C^{-1}$  para temperaturas entre  $5^{\circ}C$  e  $15^{\circ}C$ . Ou seja, quanto maior o volume de agregados, maior será a condutividade do concreto. A quantidade de ar nos poros também interfere na resposta do concreto à condução de calor.

Uma vez que a condutividade térmica do ar é muito menor do que a condutividade da água, com o processo de desidratação e da perda de umidade de um meio inicialmente saturado, a tendência é que a condutividade térmica do concreto diminua com o aumento da temperatura.

Em um trabalho que analisa as propriedades dos concretos em temperaturas elevadas, HARMATHY (1970, [5]) propôs o cálculo das condutividades térmicas de quatro concretos com formulações distintas, que se diferenciam basicamente pelo tipo de agregado usado. Considerando-se que o concreto é um meio multifásico formado por duas fases principais, pasta de cimento e agregados, e conhecendo-se as frações volumétricas ( $\nu$ ) de cada fase, a referência [5] propõe o uso da relação de Maxwell-Eucken dada pela Equação 2.2, para sólidos compostos pela mistura aleatória de duas fases para o cálculo da condutividade térmica:

$$\lambda_{12} = \frac{\nu_1 \lambda_1 + \alpha \nu_2 \lambda_2}{\nu_1 + \alpha \nu_2}, \quad (2.2)$$

sendo  $\alpha$  dado pela seguinte relação:

$$\alpha = \frac{n \lambda_1}{(n - 1) \lambda_1 + \lambda_2}. \quad (2.3)$$

Sendo a fase 1 o principal meio contínuo da mistura, o fator  $n$  é função da distribuição geométrica da fase 2 na fase 1. A relação geométrica para uma fase dispersa feita de partículas esféricas (aproximação para os agregados no concreto) é dada para  $n = 3$ . Sendo assim a Equação 2.4 é a condutividade térmica proposta para concretos ( $C$ ) compostos pela pasta de cimento ( $c$ ) como meio contínuo principal e apenas um tipo de agregado ( $a$ ) como fase dispersa. As frações volumétricas  $\nu$  são consideradas independentes da temperatura:

$$\lambda_C = \lambda_c \frac{\nu_c (\lambda_a + 2\lambda_c) + 3\nu_a \lambda_a}{\nu_c (\lambda_a + 2\lambda_c) + 3\nu_a \lambda_c}. \quad (2.4)$$

A Figura 2.5 mostra os resultados obtidos teoricamente por HARMATHY (1970, [5]) para cada concreto através de valores experimentais e teóricos para a condutividade da pasta de cimento e dos agregados usados. A composição dos concretos 1 a 4 é dada na Tabela 2.3.

Pode-se considerar as curvas para os concretos 1 e 2 como envoltórias dos valores

Constituinte	Composição, fração em massa e volume							
	Concreto 1		Concreto 2		Concreto 3		Concreto 4	
	$\rho=2,295 \text{ g/cm}^3$		$\rho=2,333 \text{ g/cm}^3$		$\rho=1,417 \text{ g/cm}^3$		$\rho=1,173 \text{ g/cm}^3$	
	%m	%v	%m	%v	%m	%v	%m	%v
Pasta de cimento	0,156	0,25	0,154	0,25	0,253	0,25	0,196	0,16
Quartzo	0,844	0,73	—	—	—	—	—	—
Anortosito	—	—	0,846	0,73	—	—	—	—
Xisto expandido A	—	—	—	—	0,747	0,73	—	—
Xisto expandido B	—	—	—	—	—	—	0,804	0,82
Ar (poros)	—	0,02	—	0,02	—	0,02	—	0,02
	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0

Tabela 2.3: Informações sobre os quatro tipos de concreto estudados [5]

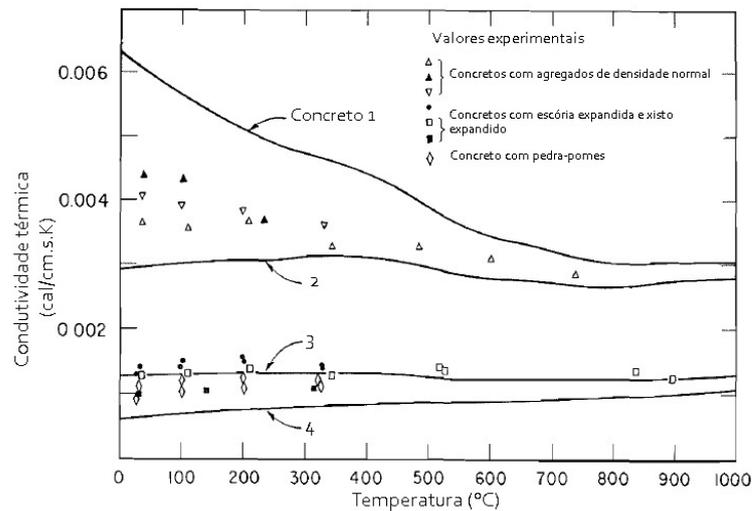


Figura 2.5: Condutividades térmicas para 4 concretos secos (sem teor de umidade) [5]

de condutividade térmica para concretos com agregados de densidade normal e maior condutividade. O mesmo se pode dizer das curvas para os concretos 3 e 4 em relação às condutividades dos concretos leves.

Ensaio desenvolvidos com concretos que não foram secos antes da medição das condutividades térmicas mostram um comportamento um pouco diferente. Pequenas elevações nas curvas de condutividade térmica de concretos feitos de diferentes agregados entre as temperaturas de  $25^{\circ}\text{C}$  e  $130^{\circ}\text{C}$  podem ser explicadas pelo fato de que a condutividade térmica da água cresce em torno de 13% nesta faixa de temperaturas [4]. Esse crescimento compensa a perda de umidade nesse intervalo, mas acima de  $100^{\circ}\text{C}$  a perda de água passa a ser significativa e a condutividade térmica do concreto cai mais acentuadamente.

Outras curvas teóricas foram propostas na literatura para descrever a evolução da condutividade térmica do concreto. A norma Europeia [6] para cálculo de estruturas em

concreto fornece duas curvas (Equações 2.5 e 2.6) que limitam a evolução da condutividade térmica com a temperatura para concretos de densidade normal (entre 2000 e 2600 kg/m<sup>3</sup> segundo a norma Europeia):

$$\lambda_{inf} = 1,36 - 0,136 \left( \frac{T}{100} \right) + 0,0057 \left( \frac{T}{100} \right)^2, \quad (2.5)$$

$$\lambda_{sup} = 2 - 0,2451 \left( \frac{T}{100} \right) + 0,0107 \left( \frac{T}{100} \right)^2. \quad (2.6)$$

Ambas as equações da norma Europeia fornecem a condutividade em W/mK e são válidas para temperaturas entre 20°C e 1200°C.

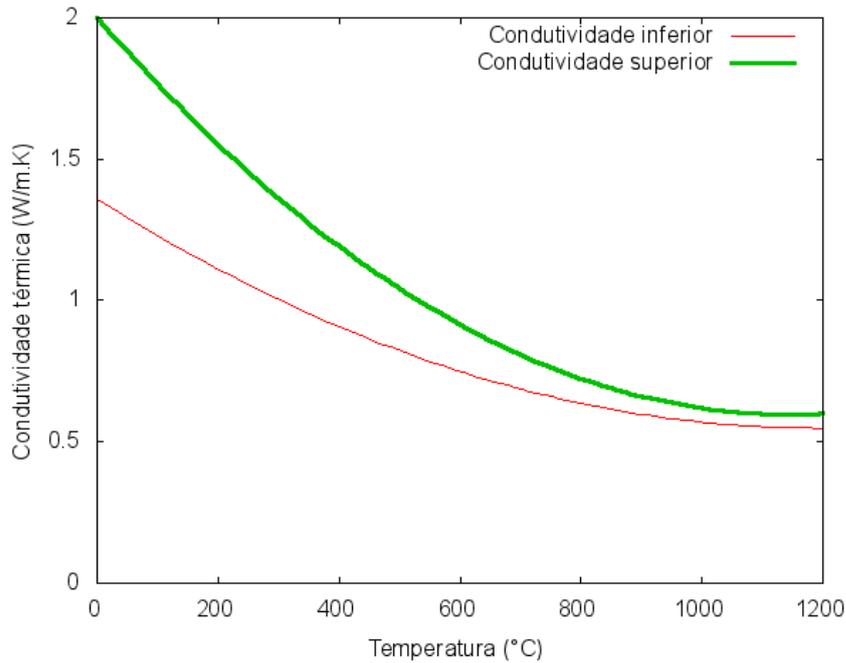


Figura 2.6: Limites inferior e superior para a condutividade térmica de concretos normais, conforme definição da norma Europeia

As normas Europeias, ou Eurocodes, são um conjunto de regras técnicas que foram desenvolvidas pelo Comitê Europeu de Normalização (“European Committee for Standardisation”) para regulamentar todos os trabalhos de engenharia e design estrutural na União Européia.

Para o cálculo da evolução das condutividades térmicas dos concretos de alta resistência a norma Europeia diz que cada país pode fazer uso de modelos diferentes, desde que respeitados os limites inferior e superior estabelecidos pelas Equações 2.5 e 2.6.

Os concretos confeccionados durante o programa experimental que será descrito adi-

ante, foram submetidos a ensaios para medição da evolução das suas condutividades térmicas. O gráfico da Figura 2.7 mostra os resultados obtidos para as condutividades experimentalmente em comparação com a evolução da norma.

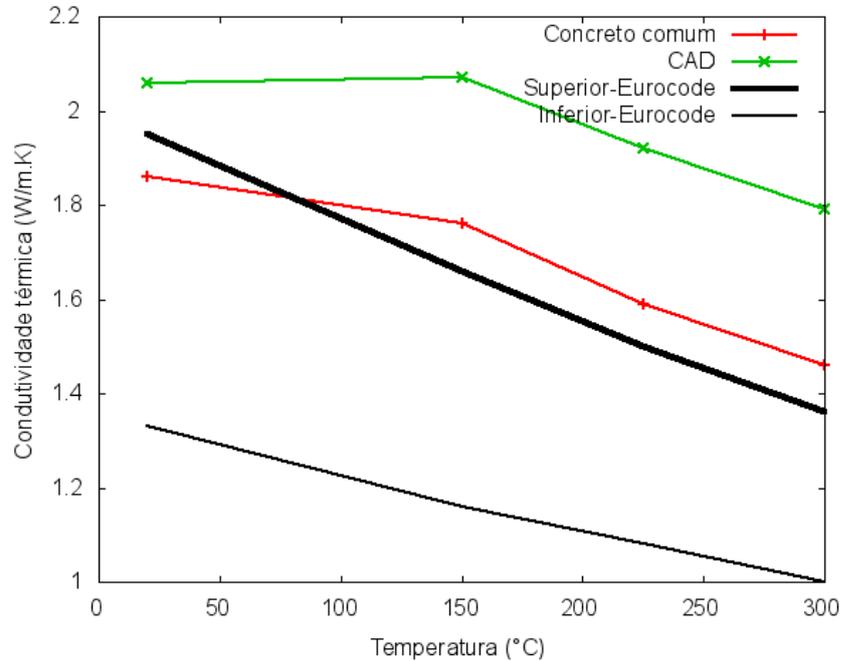


Figura 2.7: Valores experimentais para a condutividade térmica do concreto comum e do concreto CAD - Comparação com a evolução sugerida pela norma Europeia

#### 2.2.2.2 Calor específico do concreto

O calor específico é uma grandeza que caracteriza cada substância e representa a quantidade de calor necessária para variar de um grau a temperatura de uma unidade de massa do material.

Para o concreto seco de agregados silico-calcários tem-se a seguinte variação em função da temperatura dada pela norma Europeia:

$$c_p(T) = 900(\text{J/kg K}) \quad \text{se } 20^\circ\text{C} \leq T \leq 100^\circ\text{C} \quad (2.7)$$

$$c_p(T) = 900 + (T - 100)(\text{J/kg K}) \quad \text{se } 100^\circ\text{C} < T \leq 200^\circ\text{C} \quad (2.8)$$

$$c_p(T) = 1000 + (T - 200)/2(\text{J/kg K}) \quad \text{se } 200^\circ\text{C} < T \leq 400^\circ\text{C} \quad (2.9)$$

$$c_p(T) = 1100(\text{J/kg K}) \quad \text{se } 400^\circ\text{C} < T \leq 1200^\circ\text{C} \quad (2.10)$$

A fim de inserir a influência do teor de água, que não é explicitamente considerado

neste cálculo do calor específico, a norma adota valores constantes para esta propriedade entre as temperaturas de 100°C e 115°C, com um retorno linear para a função descrita acima entre as temperaturas de 115°C e 200°C.

$$c_p = 900(\text{J/kg K}) \quad \text{para um teor de água de 0\% do peso do concreto} \quad (2.11)$$

$$c_p = 1470(\text{J/kg K}) \quad \text{para um teor de água de 1,5\% do peso do concreto} \quad (2.12)$$

$$c_p = 2020(\text{J/kg K}) \quad \text{para um teor de água de 3,0\% do peso do concreto} \quad (2.13)$$

A Figura 2.8 mostra essa variação do calor específico. Os picos de calor específico na temperatura de ebulição da água, para teores de água maiores que zero, estão relacionados ao elevado calor latente dessa substância.

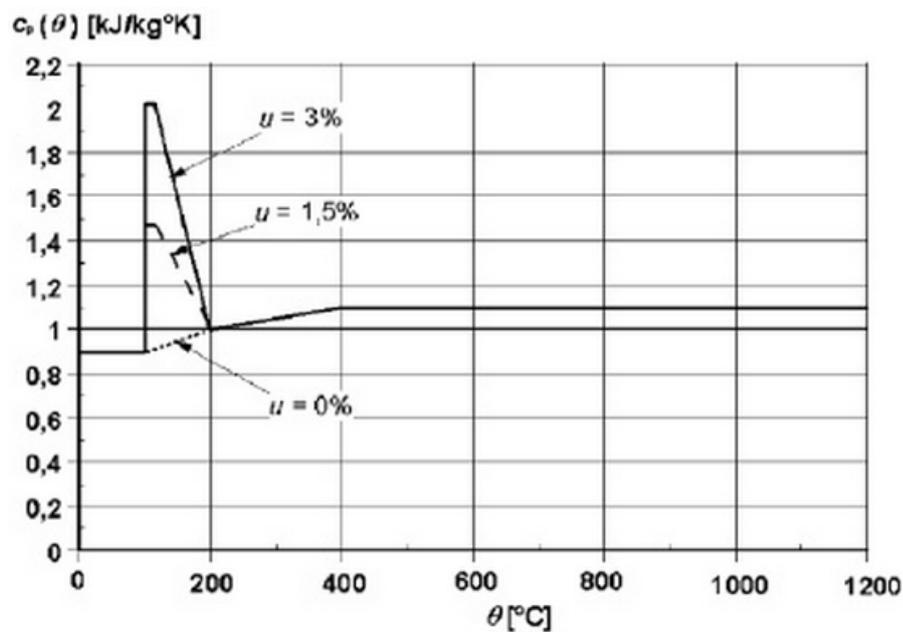


Figura 2.8: Calor específico do concreto segundo a norma Europeia [6] para três teores de água ( $u$ ) diferentes e em função da temperatura

### 2.2.2.3 Dilatação térmica do concreto

O coeficiente de dilatação térmica linear é a relação entre a variação de uma dimensão linear, por unidade de comprimento, causada por uma variação de temperatura, expresso

em  $^{\circ}\text{C}^{-1}$ . Essa relação é dada pela Equação 2.14:

$$\Delta L = L\alpha\Delta t, \quad (2.14)$$

onde  $\Delta L$  é a variação de comprimento dado em metro,  $L$  é o comprimento original da peça em metro,  $\alpha$  é o coeficiente de dilatação linear em  $^{\circ}\text{C}^{-1}$  e  $\Delta t$  é a variação de temperatura em  $^{\circ}\text{C}$ .

A real expansão do concreto é um resultado de duas ações que ocorrem ao mesmo tempo. A primeira é uma expansão normal típica dos sólidos anidros. A segunda, é uma expansão higrotérmica ou contração associada com o movimento da umidade interna dos capilares ou dos poros de géis (KIEGER e LAMOND, 1994 apud LIDUÁRIO, 2006, [23]).

De acordo com NOUMOWÉ (1995, [7]), a pasta de cimento se dilata assim que é aquecida até a temperatura de  $150^{\circ}\text{C}$ . Após isso, ela fica sujeita a uma forte retração por secagem, que se acentua além dos  $300^{\circ}\text{C}$  e predomina até as temperaturas mais elevadas (Figura 2.9).

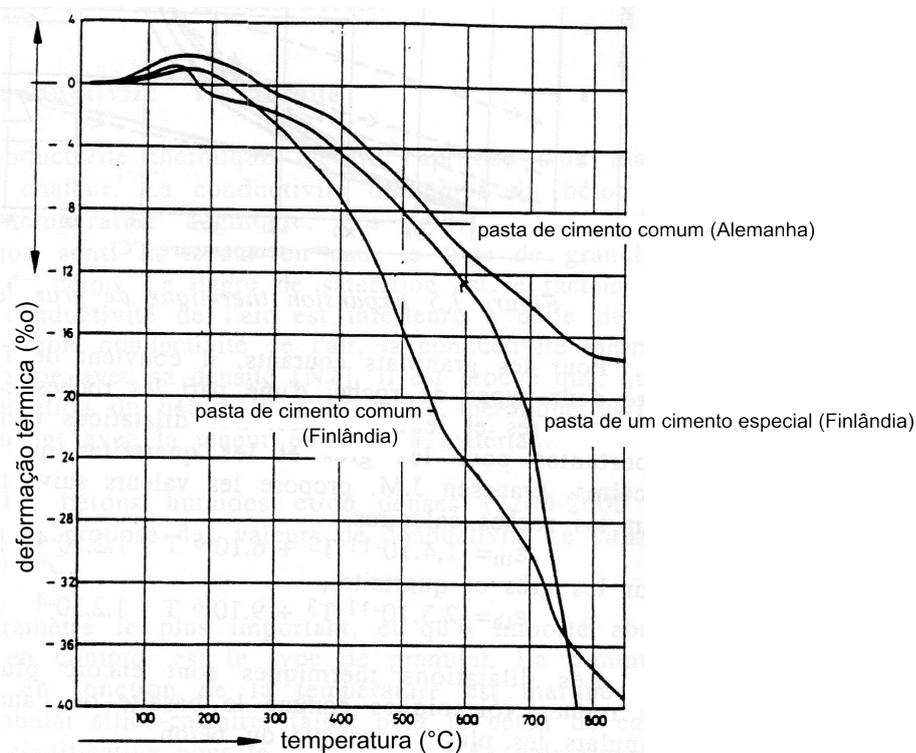


Figura 2.9: Deformação de origem térmica das pastas de cimento adaptado de DIEDE-RICHS (1989) apud NOUMOWÉ (1995, [7])

As dilatações térmicas dos agregados e da pasta de cimento são diferentes e, como já

citado anteriormente, essa diferença pode causar tensões e fissurações ao redor da interface e comprometer a qualidade do concreto. Sendo o principal constituinte volumétrico, a expansão térmica dos agregados até 600°C é o parâmetro dominante da deformação total do concreto [7], como mostram as curvas da Figura 2.10. Por isso é importante usar agregados que tenham uma dilatação térmica o mais próximo possível à da pasta de cimento.

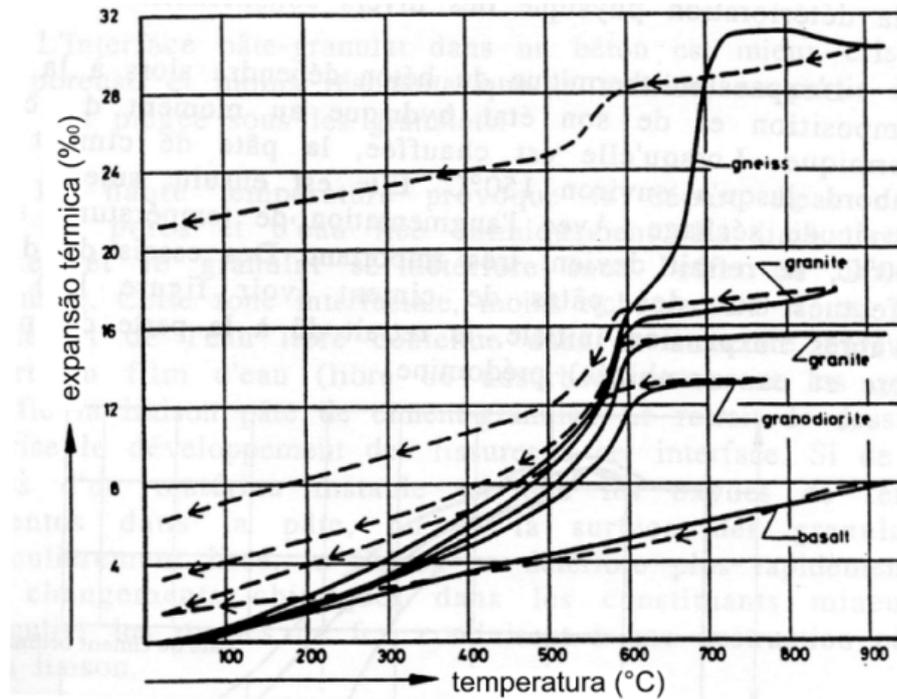


Figura 2.10: Expansão térmica medida para alguns agregados. Adaptado de DIEDERICHS (1989) apud NOUMOWÉ (1995, [7])

NOUMOWÉ (1995, [7]) diz que a dilatométrica dos agregados mostra que os agregados silico-calcários são mais expansivos que o calcário que por sua vez se dilata mais que o basalto. Os agregados silico-calcários se expandem fortemente além dos 350°C devido à degradação de seus constituintes.

A referência [24] cita os limites de  $2,2 \times 10^{-6}$  a  $3,9 \times 10^{-6}$  mm/mm/°C para o valor do coeficiente de dilatação térmica dos concretos, sendo  $3,1 \times 10^{-6}$  mm/mm/°C um valor típico.

### 2.2.3 Propriedades do concreto como meio poroso

#### 2.2.3.1 Porosidade

A porosidade do concreto tende a aumentar com a elevação da temperatura. Esse aumento pode ser devido a desidratação da pasta de cimento e consequente degradação da mesma, mas também pode ser gerado pela evolução da microfissuração. E no processo de aquecimento ambos os fenômenos costumam acontecer juntos. A Figura 2.11 mostra a evolução da porosidade total para dois concretos, um comum e um de alta resistência.

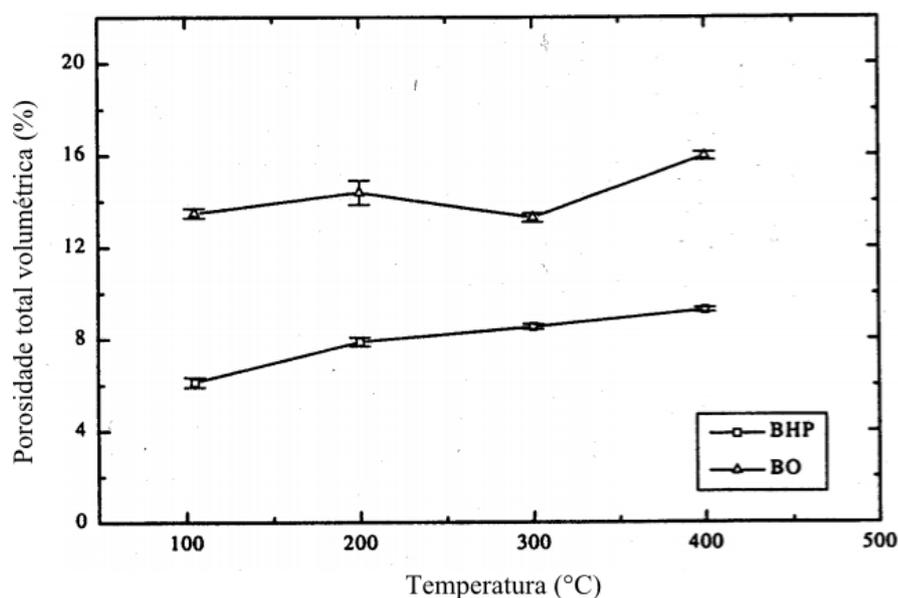


Figura 2.11: Evolução da porosidade para um concreto comum e um concreto de alto desempenho. Adaptado de KALIFA e MENNETEAU, 2000 apud MENO, 2004 [8]

KOMONEN e PENTTALA (2003, [25]) estudaram a evolução da porosidade com a temperatura e a sua distribuição espacial em pastas de cimento hidratado comum e com adição de fibras. Segundo KOMONEN e PENTTALA (2003, [25]), na pasta comum, a 50°C já se observa um aumento do tamanho dos poros, devido a evaporação da água. Com o crescimento da temperatura de 50°C para 75°C, a distribuição do tamanho dos poros na pasta comum não muda, mas o aumento da temperatura até 100°C causa um gradiente de temperatura grande o suficiente para modificar a estrutura porosa. Este efeito pode ser causado pela expansão e decomposição da etringita (composto formado inicialmente da hidratação e que pode se expandir em contato com a água carregada com o aquecimento). Após o fim da secagem da pasta de cimento, a porosidade muda em razão, principalmente, da decomposição dos componentes da pasta. Além de 400°C o tamanho dos poros cresce rapidamente devido a decomposição do hidróxido de cálcio ( $\text{Ca(OH)}_2$ ). A 600°C um novo

crescimento da porosidade é observado, provavelmente originado da porosidade do CaO formado durante a desidratação do hidróxido de cálcio. Em temperaturas ainda maiores, a porosidade da pasta de cimento continua a crescer.

A porosidade tem grande influência nas propriedades mecânicas do concreto, que quanto mais poroso, menos resistente se torna. Estudos neste sentido foram feitos por ROSTASY et al. (1980, [26]).

Neste trabalho, no âmbito termo-hídrico, a porosidade do concreto é função da desidratação, como será mostrado adiante.

### 2.2.3.2 Permeabilidade

A permeabilidade do concreto mede a facilidade que este material poroso tem de transferir fluidos sob gradientes de pressão. O fluxo de fluido ocorre através de uma rede porosa que compreende a porosidade inicial do material e as fissuras induzidas por solicitações termo-mecânicas [27]. A fissuração e o crescimento da porosidade geralmente interconectam os canais de fluxo, resultando no aumento da permeabilidade.

## 2.3 Estrutura das rochas sedimentares

Na etapa experimental deste trabalho foi empregada uma rocha do tipo sedimentar calcária. Por esse motivo, nesta seção serão descritos a estrutura e o comportamento sob temperatura elevada deste tipo de rocha.

De acordo com HOMAND (1999, [28]), as rochas sedimentares são formadas na superfície terrestre e no fundo das águas. Elas resultam da degradação das rochas pré-existentes. Seu depósito inicial em camadas aproximadamente horizontais resulta, segundo HOMAND (1999, [28]):

- da ação dos agentes de erosão e transporte (águas, inundações, geleiras, vento) que depositam detritos rochosos;
- da atividade de seres vivos (rochas orgânicas);
- de fenômenos físico-químicos (rochas hidroquímicas e salinas formadas essencialmente por precipitação).

Estas ações frequentemente se combinam e muitas rochas sedimentares são de origem mista. Esses sedimentos se consolidam quando enterrados em profundidade, uma vez que o aumento da temperatura e da pressão favorecem as reações entre os minerais e os fluidos intersticiais.

Existem inúmeras classificações das rochas sedimentares, de acordo com a sua composição química, a granulometria dos constituintes ou a formação geológica em que se apresentam. Pelo motivo já exposto anteriormente, para este estudo é importante a caracterização do calcário, que é uma rocha sedimentar composta basicamente por carbonato de cálcio (calcita) e com uma concentração menor de carbonato de magnésio (dolomita), sílica, argila, óxido de ferro ou material carbonáceo [29].

## 2.4 Comportamento das rochas sob temperaturas elevadas

Assim como acontece com o concreto, sabe-se que a temperatura provoca fenômenos capazes de modificar a microestrutura rochosa, conseqüentemente afetando seu comportamento mecânico e suas propriedades térmicas e hídricas. A investigação das propriedades térmicas e de transporte das rochas é um ramo de pesquisa importante. Tais investigações têm relação direta com aplicações na área de pesquisas geológicas de grande profundidade com temperaturas elevadas e no estudo da viabilidade do uso de câmaras subterrâneas rochosas para o armazenamento de contêineres de rejeitos nucleares, que por sua vez podem ser confeccionados em concreto. Além disso a rocha é o substrato que originalmente se encontra após a camada de concreto em túneis que historicamente sofreram com incêndios acidentais.

A maioria das rochas possui baixa difusividade térmica, o que pode comprometer os corpos ao seu redor que sofrem com o superaquecimento, na medida em que as rochas dificultam a dissipação do calor [29].

As rochas também sofrem o fenômeno da dilatação diferencial, uma vez que são compostas por minerais com propriedades variadas os quais ainda podem apresentar anisotropia de dilatação térmica [28] [11] . Esse fenômeno provoca uma concentração de tensões no contato dos grãos, resultando na fissuração da rocha. Existem modelos desenvolvidos para a predição do comportamento termo-mecânico das rochas. Algumas referências so-

bre este tema são HETTEMA (1996, [30]), FREDRICH et al. (1986, [31] apud LION, 2004, [11]) e NGUYEN et al. (2011, [32]).

Estudos citados por YAVUZ et al. (2010, [10]), identificaram os seguintes processos microestruturais em um calcário devido à temperatura:

- o aquecimento à 100°C causa a dilatação da calcita e a compactação dos grãos. No entanto, o efeito de compactação não obstrui a migração de água nos poros devido ao teor de argila;
- à 200°C a retração da argila em oposição à dilatação da calcita é observada. Os poros deixam espaço livre para a expansão dos componentes e assim não é mensurado nenhum crescimento na porosidade.
- à 300°C a expansão da calcita é mais notável e efetiva do que a retração das argilas, mas nenhuma fissura através dos grãos é observada;
- a fissuração dentro dos grãos começa à 400°C e a separação ao longo das superfícies de contato dos grãos é observada. Assim, com a microfissuração, a porosidade efetiva se aproxima da porosidade total através da conexão dos poros fechados.
- a fissuração interna aos grãos e a quebra do contato entre eles continua à 500°C, e a porosidade efetiva cresce além da porosidade total inicial.

## 2.4.1 *Propriedades térmicas da rocha*

### 2.4.1.1 Condutividade térmica

As rochas naturais possuem uma distribuição aleatória de minerais e partículas cristalinas. Essa característica faz com que as rochas também sejam consideradas um material heterogêneo. A condutividade térmica das rochas é totalmente dependente da quantidade dos minerais presentes e da sua distribuição espacial na amostra. Sendo assim, na estimativa da condutividade térmica das rochas costuma-se lançar mão de diversas fórmula empíricas que relacionam a condutividade efetiva da rocha com a fração volumétrica dos componentes e com a sua disposição:

- Camadas de dois componentes em série e fluxo de calor normal à direção de distribuição das camadas

$$\lambda_r = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\nu_1 \lambda_1 + \nu_2 \lambda_2} \quad (2.15)$$

- Camadas paralelas e fluxo de calor na direção de distribuição das camadas

$$\lambda_r = \nu_1 \lambda_1 + \nu_2 \lambda_2 \quad (2.16)$$

- Distribuição aleatória dos componentes (mesma Equação 2.4 usada para o concreto)

$$\lambda_r = \lambda_1 \frac{\nu_1(\lambda_2 + 2\lambda_1) + 3\nu_2\lambda_2}{\nu_1(\lambda_2 + 2\lambda_1) + 3\nu_2\lambda_1} \quad (2.17)$$

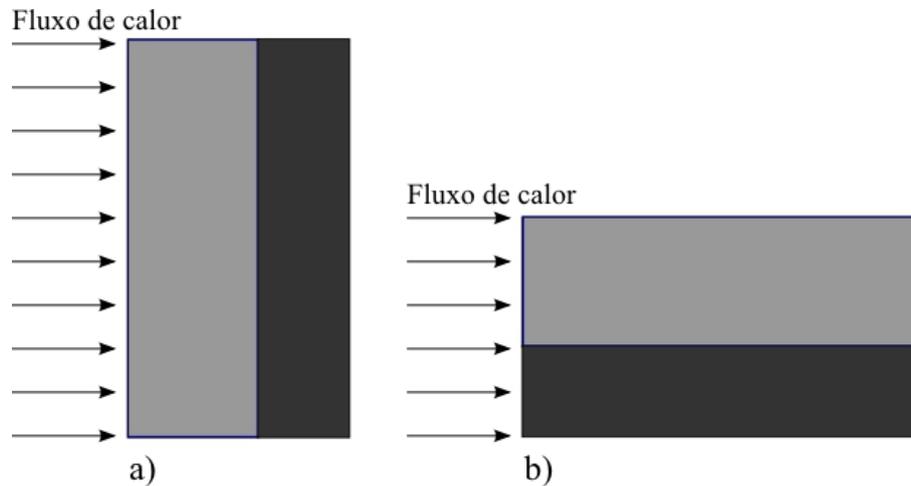


Figura 2.12: Esquemas para a determinação da condutividade de compósitos com componentes em série e em paralelo - regra das misturas

Para as rochas sedimentares os fatores que controlam a condutividade são a porosidade e a origem do sedimento [33]. Sedimentos químicos, formados principalmente por precipitação de minerais dissolvidos ou pela compactação de material orgânico, e sedimentos físicos formados pela compactação e cimentação de material clástico (grãos de mineral ou fragmentos formados a partir da fragmentação física ou mecânica da rocha original), apresentam baixa porosidade (< 30%) e têm uma condutividade térmica maior do que os sedimentos marinhos que apresentam elevada porosidade. O preenchimento dos espaços vazios por fluidos de baixa condutividade, como a água e o ar, é responsável por essa variação. Através da aplicação de regressão linear aos dados experimentais de condutividade térmica VOSTEEN et al. (2003, [9]) chegou a duas equações para a condutividade de rochas magmáticas e metamórficas (Equação 2.19) e sedimentares (Equação 2.21).

$$\lambda(0) = 0,53\lambda(25) + \frac{1}{2}\sqrt{1,3(\lambda(25))^2 - 0,42\lambda(25)} \quad (2.18)$$

$$\lambda(T) = \frac{\lambda(0)}{0,99 + T(a - b/\lambda(0))} \quad (2.19)$$

com  $a=0,0030 \pm 0,0015$  e  $b=0,0042 \pm 0,0006$ .

A Equação 2.21, segundo VOSTEEN et al. (2003, [9]), foi validada para temperaturas até 300°C, visto que as primeiras transformações devido à temperatura ocorrem entre 300°C e 350°C para as rochas sedimentares.

$$\lambda(0) = 0,54\lambda(25) + \frac{1}{2}\sqrt{1,16(\lambda(25))^2 - 0,39\lambda(25)} \quad (2.20)$$

$$\lambda(T) = \frac{\lambda(0)}{0,99 + T(a - b/\lambda(0))} \quad (2.21)$$

com  $a=0,0034 \pm 0,0006$  e  $b=0,0039 \pm 0,0014$ .

Uma equação empírica dada por ZOTH AND HÄNEL (1988)(apud VOSTEEN et al. [9]) é frequentemente usada para descrever a relação da condutividade térmica das rochas com a variação de temperatura. Ele tem seus coeficientes variáveis segundo o tipo de rocha. Para os calcários a dependência é dada pela Equação 2.22.

$$\lambda(T) = \frac{1073}{350 + T} + 0,13 \quad (2.22)$$

Na referência [29], AURANGZEB et al. (2007) discorre sobre alguns modelos que preveem a condutividade térmica de um grupo de sólidos com características parecidas, incluindo as rochas, e propõem o modelo representado pela Equação 2.23 que é testado e comparado a medidas experimentais realizadas com alguns tipos de rochas calcárias.

$$\frac{1}{\lambda_r} = \frac{1}{\lambda_s} + \frac{m\phi}{\lambda_f} \left( \frac{T}{T_0} \right). \quad (2.23)$$

Na Equação 2.23  $\lambda_r$  é a condutividade efetiva da rocha,  $\lambda_s$  é a condutividade da parte sólida e é tomada igual a  $3,6\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ , que é basicamente a condutividade da calcita, e  $\lambda_f$  é a condutividade do ar nos poros, tomada igual a  $0,026\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . O parâmetro  $m$  pode ser calculado através da condutividade medida experimentalmente para diversas

amostras de rocha como mostrado pela referência [29], que encontrou os valores de 0,08 para a temperatura ambiente e 0,11 para temperaturas até 443K ( $\approx 170^\circ\text{C}$ ). O parâmetro  $\phi$  é a porosidade da amostra e as temperaturas  $T$  e  $T_0$  são dadas em Kelvin.

#### 2.4.1.2 Calor específico

Estudos feitos por VOSTEEN et al. (2003, [9]) com rochas magmáticas, metamórficas e sedimentares mediram calores específicos compreendidos entre 740 J/kg.K e 850 J/kg.K, sendo os valores mais altos verificados para as rochas sedimentares. O calor específico cresce com a temperatura atingindo valor máximo de 1050 J/kg.K. Os ensaios deste estudo avaliaram cada rocha desde a temperatura ambiente até a temperatura de  $300^\circ\text{C}$ . A Figura 2.13 foi retirada da referência [9] e mostra a variação medida dessa tendência das rochas armazenarem calor.

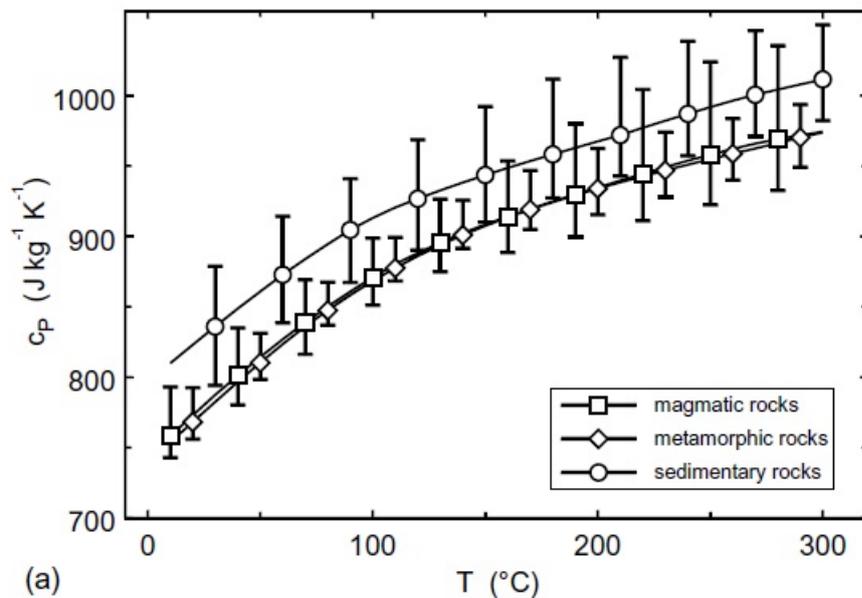


Figura 2.13: Variação do calor específico para três tipos diferentes de rochas [9]

#### 2.4.1.3 Dilatação térmica

Devido à composição multi mineral das rochas, o calor causa microfaturas devido à expansão térmica diferencial dos grãos minerais. Portanto, o aquecimento altera as propriedades da rocha. Enquanto a expansão térmica cresce com a temperatura (de forma diferente para cada mineral), a fissuração térmica por expansão diferencial pode criar resistências de contato entre os grãos dos minerais, contribuindo assim para o decresci-

mento da condutividade com a temperatura (como estimado pelas relações empíricas da condutividade).

A referência [30] destaca a importância da análise das expansões térmicas do sistema sob tensões confinantes, dizendo que este tipo de medida gera valores realísticos do coeficiente de expansão térmica para o cálculo da magnitude das tensões térmicas. Essa importância das tensões é explicada pelo fato de que a maioria das rochas não se comporta como um material termo-elástico linear, principalmente em temperaturas elevadas. Sem a aplicação de tensões, as deformações plásticas e a fluência podem causar um relaxamento das tensões térmicas, gerando conclusões equivocadas sobre o valor do coeficiente de dilatação térmica.

Segundo HOMAND e DUFFAUT (1999, [28]) o coeficiente de dilatação térmica para a maioria das rochas varia entre  $5 \times 10^{-6}$  e  $25 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ .

## ***2.4.2 Propriedades da rocha como meio poroso***

### 2.4.2.1 Porosidade

A microestrutura rochosa evolui em função da temperatura de acordo com os fenômenos de fissuração e os fenômenos de densificação. A fissuração acontece com a dilatação diferencial dos minerais. Já a densificação é a livre expansão dos grãos nos poros livres da rocha [11]. Os dois fenômenos são contrários: enquanto o primeiro tende a aumentar a porosidade da rocha, o segundo tende a diminuí-la.

A porosidade inicial da rocha também interfere nas demais propriedades, como por exemplo, na dilatação térmica. Segundo LION (2004, [11]), quanto menor a porosidade da rocha mais sensível ela é à temperatura. Quando a porosidade inicial pequena (granitos e mármore), as fissuras podem se formar cedo, em temperaturas próximas a  $100^\circ\text{C}$ . Ao contrário, as rochas porosas como o arenito, são pouco sensíveis a temperatura uma vez que a dilatação térmica dos constituintes pode ocorrer mais livremente. A porosidade inicial criada por fissuras pré-existentes também oferece espaço para a dilatação dos minerais.

YAVUZ et al. (2010, [10]) fornece a evolução experimental da porosidade de uma rocha calcária com características semelhantes as da rocha usada neste trabalho. A Figura 2.14 mostra essa variação, que não é muito significante até  $300^\circ\text{C}$ , mas cresce para temperaturas maiores.

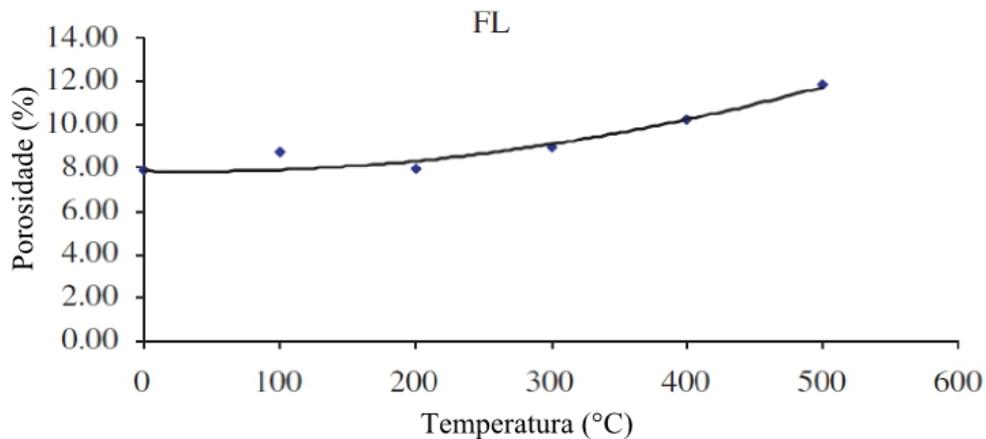


Figura 2.14: Evolução da porosidade para um calcário de densidade real  $2684 \text{ kg/m}^3$  e porosidades iniciais total e efetiva iguais a 11,5% e 7,8% [10]

#### 2.4.2.2 Permeabilidade

A permeabilidade das rochas é bastante variável. A Figura 2.15 ilustra a diversidade dos valores de permeabilidade para os diferentes tipos de rocha e em função da porosidade de cada uma. Contudo, a permeabilidade é também muito influenciada pela morfologia do espaço poroso (conectividade, tortuosidade, diâmetro dos poros) [11].

Dependendo da composição da rocha, a permeabilidade pode tanto aumentar como diminuir. O efeito da diminuição da permeabilidade com a temperatura acontece principalmente em rochas porosas ou que apresentam uma granularidade bem fina. Essas rochas favorecem os fenômenos de dilatação livre dos grãos nos vazios, não provocando, assim, fissuração térmica.

LION (2004, [11]) testou uma rocha calcária (calcaire d'Anstrude) e encontrou como permeabilidade intrínseca média o valor de  $4,45 \times 10^{-16}$ .

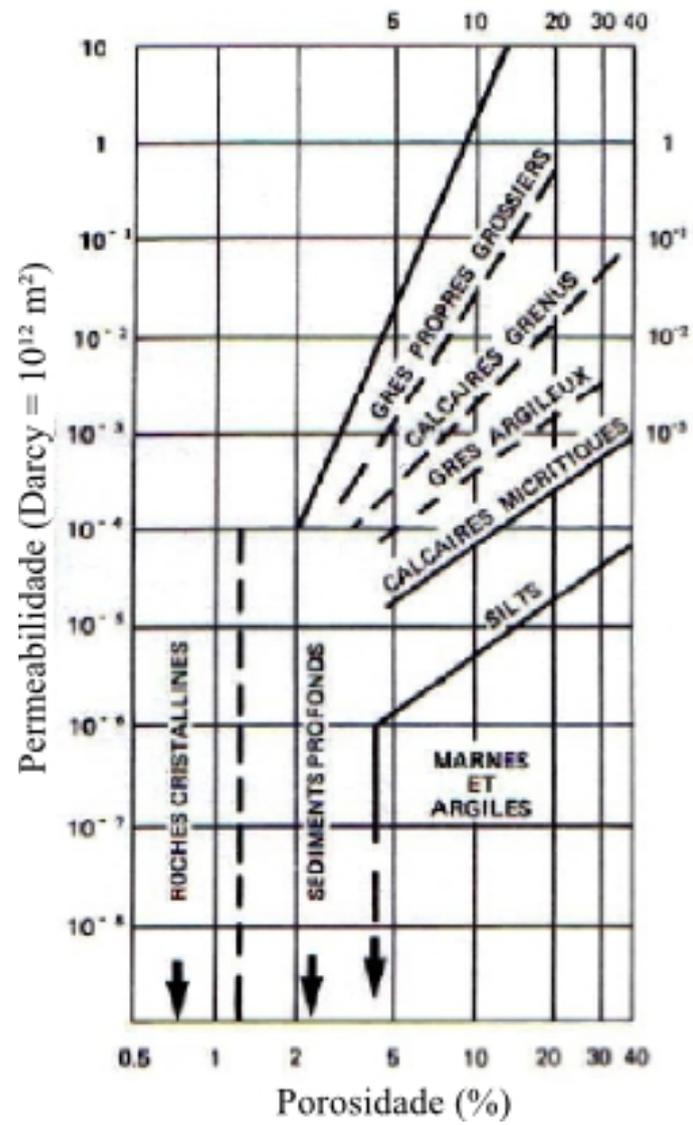


Figura 2.15: Permeabilidade de alguns tipos de rocha em função da porosidade. Adaptado de BOURBIÉ et al. (1986) apud LION (2004, [11])

## 3 Programa Experimental

A fim de obter dados experimentais acerca do comportamento de estruturas compostas por uma camada de concreto e uma camada de rocha sujeitas a temperaturas elevadas, foi desenvolvido o programa de ensaios que será objeto deste capítulo. Tais estruturas são similares às encontradas em túneis ou repositórios subterrâneos. O principal interesse desta etapa do trabalho é gerar dados para validação do modelo termo-hídrico descrito no capítulo 5.

O programa experimental que será apresentado foi desenvolvido no Laboratoire de Mécanique et Matériaux du Génie Civil (L2MGC), da Universidade de Cergy-Pontoise, na França, durante intercâmbio realizado pela autora desta dissertação.

O objetivo era submeter amostras de concreto comum e de alto desempenho a temperaturas de até 750°C para medir a evolução da temperatura em alguns pontos e visualizar os diferentes efeitos da temperatura nos dois tipos de concreto e como esses efeitos chegam até a interface com a rocha calcária sobre a qual foram moldadas as amostras de concreto.

### 3.1 Materiais e métodos

#### 3.1.1 *Formulação dos concretos*

Na confecção dos corpos-de-prova foram empregados um tipo de rocha e dois tipos de concreto, aqui denominados como concreto comum (CC) e concreto de alto desempenho (CAD) - cada um foi empregado na confecção de duas amostras prismáticas em bicamada, cuja geometria é mostrada na Figura 3.1. Os materiais utilizados foram os seguintes:

- Agregado miúdo de mineralogia silico-calcária, com granulometria correspondente a da areia média, e com densidade  $2460 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ;
- Agregado graúdo de mineralogia silico-calcária, com granulometria correspondente a da brita 2, e com densidade  $2480 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ;
- Cimento CEM I 52,5 N CE CP2 NF, de composição semelhante ao cimento CP I (no mínimo 95% de clínquer, no máximo 5% de componentes secundários e sulfato

de cálcio como regulador de pega). Se enquadra na classe de resistência aos 28 dias de 52,5 MPa. Sua densidade é de  $3110 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ .

- A água é potável, mas nenhuma análise aprofundada foi realizada.
- O superplastificante usado no concreto CAD é do grupo dos super redutores de água. Sua dosagem recomendada é de 0,2 a 2 kg por 100 kg de cimento.

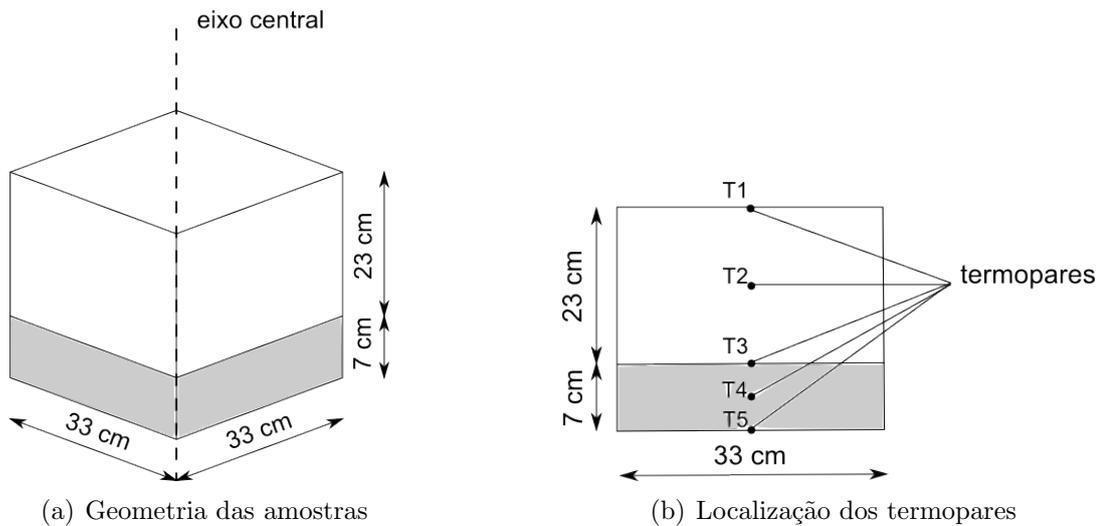


Figura 3.1: Geometria e instrumentação

As composições dos concretos analisados, em quantidade do componente por volume unitário de concreto produzido, são mostradas na Tabela 3.1:

Constituinte	Concreto Comum	Concreto CAD
Cimento CEM I 52,5	362	500
Brita 2 Silico-calcária	956	987
Areia média Silico-calcária	692	715
Água	217	150
Superplastificante	—	4,71

Tabela 3.1: Formulação dos concretos em  $\text{kg}/\text{m}^3$

### 3.1.2 Confeção das amostras

No total foram confeccionadas quatro amostras bicamada de concreto e rocha. Duas de concreto comum, para serem tratadas termicamente até  $600^\circ\text{C}$  e  $750^\circ\text{C}$ , respectivamente, e duas de concreto CAD, também para serem tratadas termicamente até  $600^\circ\text{C}$  e até  $750^\circ\text{C}$ , respectivamente.

A rocha calcária empregada, mostrada na Figura 3.2, apresenta coloração branca ou amarelada e porosidade igual a 14%.



Figura 3.2: Camada de rocha sobre a qual foi fabricada a amostra de concreto

A Figura 3.3 mostra as formas empregadas na confecção das amostras, com dimensões internas  $(33 \times 33 \times 30) \text{ cm}^3$ . A camada de rocha tem altura de 7 cm, sendo os 23 cm restantes da altura da forma preenchidos com concreto.



(a)



(b)

Figura 3.3: Formas e amostras prontas

### 3.1.3 Instrumentação para medição das temperaturas

A Figura 3.1 mostra o esquema da instrumentação adotada para permitir o acompanhamento da evolução de temperatura ao longo dos ensaios térmicos. Em cada amostra foram instalados cinco termopares ao longo do eixo central da amostra prismática, dispostos nas seguintes posições: superfície superior do concreto, metade da camada de concreto, interface rocha-concreto, metade da camada de rocha e na superfície inferior da rocha.

As amostras foram isoladas com lã de vidro, ficando exposta apenas a superfície superior, conforme se pode observar na Figura 3.4.



Figura 3.4: Posicionamento das amostras para aquecimento dentro do forno

## 3.2 Ensaio térmico

As amostras permaneceram um mês após a sua moldagem no laboratório, acondicionadas em cobertas plásticas, a uma temperatura ambiente de aproximadamente 20°C e, em seguida, foram submetidas a um carregamento térmico. A evolução da temperatura no forno foi programada segundo a curva padronizada de incêndio ISO 834, dada pela seguinte equação:

$$T = 345 \log(8t + 1) + 20, \quad (3.1)$$

onde  $T$  é a temperatura em graus Celsius e  $t$  é o tempo em minutos. Cada tipo de

concreto teve uma amostra aquecida até 600°C e outra até 750°C segundo a Equação 3.1. Adota-se, portanto, a seguinte nomenclatura para cada uma das amostras: CC-XXX e CAD-XXX, onde XXX refere-se à temperatura máxima em °C.

Para cada amostra, após atingida a temperatura máxima de 600°C ou 750°C, manteve-se a temperatura constante por um período de 20 horas e após esse período a temperatura do forno diminuía até a temperatura de 20°C a uma taxa de 1°C/min.

### 3.3 Caracterização dos materiais concreto e rocha

Em estudos laboratoriais posteriores aos ensaios térmicos, algumas propriedades dos concretos e da rocha foram aferidas. A Tabela 3.2 mostra um resumo dessas propriedades que são: resistência à compressão ( $f_c$ ), resistência à tração ( $f_t$ ), módulo de elasticidade ( $E$ ), coeficiente de Poisson ( $\nu$ ), porosidade ( $\phi$ ), densidade aparente ( $\rho_a$ ), densidade real ( $\rho_r$ ) e condutividade térmica ( $\lambda$ ).

Propriedade	Unidade	Concreto Comum	Concreto CAD	Rocha
$f_c$	MPa	35,9	81,2	39,8
$f_t$	MPa	3,7	5,2	4,2
$E$	GPa	35,6	45,2	17,7
$\nu$		—	—	0,3
$\rho_a$	kg/m <sup>3</sup>	2150	2330	2296
$\rho_r$	kg/m <sup>3</sup>	—	—	2671
$\lambda$	W/m·K	1,86	2,06	—

Tabela 3.2: Propriedades materiais medidas experimentalmente

### 3.4 Resultados experimentais

O processo experimental descrito neste capítulo monitorou as temperaturas em cinco pontos de cada corpo-de-prova ao longo da sua altura conforme o esquema mostrado na Figura 3.1. As Figuras 3.5 e 3.6 mostram a degradação sofrida pelos corpos-de-prova de concreto comum aquecidos a 600°C e a 750 °C. As evoluções das temperaturas medidas para o CC-600 são mostradas na Figura 3.7.



Figura 3.5: Superfície que ficou diretamente exposta ao aquecimento do CC-600



(a) Face 1



(b) Face 2



(c) Face 3



(d) Face 4

Figura 3.6: Faces do concreto CC-600 após aquecimento

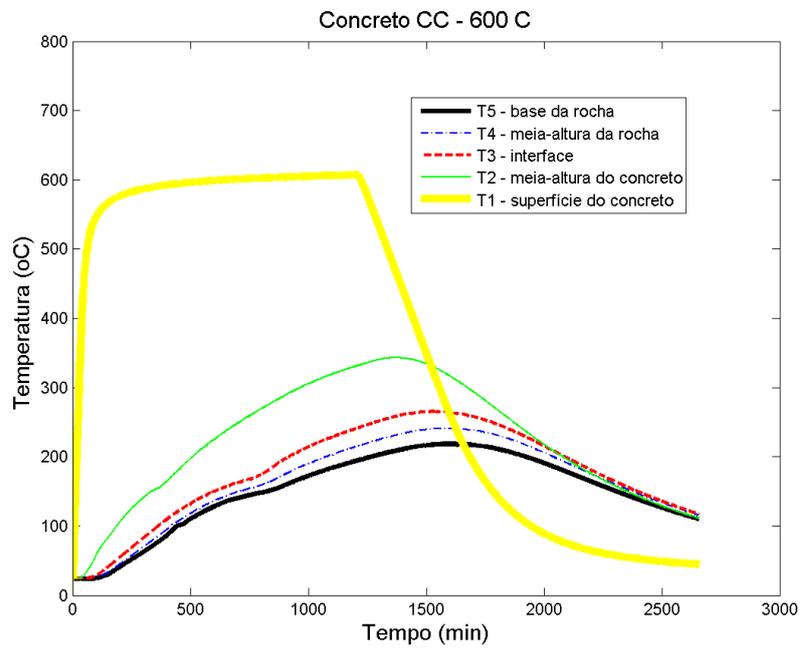


Figura 3.7: Evolução das temperaturas medidas no CC-600: sendo  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$ ,  $T_4$  e  $T_5$  as evoluções na superfície aquecida, na metade da camada de concreto, na interface, a metade da camada rochosa e na superfície da rocha, respectivamente



Figura 3.8: Superfície que ficou diretamente exposta ao aquecimento do CC-750

As Figuras 3.8 e 3.9 mostram a degradação sofrida pelo concreto comum que foi aquecido a 750°C. A fissuração lateral é bem mais acentuada, nota-se na superfície exposta ao aquecimento uma “fissuração mapeada” maior, e percebe-se o início da desintegração do agregado próximo da superfície. A Figura 3.10 mostra as evoluções de temperatura para o concreto CC-750. As curvas são interrompidas antes da fase de resfriamento porque alguns dos termopares se romperam durante o ensaio. Entretanto isso não prejudica a faixa de resultados que é importante para a validação final, uma vez que as análises numéricas se restringem à fase de aquecimento até a temperatura máxima na superfície.

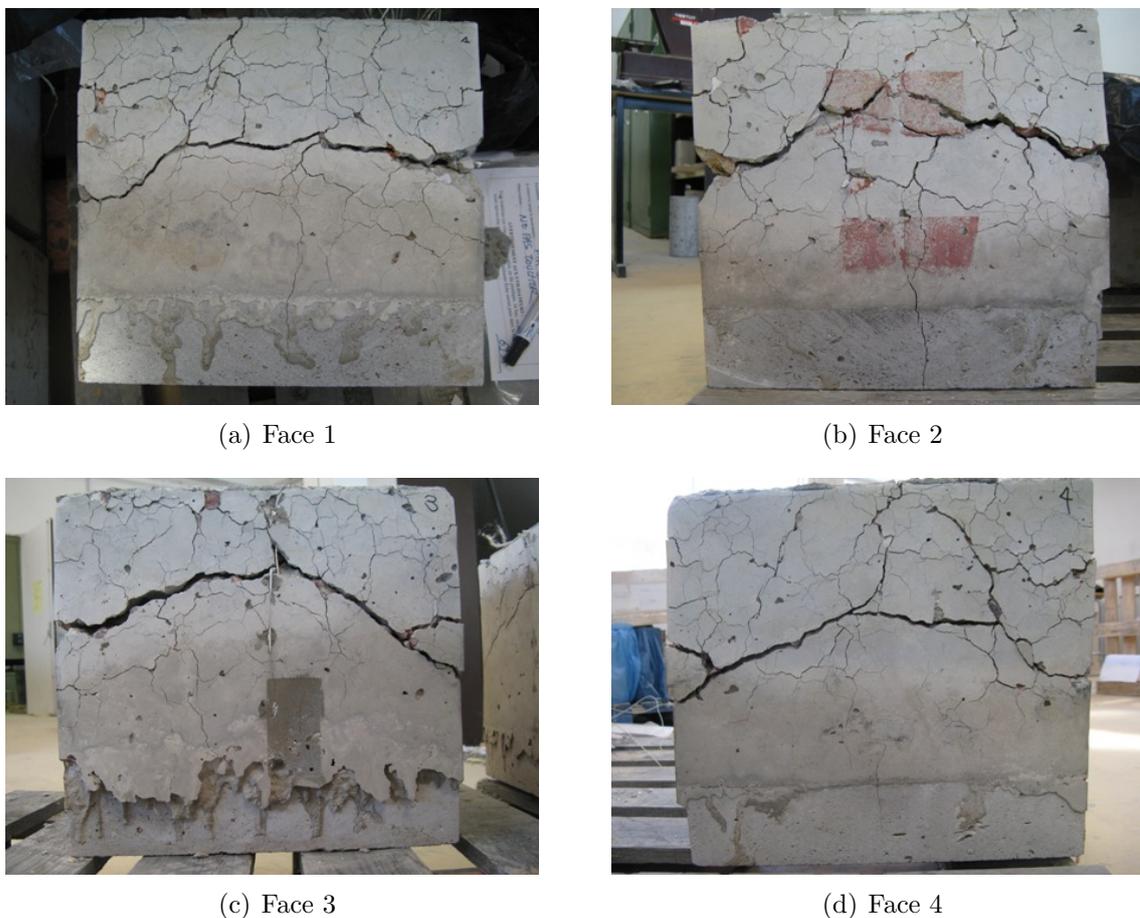


Figura 3.9: Faces do concreto CC-750 após aquecimento

O concreto de alto desempenho CAD-600 apresenta menor fissuração lateral, mas por outro lado sofreu deslocamento superficial intenso, como mostrado nas Figuras 3.11 e 3.12. As evoluções das temperaturas medidas são mostradas na Figura 3.13 para o CAD-600.

Já o concreto CAD-750 ficou completamente desintegrado após sucessivos “spallings”. As Figuras 3.14 e 3.15 mostram os resultados para o CAD-750.

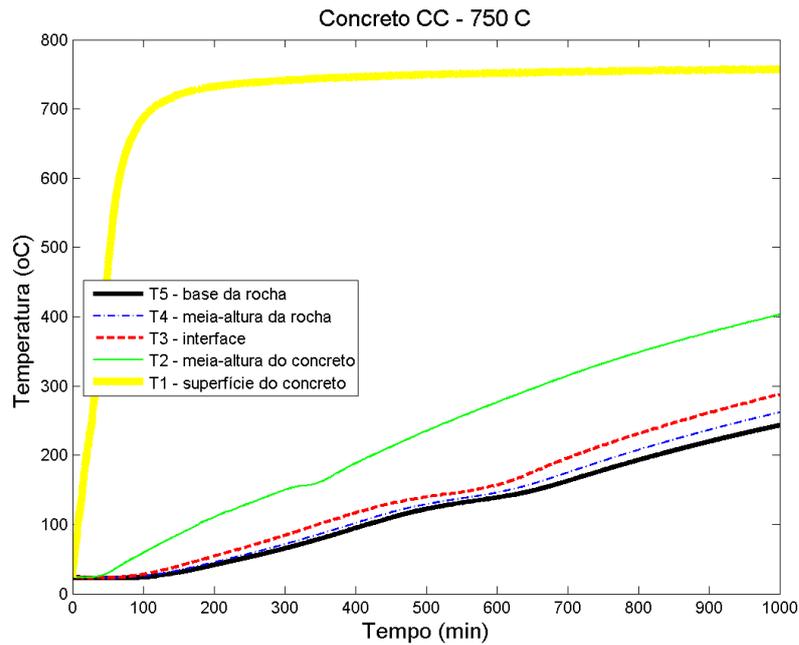


Figura 3.10: Evolução das temperaturas medidas no CC-750: sendo  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$ ,  $T_4$  e  $T_5$  as evoluções na superfície aquecida, na metade da camada de concreto, na interface, a metade da camada rochosa e na superfície da rocha, respectivamente

### 3.4.1 Conclusões experimentais

As imagens das amostras após os ensaios térmicos mostram os diferentes comportamentos do concreto comum e do concreto de alto desempenho. O concreto CAD comprovou sua maior tendência ao fenômeno do “spalling”. Enquanto o concreto comum apresentou fissuração em forma de mapa em ambas as temperaturas máximas, o concreto de alto desempenho perdeu fragmentos inteiros. É mais fácil visualizar esse efeito nas Figuras 3.11 e 3.12. Percebe-se que mesmo sofrendo pouca fissuração nas faces laterais, a superfície

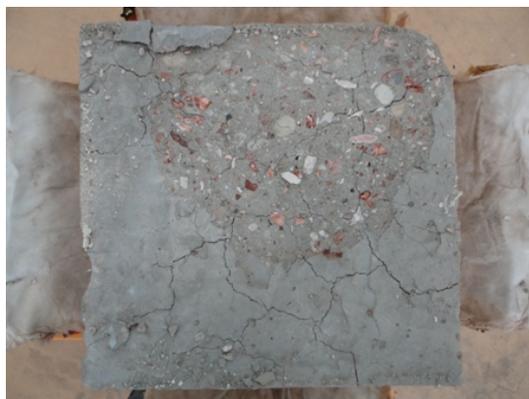


Figura 3.11: Superfície que ficou diretamente exposta ao aquecimento do CAD-600

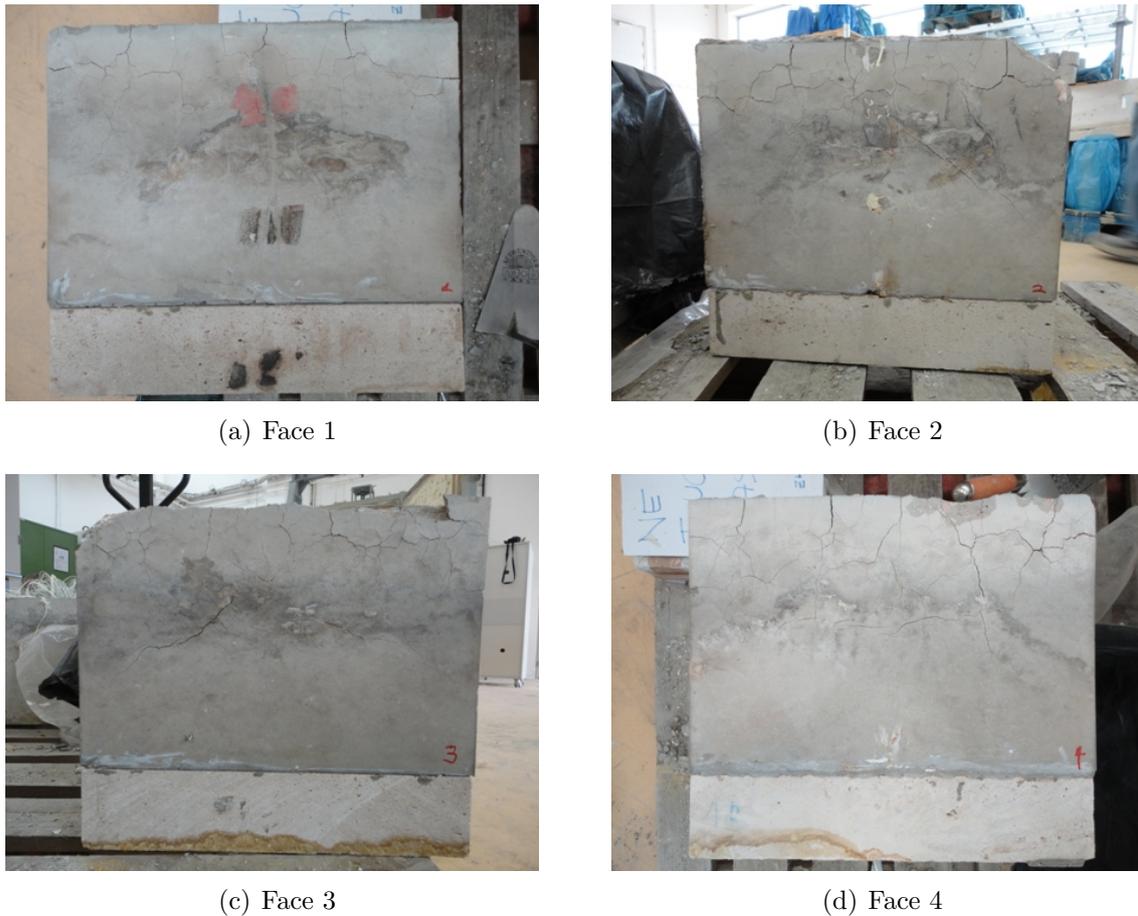


Figura 3.12: Faces do concreto CAD-600 após aquecimento

do CAD-600 foi bem mais desgastada do que a superfície do CC-600 (Figura 3.5). Por ser mais denso, menos permeável e poroso do que o concreto comum, os concretos de alto desempenho impõem obstáculos maiores ao fluxo das massas fluidas. Essa dificuldade de escoar para as regiões mais frias do concreto gera altas pressões logo na superfície, causando o deslocamento ou “spalling”.

Analisando-se as imagens nota-se que apenas no concreto comum CC-750 as fissuras se aproximaram, e até atravessaram, a interface com a rocha. Essas fissuras podem ser oriundas da dilatação térmica diferencial entre concreto e rocha e, principalmente, são decorrentes da falta do confinamento observado em estruturas reais devido à continuidade do maciço rochoso e da camada de concreto.

Os resultados de temperatura serão usados na verificação dos resultados do modelo numérico, que será discutido nos próximos capítulos.

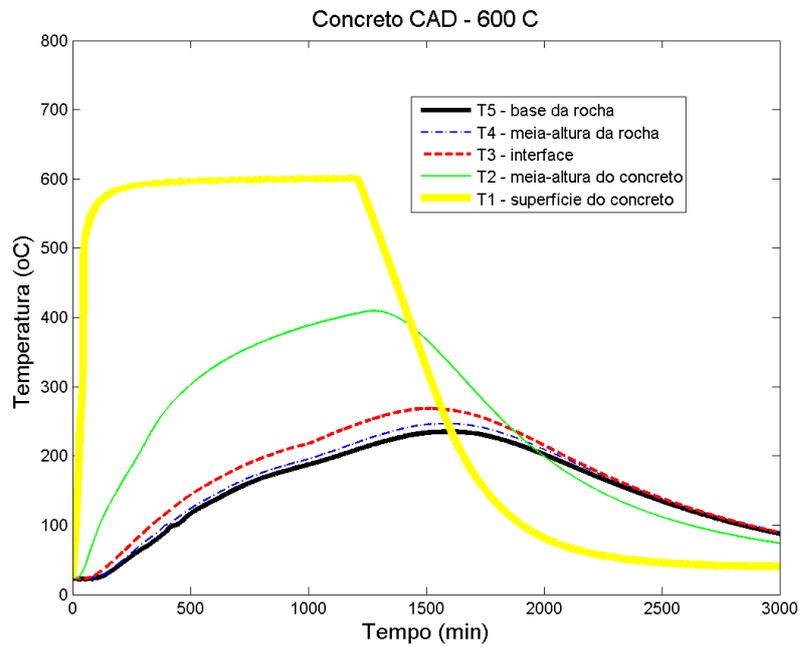


Figura 3.13: Evolução das temperaturas medidas no CAD-600: sendo  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$ ,  $T_4$  e  $T_5$  as evoluções na superfície aquecida, na metade da camada de concreto, na interface, na metade da camada rochosa e na superfície da rocha, respectivamente



(a) Superfície aquecida



(b) Face

Figura 3.14: Concreto CAD-750 após aquecimento

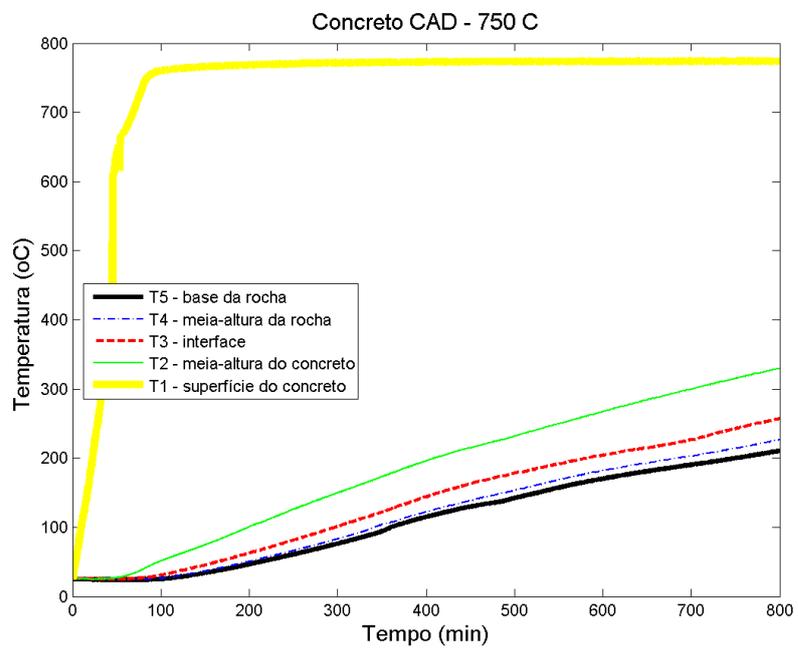


Figura 3.15: Evolução das temperaturas medidas no CAD-750: sendo  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$ ,  $T_4$  e  $T_5$  as evoluções na superfície aquecida, na metade da camada de concreto, na interface, a metade da camada rochosa e na superfície da rocha, respectivamente

# 4 Modelo físico e Formulação termo-hídrica

O concreto é um sistema multifásico no qual os vazios do esqueleto são preenchidos parte com água no estado líquido e parte com uma mistura composta por ar seco e vapor de água. Sob temperaturas maiores do que as normais, vários fenômenos ocorrem, tais como condução do calor, difusão do vapor e fluxo da água em estado líquido. O fluxo de água ocorre devido aos gradientes de pressão, ou efeitos capilares causados pela curvatura do menisco no interior dos poros. Esta curvatura é induzida por uma tensão de superfície que altera o equilíbrio entre a água no estado líquido e a pressão parcial do vapor de água.

Este trabalho apresenta um modelo que usa de algumas hipóteses simplificadoras e é baseado nos trabalhos de SERCOMBE et al. (2000, [34]). Ele descreve o transporte acoplado de umidade e calor no concreto submetido a elevações e, conseqüentemente, gradientes de temperatura.

## 4.1 Hipóteses gerais

Neste modelo o concreto é constituído de três fases: o esqueleto sólido, a água líquida e o vapor de água. Considera-se que o esqueleto sólido sofre deformações infinitesimais, o comportamento do vapor de água é considerado como o de um gás perfeito, a água líquida é considerada incompressível, não se considera a histerese da curva de sorção (dessorção), não se considera a difusão na fase gasosa e despreza-se a existência do ar seco nos poros. Sendo assim, serão necessárias as equações de balanço de massa para as fases fluidas (água líquida e vapor d'água), a equação de balanço de energia (através da Lei de Fourier e do princípio da conservação da energia), uma equação de balanço do momento linear das fases fluidas e uma equação de equilíbrio termodinâmico entre as fases líquida e vapor. Estas equações serão detalhadas a seguir.

Segundo KHOURY et al. (2002, [15]) o nível de investigação do meio poroso pode ser dividido em âmbitos macroscópico, mesoscópico e microscópico. No âmbito macroscópico o concreto pode ser idealizado dentro de um contínuo poroso onde todos os seus consti-

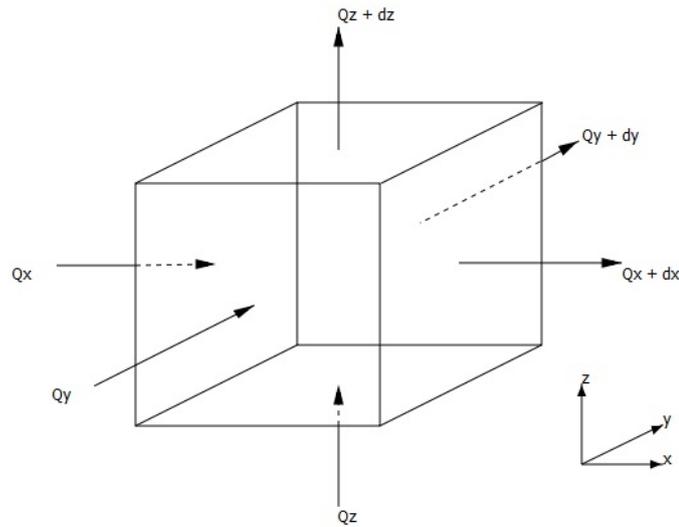


Figura 4.1: Balanço de energia no volume de controle.

tuintes (sólidos, vazios e fluidos) estão dispersos em um volume de controle ou volume elementar representativo (VER). No âmbito mesoscópico, o concreto é representado pelo agregado, região de interface e a matriz cimentícia (argamassa). A região mesoscópica apresenta então três VER's, todos podendo ser considerados como porosos dependendo de suas características. No âmbito microscópico, o concreto é representado por três tipos de sólido (agregados e esqueleto sólido dividido em região de interface e matriz) e poros pelos quais os fluidos escoam. O modelo utilizado se detém ao âmbito macroscópico de investigação.

O modelo hídrico é válido até que a temperatura crítica da água ( $374,15^{\circ}\text{C}$ ) seja atingida. Após essa temperatura a água capilar deixa de existir e têm-se apenas vapor.

## 4.2 Balanço de energia

Aplicando-se a lei da conservação de energia ao volume de controle da Figura 4.1, sendo  $Q$  o fluxo de calor, tem-se por expansão de Taylor com termos de ordem superior desprezados:

$$\begin{aligned}
 Q_{x+dx} &= Q_x + \frac{\partial Q_x}{\partial x} dx \\
 Q_{y+dy} &= Q_y + \frac{\partial Q_y}{\partial y} dy \\
 Q_{z+dz} &= Q_z + \frac{\partial Q_z}{\partial z} dz.
 \end{aligned}
 \tag{4.1}$$

Se o calor gerado dentro do volume de controle é dado por  $Gdxdydz$ , a taxa de mudança na energia estocada é  $\rho dxdydzc_p \frac{\partial T}{\partial t}$  e o balanço de energia se escreve como ENERGIA QUE ENTRA + ENERGIA GERADA = VARIAÇÃO DA ENERGIA ESTOCADA + ENERGIA QUE SAI, tem-se a seguinte equação:

$$Q_x + Q_y + Q_z + Gdxdydz = \rho dxdydzc_p \frac{\partial T}{\partial t} + Q_{x+dx} + Q_{y+dy} + Q_{z+dz}. \quad (4.2)$$

Substituindo-se as Equações 4.1 na Equação 4.2 tem-se:

$$-\frac{\partial Q_x}{\partial x} dx - \frac{\partial Q_y}{\partial y} dy - \frac{\partial Q_z}{\partial z} dz + Gdxdydz = \rho c_p dxdydz \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (4.3)$$

Sendo  $q_x = -\lambda_x \frac{dT}{dx}$  o fluxo de calor em uma dimensão na direção  $x$ , e similarmente para as demais direções, podemos escrever o fluxo total de calor  $Q$  em cada direção como:

$$\begin{aligned} Q_x &= dydzq_x = -\lambda_x dydz \frac{\partial T}{\partial x} \\ Q_y &= dzdxq_y = -\lambda_y dzdx \frac{\partial T}{\partial y} \\ Q_z &= dxdyq_z = -\lambda_z dxdy \frac{\partial T}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Substituindo-se as Equações 4.4 na Equação 4.3 e dividindo-se pelo volume  $dxdydz$ , chega-se à Equação de Balanço de Energia 4.5.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_x \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \lambda_y \frac{\partial T}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \lambda_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] + G = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (4.5)$$

A Equação 4.5 é a equação de condução de calor transiente para um sistema estacionário expresso em coordenadas cartesianas [35]. A condutividade térmica  $\lambda$  pode ser expressa como um tensor. Neste trabalho as fases são consideradas isotrópicas e, portanto, o tensor de condutividade térmica é isotrópico para cada fase.

As mudanças de estado endotérmicas da água em estado líquido para vapor de água e de água quimicamente ligada para água em estado líquido são as fontes geradoras de calor consideradas neste modelo. Portanto escreve-se  $G$  como:

$$G = -(L_{l \rightarrow v}(T)\dot{\mu}_{l \rightarrow v} + L_{s \rightarrow l}\dot{d}),$$

sendo  $L_{l \rightarrow v}(T)$  e  $L_{s \rightarrow l}$  os calores latentes de vaporização e desidratação ( $J/kg$ ),  $\dot{\mu}_{l \rightarrow v}$  a quantidade de água vaporizada por unidade de tempo ( $kg/m^3/s$ ) e  $\dot{d}$  a cinética de

desidratação ( $kg/m^3/s$ ).

Fica convencionada para fins deste trabalho a notação  $\dot{x}$  para as variações temporais relacionadas às mudanças de estado da água e do vapor. Sendo assim  $\frac{\partial \mu_{l \rightarrow v}}{\partial t} = \dot{\mu}_{l \rightarrow v}$  e  $\frac{\partial d}{\partial t} = \dot{d}$ .

Por fim, denominando-se o termo  $\rho c_p$  de calor específico volumétrico e fazendo  $c = \rho c_p$ , que será função da saturação e da desidratação, temos a equação do balanço de energia do modelo dada pela Equação 4.6.

$$c(S_l, d) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda(T) \nabla T) - L_{l \rightarrow v}(T) \dot{\mu}_{l \rightarrow v} - L_{s \rightarrow l} \dot{d}. \quad (4.6)$$

Esta formulação despreza o calor transportado por convecção pelos fluidos, o que acontece normalmente para materiais pouco permeáveis como o concreto, e a dissipação de calor associada à compressibilidade do vapor de água, que é considerado como um gás perfeito.

O calor específico volumétrico  $c(S_l, d)$  é dado por:

$$c(S_l, d) = \rho_s C_s + \phi \rho_l(T) S_l C_l + (d_0 - d) C_u \quad (4.7)$$

sendo  $C_s$ ,  $C_l$  e  $C_u$  os calores específicos da fase sólida, da fase líquida e da água ligada, respectivamente, em J/kg°C.

### 4.3 Descrição das fases: bases para o balanço de massa

No âmbito macroscópico considerado, o meio poroso é constituído por uma matriz sólida e pelos fluidos intersticiais ocupando todo o volume poroso. Daqui em diante as fases líquida, gasosa e sólida serão referenciadas pelos índices  $l$ ,  $v$  e  $s$  e a fase fluida total (líquido + vapor), pelo índice  $f$ .

#### 4.3.1 Massas específicas volumétricas aparentes

A porosidade ( $\phi$ ), definida pela Equação 4.8 como a relação entre o volume de vazios ( $V_{vazios}$ ) e o volume total ( $V_t$ ), permite uma descrição global do meio poroso, livre de

detalhes sobre distribuição e conectividade dos poros.

$$\phi = \frac{V_{vazios}}{V_t}. \quad (4.8)$$

A saturação ( $S_l$ ) é a relação entre o volume ocupado pela fase líquida ( $V_l$ ) e o volume de vazios e é dada pela Equação 4.9:

$$S_l = \frac{V_l}{V_{vazios}}, \quad (4.9)$$

sendo  $V_{vazios} = V_v + V_l$  tem-se:

$$S_l = \frac{V_l}{V_v + V_l}. \quad (4.10)$$

Relacionando-se as Equações 4.8 e 4.10 obtém-se as frações do volume poroso ocupadas pela fase líquida ( $\phi_l$ ) e pela fase vapor ( $\phi_v$ ), respectivamente:

$$\phi_l = \phi S_l \quad \text{e} \quad (4.11)$$

$$\phi_v = \phi(1 - S_l). \quad (4.12)$$

A partir dessas equações pode-se deduzir as massas de cada fase fluida por unidade de volume do meio poroso (massa volumétrica aparente):

$$\text{Massa de água líquida:} \quad m_l = \rho_l \phi(d) S_l \quad (4.13)$$

$$\text{Massa de vapor de água:} \quad m_v = \rho_v \phi(d)(1 - S_l) \quad (4.14)$$

$$\text{Massa de água total:} \quad m_f = m_l + m_v \quad (4.15)$$

O parâmetro  $d$  se refere a desidratação da matriz sólida. A perda da água ligada para a fase fluida é considerada o principal parâmetro da evolução da porosidade. Dessa forma, a porosidade está diretamente ligada à desidratação, que por sua vez depende diretamente da evolução da temperatura.

### 4.3.2 Pressão parcial e leis dos gases perfeitos

Como simplificação, o modelo considera o vapor de água como um gás perfeito. A fórmula que relaciona a pressão de vapor ( $p_v$ ) e a sua massa ( $\rho_v$ ) é a equação de Clapeyron para gases ideais:

$$p_v = \rho_v \frac{RT}{M_v}, \quad (4.16)$$

onde  $R = 8,314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$  é a constante universal dos gases perfeitos,  $M_v = 0,018 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$  é a massa molar do vapor de água e  $T$  é a temperatura em Kelvin.

### 4.3.3 Leis de conservação da massa

A conservação da massa trata das trocas de matéria entre o volume poroso analisado e o meio no qual se encontra. Essas trocas são descritas como fluxo de massa. Sendo a velocidade de um fluido denota por  $v_i$ , podendo  $i$  se referir à fase líquida ou vapor, e dada a massa volumétrica das Equações 4.13 e 4.14, o fluxo de fluido é dado por:

$$F_i = m_i v_i, \quad (4.17)$$

na qual o fluxo de massa  $F_i$  é dado por  $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$ .

A conservação da massa também envolve fenômenos de mudança de fase, sendo necessário introduzir os termos que contabilizem as quantidades de fluido que passam por transformação de fase. Essas quantidades são introduzidas pela taxa  $\dot{\mu}_{l \rightarrow v}$  para os fenômenos de evaporação e condensação e pela taxa  $\dot{d}$  para o fenômeno da desidratação, na qual a água ligada é liberada para a fase líquida.

#### 4.3.3.1 Conservação da massa de água líquida

A variação da massa de água líquida no volume é dada pela derivada temporal da integral da massa de água líquida no volume  $\Omega$ . Essa derivada não é nula: deve-se considerar os fenômenos de evaporação, condensação e desidratação da matriz. A conservação da massa do sistema requer que a variação da massa de água líquida no volume seja igual aos fluxos de entrada e saída através da superfície mais as variações de massa geradas internamente

ao volume pelas mudanças de fase. Assim tem-se:

$$\frac{D}{Dt} \int_{\Omega} m_l d\Omega = \int_{\Omega} \frac{\partial m_l}{\partial t} d\Omega + \int_{\partial\Omega} m_l \vec{v}_l \cdot \vec{n} ds = \int_{\Omega} (\dot{d} + \dot{\mu}_{l \rightarrow v}) d\Omega. \quad (4.18)$$

Sabendo-se que o fluxo de massa é dado pela Equação 4.17 e aplicando-se o teorema da divergência chega-se à formulação da conservação da massa local:

$$\frac{\partial m_l}{\partial t} + \nabla \cdot (F_l) = \dot{d} + \dot{\mu}_{l \rightarrow v}, \quad (4.19)$$

sendo que o sinal de  $\dot{\mu}_{l \rightarrow v}$  é dado de acordo com a mudança de fase observada: se evaporação  $\dot{\mu}_{l \rightarrow v} < 0$ , se condensação  $\dot{\mu}_{l \rightarrow v} > 0$ .

#### 4.3.3.2 Conservação da massa de vapor de água

Utilizando-se dos mesmos recursos usados para a conservação da água líquida tem-se a conservação da massa de vapor de água. Neste caso deve-se considerar a taxa de evaporação ou condensação  $\dot{\mu}_{v \rightarrow l} = -\dot{\mu}_{l \rightarrow v}$ .

$$\frac{\partial m_v}{\partial t} + \nabla \cdot (F_v) = \dot{\mu}_{v \rightarrow l} \quad (4.20)$$

### 4.3.4 Conservação da massa total de água

Somando-se as Equações 4.19 e 4.20 e, admitindo-se que a quantidade de água evaporada é equivalente à quantidade condensada, tem-se a equação local de conservação da água total do sistema:

$$\frac{\partial m_f}{\partial t} + \nabla \cdot (F_f) = \dot{d} \quad (4.21)$$

#### 4.3.4.1 Equação dos fluxos hídricos

A Lei de Darcy descreve o movimento do gás e do líquido no meio poroso. Desprezando-se os efeitos gravitacionais e uma eventual anisotropia do material, a Lei de Darcy é a seguinte:

$$v_i = -\rho_i \frac{K_i k_{ri}(S_i)}{\mu_i} \nabla(P_i), \quad (4.22)$$

onde  $i = l, v$  para fluxo de líquido ou vapor,  $K_i$  é a permeabilidade intrínseca,  $k_{r_i}$  é a permeabilidade relativa à fase considerada,  $\mu_i$  é a viscosidade dinâmica e  $P_i$  é a pressão. Tendo em conta apenas a presença de vapor de água na fase gasosa, os fenômenos de difusão regidos pela Lei de Fick serão desprezados. Segundo KANEMA (2007, [16]), esta consideração supõe implicitamente que os fenômenos de transporte no meio poroso são governados pela Lei de Darcy durante a fase transitória de aquecimento. Esta consideração é aceitável em vista dos fortes gradientes térmicos e perda de massa constatados ao longo da fase transitória de aquecimento. Ele é menos pertinente, entretanto, para o fluxo em temperaturas inferiores a 80°C, onde governa a Lei de Fick.

#### 4.3.4.2 Lei de Clapeyron

O fenômeno de mudança de fase é um dos fenômenos importantes que regem o equilíbrio entre os líquidos e o vapor. A entalpia é a grandeza que originalmente relaciona as variáveis temperatura e pressão necessárias para a descrição das fases fluidas do sistema.

Para a determinação da equação de estado para as fases fluidas considera-se que as mudanças de fase, vaporização e condensação, se processam sem dissipação (perda) de energia. Sendo assim pode-se igualar as entalpias livres ( $g$ ) da água líquida e do vapor de água. Desta forma, obtém-se a equação de Clapeyron generalizada, Equação 4.23. O desenvolvimento completo para obtê-la pode ser visto no Apêndice B. A Equação 4.23 é válida para fenômenos capilares desde que se considere o vapor como um gás perfeito.

$$p_l = p_{vs}(T) + \frac{\rho_l RT}{M_l} \ln \frac{p_v}{p_{vs}(T)}. \quad (4.23)$$

A pressão de vapor saturante é a pressão máxima a que uma substância é submetida enquanto vapor na temperatura em que se encontra e é dada pela Equação 4.24 que é a equação de Clausius-Clapeyron em função da temperatura.

$$\ln \frac{p_{vs}}{p_{atm}} = \frac{M_l \cdot L_{l \rightarrow v}}{R} \left( \frac{1}{T_{atm}} - \frac{1}{T} \right). \quad (4.24)$$

Nos poros capilares o equilíbrio termodinâmico entre a água líquida e o vapor de água se encontra modificado pela presença de forças de superfície na interface entre as fases fluidas e a superfície dos poros. Esta diferença de pressão entre as duas fases é chamada

de pressão capilar  $p_c$ :

$$p_c = p_v - p_l. \quad (4.25)$$

Como a fase gasosa é constituída apenas pelo vapor de água, pode-se inserir a Equação 4.25 na Equação 4.23 e, considerando-se a massa de vapor de água desprezível diante da massa de água líquida, obtém-se a Lei de Kelvin para uma mudança de fase não dissipativa:

$$p_c = -\rho_l(T) \frac{RT}{M} \ln \left( \frac{p_v}{p_{vs}(T)} \right). \quad (4.26)$$

#### 4.3.4.3 Isotermas de sorção e desorção

A sorção é o efeito de gases e líquidos ao serem incorporados num material sólido através de aderência à superfície desse material ou através de absorção (penetração) do fluido no material. A desorção é o efeito contrário, ou seja, é o desligamento das moléculas de gases ou fluidos do sólido. As isotermas de sorção e desorção são curvas que relacionam a pressão de vapor nos poros ao conteúdo de água presente nos poros a temperatura constante. Sendo a umidade relativa expressa pela Equação 4.27, as isotermas de sorção fazem uma relação entre a saturação do meio e a umidade, ou seja,  $h = h(S_l)$ .

$$h = \frac{p_v}{p_{vs}(T)}. \quad (4.27)$$

Essas curvas apresentam fenômenos de histerese: sorção e desorção não seguem o mesmo caminho. Neste modelo será empregada a seguinte relação entre umidade e saturação:

$$S_l = h = \frac{p_v}{p_{vs}(T)}. \quad (4.28)$$

#### 4.3.4.4 Modelo hídrico final

Somando-se as equações de conservação da massa dos fluidos (Equações 4.19 e 4.20) e combinado-as com a Lei de Darcy para fluxo hídrico no material (Equação 4.22), e associando as expressões de massa volumétrica (Equações 4.14, 4.13 e 4.15), obtém-se a equação que descreve os movimentos da água líquida ou em vapor no material poroso:

$$\nabla \cdot \left[ \left( \frac{\rho_l(T)}{\mu_l(T)} k_{rl}(S_l) K_l(d) \frac{\rho_l}{\rho_v} \frac{1}{S_l} + \frac{\rho_v(T)}{\mu_v(T)} k_{rv}(S_l) K_v(d) \right) \frac{\partial p_v}{\partial S_l} \nabla(S_l) \right] + \dot{d} = \frac{\partial [\rho_l(T) - \rho_v(T)] \phi(d) S_l}{\partial t} \quad (4.29)$$

Fazendo-se:

$$D(S_l, d, T) = \left[ \frac{\rho_l(T)}{\mu_l(T)} k_{rl}(S_l) K_l(d) \frac{\rho_l}{\rho_v} \frac{1}{S_l} + \frac{\rho_v(T)}{\mu_v(T)} k_{rv}(S_l) K_v(d) \right] \frac{\partial p_v}{\partial S_l}, \quad (4.30)$$

com  $D(S_l, d, T)$  sendo denominada condutividade hídrica do meio, tem-se de forma mais compacta:

$$\frac{\partial [\rho_l(T) - \rho_v(T)] \phi(d) S_l}{\partial t} = \nabla \cdot [D(S_l, d, T) \nabla(S_l)] + \dot{d}. \quad (4.31)$$

Assim, através da resolução do sistema de equações formado pelas Equações 4.6 e 4.29, temos o resultado do problema baseado nas duas incógnitas principais: temperatura ( $T$ ) e saturação em água líquida ( $S_l$ ).

## 4.4 Evolução das propriedades

### 4.4.1 Evolução da condutividade térmica

Entre os modelos para evolução da condutividade térmica descritos, foi adotada para o concreto comum a seguinte relação:

$$\lambda_{cc} = 2 - 0,2451 \left( \frac{T}{100} \right) + 0,0107 \left( \frac{T}{100} \right)^2, \quad (4.32)$$

A Equação 4.32 é a mesma Equação 2.6 e corresponde ao limite superior dado pela norma Europeia para o cálculo da evolução da condutividade térmica com a temperatura. A Figura 4.2, mostrada no Capítulo 2, é aqui repetida para justificar a escolha desta equação para a evolução da condutividade térmica dos concretos comuns CC.

Os valores experimentais das condutividades térmicas do concreto de alto desempenho podem ser aproximados por um deslocamento positivo das condutividades do concreto comum. Sendo assim, para efeito de cálculo, foi adotada a Equação 4.33 para a evolução

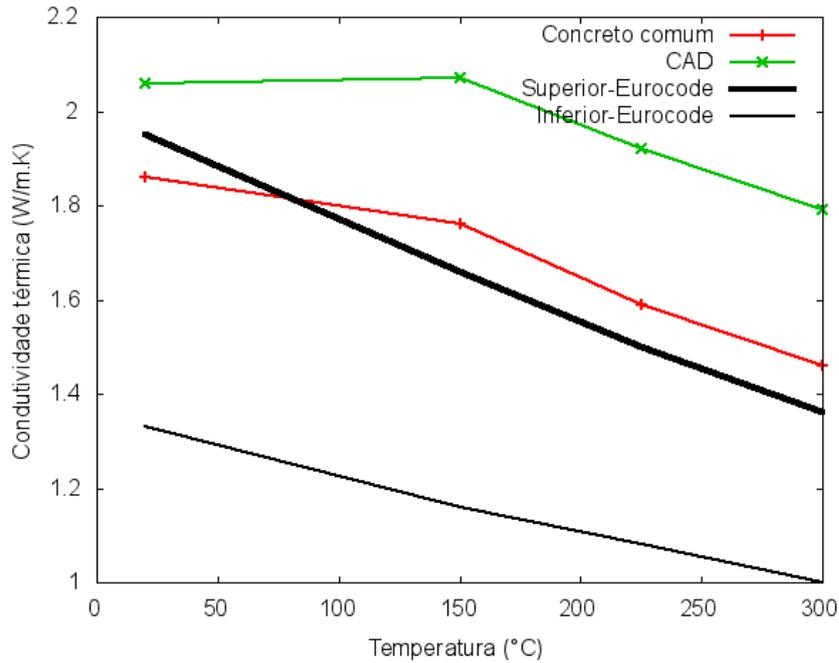


Figura 4.2: Valores experimentais para a condutividade térmica do concreto comum e do concreto CAD. Comparação com a evolução sugerida pela norma Europeia.

das condutividades térmicas do concreto de alto desempenho com a temperatura.

$$\lambda_{cad} = 2,3 - 0,2451 \left( \frac{T}{100} \right) + 0,0107 \left( \frac{T}{100} \right)^2, \quad (4.33)$$

sendo  $T$  dada em °C em ambas as equações.

As Equações 4.32 e 4.33 são válidas para temperaturas entre 20°C e 1200°C.

Para a rocha, foi adotada a evolução dada pela Equação 2.23, proposta por AURANG-ZEB et al. (2007, [29]), e repetida abaixo:

$$\frac{1}{\lambda_r} = \frac{1}{\lambda_s} + \frac{m\phi}{\lambda_f} \left( \frac{T}{T_0} \right). \quad (4.34)$$

Na Equação 4.34  $\lambda_r$  é a condutividade efetiva da rocha,  $\lambda_s$  é a condutividade da parte sólida e é tomada igual a  $3,6 \text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ , que é basicamente a condutividade da calcita, e  $\lambda_f$  é a condutividade do ar nos poros, tomada igual a  $0,026 \text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . O parâmetro  $m$  pode ser calculado através da condutividade medida experimentalmente para diversas amostras de rocha como mostrado pela referência [29], que encontrou os valores de 0,08 para a temperatura ambiente e 0,11 para temperaturas até 443K ( $\approx 170^\circ\text{C}$ ). O parâmetro  $\phi$  é a porosidade da amostra e as temperaturas  $T$  e  $T_0$  são dadas em Kelvin.

#### 4.4.2 *Evolução da permeabilidade*

É possível distinguir a permeabilidade intrínseca da permeabilidade aparente de um mesmo material. A expressão que faz essa relação entre as permeabilidades intrínseca e aparente pode ser dada pela expressão usada por DALPONT(2004, [20]):

$$k_a = \frac{Kk_{ri}}{\mu_l}, \quad (4.35)$$

onde  $k_a$  é a permeabilidade aparente do meio,  $K$  é a permeabilidade intrínseca e  $k_{ri}$  é a permeabilidade relativa da fase considerada.

##### *Permeabilidade intrínseca*

Faz-se a seguinte distinção entre permeabilidade intrínseca ao gás e permeabilidade intrínseca à água, segundo SERCOMBE et al. (2001, [34]):

$$K_v(d) = K_{v0}e^{\alpha d}, \quad (4.36)$$

$$K_l(d) = K_{l0}e^{\alpha d}, \quad (4.37)$$

sendo  $\alpha = 0,126$ ,  $d$  a massa de água desidratada e  $K_{v0}$  a permeabilidade intrínseca ao gás de referência. A permeabilidade intrínseca ao líquido de referência é  $K_{l0} = 10^{-4} \times K_{v0}$ . Para o concreto comum adota-se a permeabilidade intrínseca de referência  $K_{v0} = 1.0 \times 10^{-17}$  e para o concreto CAD  $K_{v0} = 1.0 \times 10^{-19}$ .

##### *Permeabilidade relativa*

As permeabilidades relativas permitem a consideração do fato de que os poros estão parcialmente preenchidos por outra fase nos meios insaturados. As expressões propostas por VANGENUCHTEN (1989, apud COUSSY, 2004 [36]) para as permeabilidades relativas ao gás e à água, em função da saturação, são empregadas no modelo.

$$k_{rv}(S_l) = \sqrt{1 - S_l}(1 - S_l^{1/m})^{2m}, \quad (4.38)$$

$$k_{rl}(S_l) = \sqrt{S_l}(1 - (1 - S_l^{1/m})^m)^2, \quad (4.39)$$

para  $m = 0,5$ .

#### 4.4.3 Pressão de vapor saturante

A pressão saturante é a pressão máxima, ou limite, a que uma substância é submetida antes de se condensar e é dada para uma temperatura constante. Ela é dada pela equação de Clausius-Clapeyron em função da temperatura:

$$p_{vs} = p_{atm} \exp\left(\frac{M\Delta H_v}{R} \left(\frac{T - 373,15}{373,15T}\right)\right), \quad (4.40)$$

onde  $p_{atm} = 101325$  Pa,  $R = 8,314$  J · mol<sup>-1</sup> · K<sup>-1</sup> é a constante universal dos gases perfeitos,  $M_v = 0,018$  kg · mol<sup>-1</sup> é a massa molar do vapor de água,  $\Delta H_v = 2,26 \times 10^6$  J · kg<sup>-1</sup> é a entalpia de vaporização da água e  $T$  é a temperatura em Kelvin.

#### 4.4.4 Cinética de desidratação

Adota-se um modelo referenciado em inúmeros trabalhos relacionados ([16], [34], [37]). Geralmente se considera que a desidratação ocorre quando a temperatura atinge 105°C. Entretanto medidas efetuadas por GALLE (2001, [37]) sobre concretos comuns e de alto desempenho, mostram uma modificação notável da porosidade já a partir de 60°C. Considera-se que essa evolução indica que existe extração da água ligada à matriz já nesta temperatura. Sendo assim a evolução da quantidade de água ligada desidratada é dada por:

$$d = \frac{d_0}{540}(T - 60), \quad (4.41)$$

para  $T > 60^\circ\text{C}$ .

A desidratação é considerada um fenômeno irreversível.

#### 4.4.5 Porosidade total

A evolução da porosidade total é uma função da desidratação dada por [34]:

$$\phi = \phi(60) + \frac{d(T)}{\rho_{hyd}}. \quad (4.42)$$

A obtenção da porosidade parte do princípio de que os elementos desidratados possuem um densidade próxima a dos elementos hidratos dos quais provêm [16]. Considerando-se  $\rho_{hyd} = 2280 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  o valor médio para a densidade dos principais hidratos da pasta de cimento (CSH e  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ).

#### 4.4.6 Massa volumétrica da água líquida

A massa volumétrica da água líquida, que se supõem incompressível, pode ser aproximada pela função proposta por RAZNJEVIC (1970, [38]). Ela diminui com a temperatura devido à dilatação volumétrica da água com o efeito do aquecimento.

$$\rho_l(T) = 314,4 + 685,6 \left[ 1 - \left( \frac{T}{374,4} \right)^{1/0,55} \right]^{0,55}, \quad (4.43)$$

sendo a temperatura  $T$  dada em °C nesta fórmula.

#### 4.4.7 Viscosidades dinâmicas

São usadas as funções propostas por PEZZANI (1992, [39]) para descrever a evolução das viscosidades dos fluidos:

$$\mu_l(T) = 2,414 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{570,58058}{T + 133,15}\right) \quad (4.44)$$

$$\mu_v(T) = 3,85 \times 10^{-8} T + 10^{-5}. \quad (4.45)$$

sendo que a temperatura  $T$  entra em °C nas equações e  $\mu_i$  é descrita em  $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ .

#### 4.4.8 *Calor latente de vaporização*

O calor latente de vaporização é aproximado pela seguinte relação:

$$L_{l \rightarrow v} = \frac{2450,2502 - 6,433949T}{1 - 0,0019057413T - 7,0023846T^2}, \quad (4.46)$$

com  $L_{l \rightarrow v}$  em  $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$  e  $T$  em  $^{\circ}\text{C}$ .

#### 4.4.9 *Calor latente de desidratação*

O calor latente de desidratação é a quantidade de calor fornecida ao material necessária para extrair da matriz hidratada uma unidade de massa de água ligada. Ela é dada por  $L_{l \rightarrow v} = 2,5 \times 10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ , segundo FERAILLE (2000, [40]).

# 5 Implementação no CAST3M

## 5.1 Descrição geral do CAST3M

O Castem é um código livre desenvolvido no DMT/CEA (Département de Mécanique et Technologie du Commissariat à l’Energie Atomique), na França. De modo geral, pode-se considerar o Castem como um código de resolução de equações diferenciais parciais pelo Método dos Elementos Finitos. Trata-se de um sistema de código aberto e gratuito, que permite a incorporação e adaptação de modelos por parte do usuário.

O Castem emprega uma linguagem de programação orientada a objetos específica, denominada GIBIANE. Pode-se usar procedimentos de cálculo já incorporados ao Castem, também escritos em GIBIANE, e os objetos são criados através de operadores pré-definidos, escritos na linguagem ESOPE.

Sendo assim, o Castem integra processos de cálculo, funções de construção do modelo (pré-processamento) e funções de tratamento dos resultados (pós-processamento) [41].

A linguagem GIBIANE se baseia na ideia de que uma computação é uma sucessão de processos independentes comunicando-se através de estruturas de informação chamadas objetos [42]. O objetivo de uma instrução em GIBIANE é criar um objeto particular através da ajuda de operadores que foram previamente criados.

O GIBIANE contém algumas regras básicas de sintaxe [42]:

- cada instrução deve ser finalizada por um ponto-e-vírgula “;”, pode ter no máximo oito linhas com setenta e dois caracteres por linha;
- cada operador é codificado com quatro caracteres;
- o número máximo de caracteres para o nome de um objeto é oito.

Por exemplo, a instrução `RIGI = RIGIDITE MODEL1 MATER1 ;`, cria a matriz de rigidez a partir do objeto com especificações do modelo `MODEL1` e do campo de propriedades do material `MATER1`. Da forma como está apresentada, esta instrução impossibilita o uso do operador `RIGIDITE` referenciado pelas quatro letras `RIGI`, uma vez que agora `RIGI` é um objeto contendo a matriz de rigidez. Por isso é aconselhável usar números e letras

ao mesmo tempo para nomear os objetos criados, já que os nomes dos operadores não possuem algarismos [42].

Neste trabalho, a implementação foi programada em alto nível usando-se a linguagem GIBIANE. Apesar do Castem dispor de diversos operadores pré-implementados, o desenvolvimento de um modelo no seu ambiente requer conhecimentos sólidos sobre o Método dos Elementos Finitos, sendo que no presente trabalho foi necessário também a compreensão da análise não linear aplicada ao problema em estudo. Ressalta-se também que o Castem não possui ambiente gráfico para desenvolvimento de modelos, adicionando dificuldades complementares à já complexa interface com o programador (toda a documentação do Castem está em francês e está disponível no sítio [www-cast3m.cea.fr](http://www-cast3m.cea.fr)).

## 5.2 Implementação do modelo termo-hídrico no Castem

O algoritmo usado neste trabalho foi originalmente proposto por SERCOMBE et al. (2001, [34]) para simular fenômenos termo-hídricos em um meio poroso. Neste trabalho esta rotina foi adaptada para permitir a análise de corpos compostos por dois ou mais tipos de material dispostos em camadas. Particularmente no caso em estudo fez-se necessário descrever as características do concreto, da rocha e da interface.

A rotina para o cálculo termo-hídrico de bicamadas concreto-rocha, denominada THCR, resolve as equações do modelo térmico acoplado ao modelo hídrico através de dois laços, `theriter` e `hyditer`. A rotina que faz a resolução das equações não-lineares, denominada `tather`, é chamada tanto no laço do cálculo térmico para resolver a equação da energia 4.6, quanto dentro do laço hídrico, para resolver a equação da saturação 4.29. O laço denominado `picard` é responsável pela verificação da convergência simultânea dos dois cálculos. A estrutura geral do código, incluindo-se as fases anteriores à rotina THCR é dada a seguir:

1. Definição da geometria e da malha
2. Formulação do concreto e da rocha dadas por unidade de volume dos materiais
3. Escolha do modelo térmico (e/ou mecânico) e especificação das propriedades dos materiais segundo os modelos

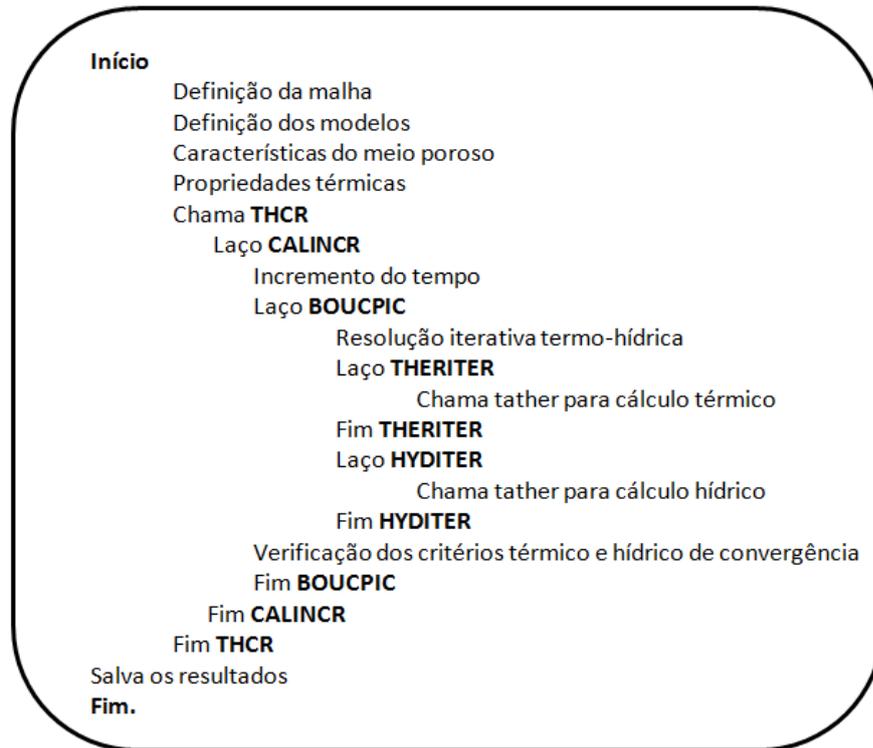


Figura 5.1: Algoritmo do cálculo termo-hídrico.

4. Definição do carregamento térmico e das condições iniciais e de contorno
5. Chamada do procedimento THCR com passagem de todos os parâmetros inicialmente definidos
  - Cálculo térmico
  - Cálculo hídrico
6. Fim do procedimento THCR: salva os resultados
7. Recuperação dos resultados para pós-processamento.

A estrutura da rotina THCR pode ser melhor compreendida pela Figura 5.1.

Como o objetivo deste trabalho é aproximar a previsão do modelo o máximo possível de um resultado real, uma parte dos dados usados neste trabalho, referentes às propriedades do concreto e da rocha, são provenientes de medidas experimentais que fizeram parte do programa experimental descrito no Capítulo 3.

## 6 Aplicação do modelo termo-hídrico para a bicamada

A estrutura a ser representada é um corpo prismático composto de dois materiais diferentes, sendo uma camada de concreto e outra de rocha como mostrado na Figura 3.1. Como as medições térmicas experimentais são tomadas ao longo de um eixo na altura do corpo-de-prova, a análise numérica é feita em duas dimensões para a estrutura mostrada na Figura 6.1. Essa figura apresenta também a faixa do corpo de prova usada na simulação computacional, com suas respectivas condições de contorno. Apresenta-se também o aspecto típico da malha de elementos finitos, composta de 400 elementos triangulares e lineares, empregada nas análises. Observa-se que o número de elementos da malha foi estabelecido após uma análise de convergência com refinamentos sucessivos, o que levou à configuração apresentada na Figura 6.1.

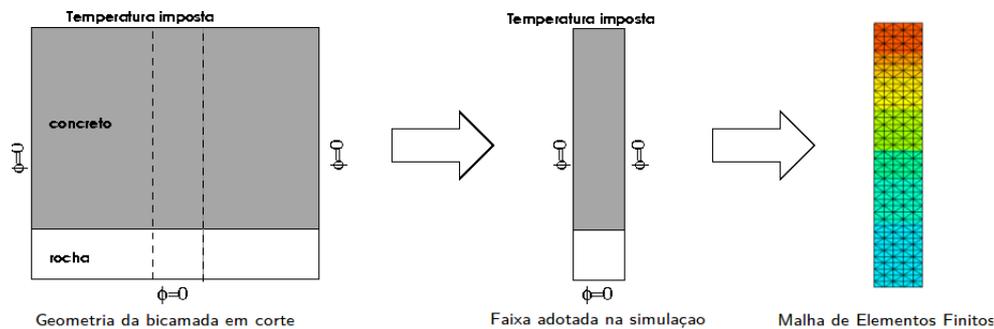


Figura 6.1: Estrutura modelada e condições de contorno

Ambos os materiais são considerados isotrópicos, mas diferem um do outro no valor de suas propriedades. Os dados e propriedades iniciais a serem definidos no início do cálculo para cada tipo de concreto e para a rocha são listadas junto aos seus respectivos valores nas Tabelas 6.1 e 6.2. Os calores específicos são dados para cada material para o cálculo do calor específico volumétrico total. Os valores são os mostrados na Tabela 6.3.

A porosidade e a permeabilidade intrínseca da rocha são mantidas constantes durante toda a análise, admitindo-se que na rocha não existe o processo de desidratação observado no concreto. As permeabilidades relativas da rocha seguem as mesmas evoluções adotadas para o concreto (Equações 4.38 e 4.39), sendo funções da saturação nos dois meios. A

Dado	Un.	CC	CAD
Quantidades de cimento, água e agregado	kg·m <sup>3</sup>	conforme Tab. 3.1	conforme Tab. 3.1
Água ligada	kg· m <sup>3</sup>	0,9× qtde. cimento× 0,21	0,9× qtde. cimento× 0,21
Densidade aparente	kg·m <sup>3</sup>	2150	2330
Condutividade térmica	W· m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	1,86	2,06
Porosidade	%	14	9,5
Permeabilidade ao gás	m <sup>2</sup>	1× 10 <sup>-17</sup>	1× 10 <sup>-19</sup>

Tabela 6.1: Dados para o modelo - concretos

Dado	Un.	Rocha
Densidade aparente	kg·m <sup>3</sup>	2296
Condutividade térmica	W· m <sup>-1</sup> K <sup>-1</sup>	1,5
Porosidade	%	14
Permeabilidade ao gás	m <sup>2</sup>	1× 10 <sup>-19</sup>

Tabela 6.2: Dados para o modelo - rocha

Tabela 6.4 mostra as condições iniciais em temperatura e saturação adotadas para os domínios.

As quatro evoluções da temperatura superficial dos concretos obtidas na fase experimental foram adotadas como sendo o carregamento térmico variável com o tempo. Dessa forma, foram feitas as seguintes análises:

- Concreto comum aquecido até 600 ° C (CC-600);
- Concreto comum aquecido até 750 ° C (CC- 750);
- Concreto de alto desempenho até 600 ° C (CAD - 600);
- Concreto de alto desempenho até 750° C (CAD-750).

Os resultados apresentados usam a nomenclatura abreviada mostrada acima para fazer referência a cada caso. Também são usadas as siglas T1, T2, T3, T4 e T5 para fazer referência aos cinco pontos ao longo da altura do corpo-de-prova, que são, respectivamente, a superfície do concreto que recebe a carga térmica, a meia-altura da camada de concreto, a interface concreto-rocha, a meia-altura da camada de rocha e a superfície da rocha. Os resultados em termos de temperatura para o ponto T1 não são apresentados, uma vez que estes valores experimentais são tomados como dados de entrada do modelo numérico e, conseqüentemente, as temperaturas numéricas e experimentais para T1 são sempre coincidentes.

	Calor específico ( $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot^{\circ}\text{C}^{-1}$ )
Cimento	750
Agregados	800
Água ligada	3760
Água livre	4184
Rocha	674

Tabela 6.3: Calores específicos

	Concreto	Rocha
Temperatura	24°C	24°C
Saturação	39% na superfície e 95% no restante	70%

Tabela 6.4: Condições iniciais em temperatura e saturação

## 6.1 Resultados do modelo TH

Serão apresentados a seguir, para cada ponto do corpo-de-prova, os resultados obtidos de temperatura absoluta, de taxa de variação da temperatura, de saturação e de pressão de vapor. Os resultados de cada aspecto são apresentados primeiro para o concreto comum e em seguida para o concreto de alto desempenho. Os gráficos referentes à temperatura apresentam sempre quatro curvas que são relativas às duas medições experimentais ( $600^{\circ}\text{C}$  e  $750^{\circ}\text{C}$ ) e aos dois resultados numéricos ( $600^{\circ}\text{C}$  e  $750^{\circ}\text{C}$ ).

### 6.1.1 *Temperatura absoluta*

A Figura 6.2 mostra a comparação entre as temperaturas obtidas pelo programa e as obtidas experimentalmente. Nota-se uma diferença já entre as medidas experimentais. Esse tipo de experimento envolve a precisão do sistema de aquecimento do forno, bem como a precisão do sistema de medição das temperaturas. Além do fator instrumentos de medição, também deve-se considerar que, sendo apenas um forno, as experiências feitas com cada corpo-de-prova foram sequenciais, com intervalos de alguns dias entre elas, o que pode causar pequenas variações na condição inicial dos corpos-de-prova que ficaram acondicionados nas cobertas plásticas por mais tempo.

Verifica-se na Figura 6.2 um crescimento compatível das temperaturas numéricas com as temperaturas experimentais (o que será evidenciado pelos gráficos das taxas de evolução a seguir). É importante notar que, para o ponto T2 (Figura 6.2(a)), verifica-se o início do afastamento entre resultados numéricos e experimentais a partir de aproximadamente  $60^{\circ}\text{C}$ , temperatura na qual começa a acontecer (numericamente) o fenômeno da desidratação.

O erro é progressivamente menor conforme o ponto analisado está mais longe da superfície aquecida. Isso pode estar relacionado à maior simplicidade dos fenômenos que ocorrem na camada de rocha, sem a consideração de desidratação da matriz rochosa.

A Figura 6.3 mostra as temperaturas no corpo no momento em que a temperatura na superfície do concreto é máxima.

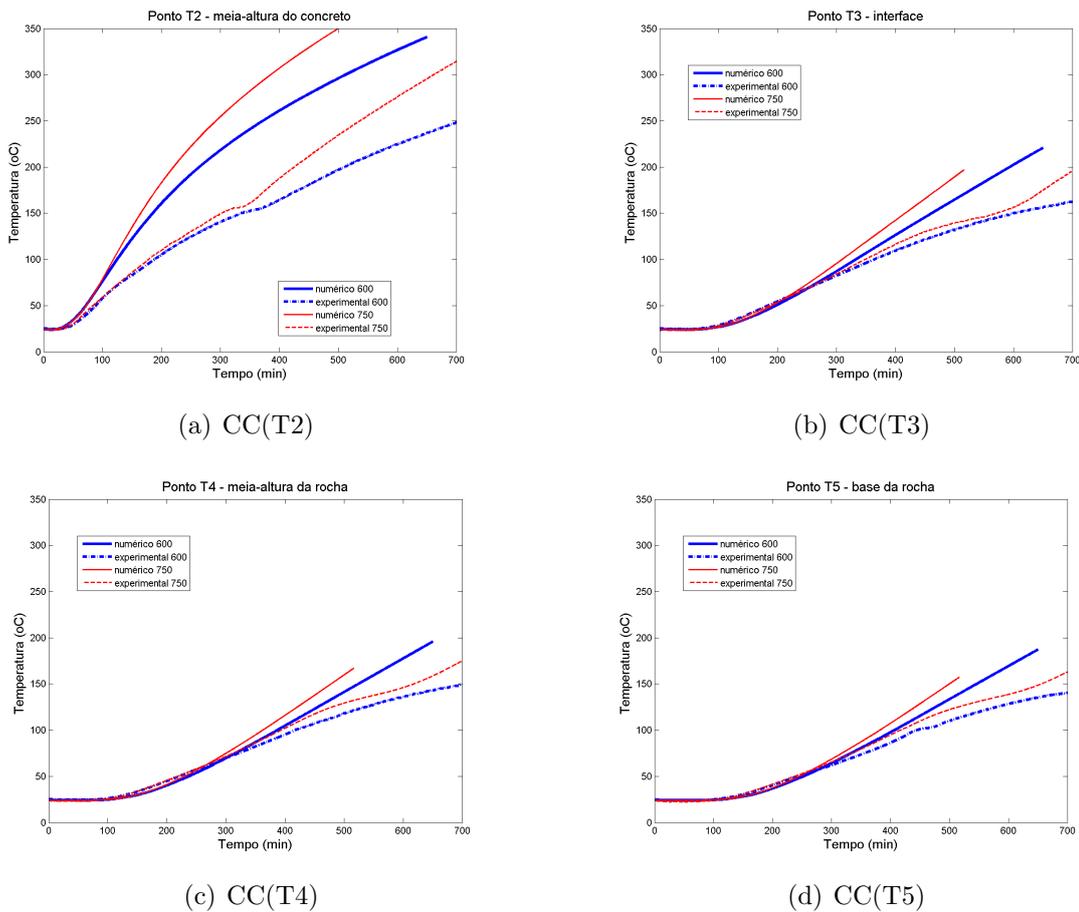


Figura 6.2: Temperaturas numéricas e experimentais para o concreto comum (CC) em cada ponto de análise

A Figura 6.4 mostra as temperaturas para o concreto de alto desempenho em cada ponto. Excetuando-se o ponto T2, as demais curvas seguem o mesmo padrão observado para o CC. O comportamento da curva experimental na Figura 6.4(a) refere-se exatamente ao termopar que apresentou avarias em suas aferições.

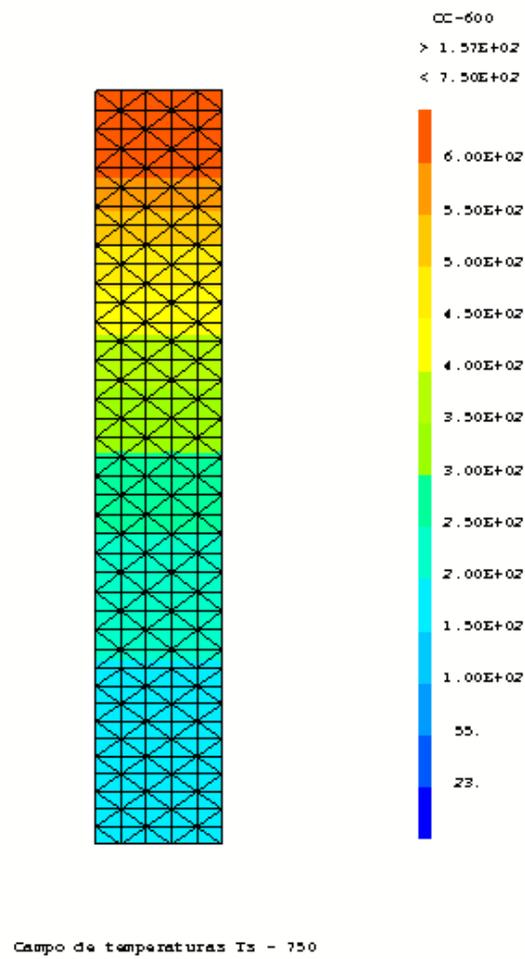
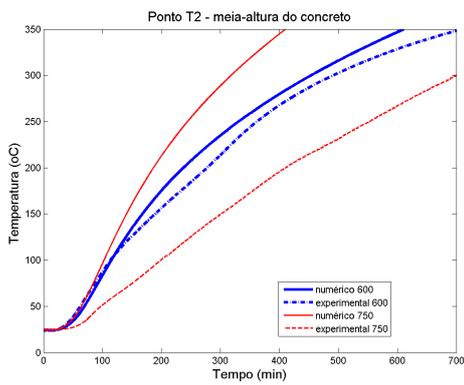
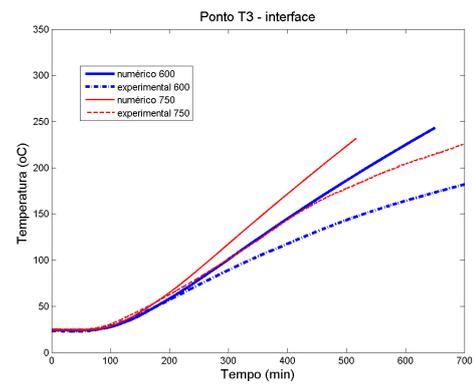


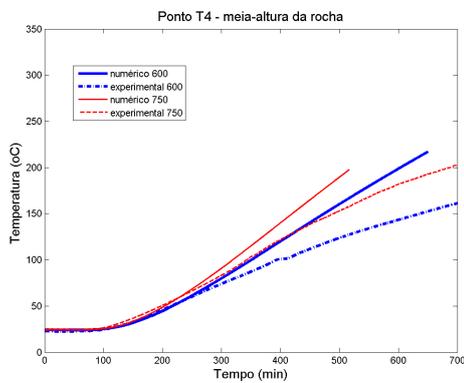
Figura 6.3: Distribuição de temperaturas no concreto comum (CC) no momento em que  $T(T1) = 750 \text{ }^\circ\text{C}$



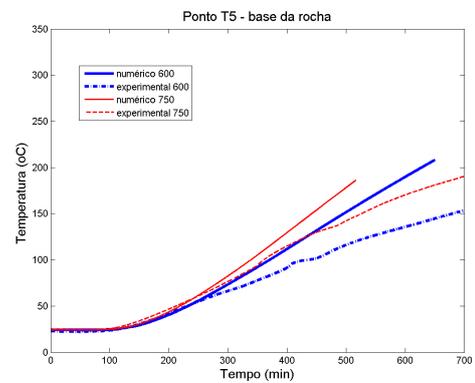
(a) BHP (T2)



(b) BHP (T3)



(c) BHP (T4)



(d) BHP (T5)

Figura 6.4: Temperaturas numéricas e experimentais para o concreto de alto desempenho (CAD) em cada ponto de análise

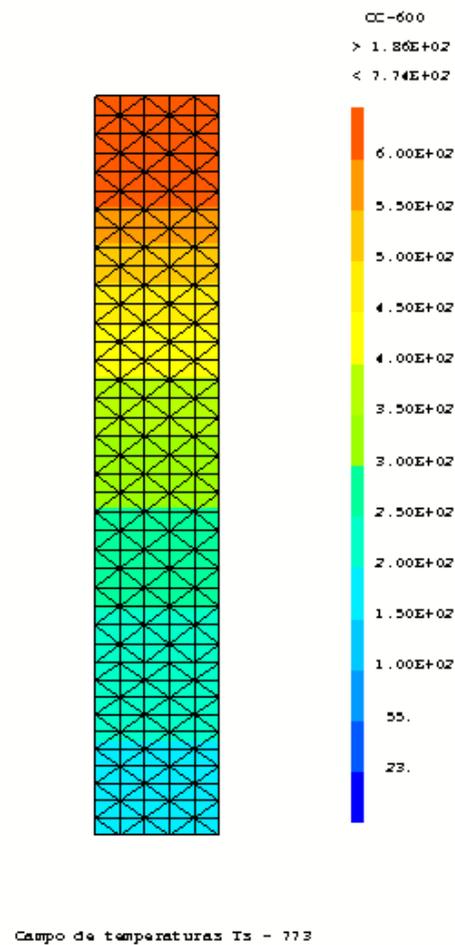


Figura 6.5: Distribuição de temperaturas no concreto de alto desempenho (CAD) no momento em que  $T(T1) = 750 \text{ }^\circ\text{C}$

### 6.1.2 Taxa de variação das temperaturas

As Figuras 6.6 e 6.7 mostram a taxa de das temperaturas para os concretos CC e CAD, respectivamente. Novamente, os melhores resultados acontecem para a interface e para rocha. Nestes pontos a taxa de variação real e numérica são próximas, sugerindo que deve-se conhecer melhor os parâmetros iniciais do meio rochoso para que também as temperaturas absolutas sejam melhor representadas.

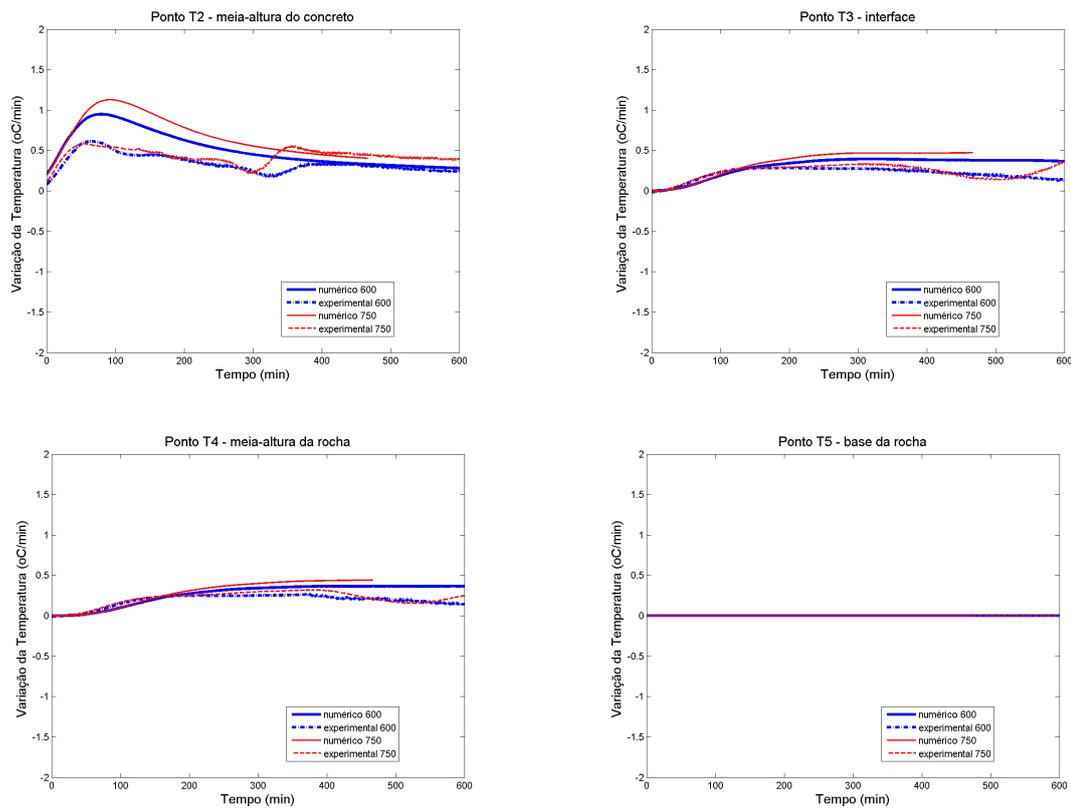


Figura 6.6: Velocidade das evoluções de temperatura para o concreto comum (CC) em cada ponto de análise

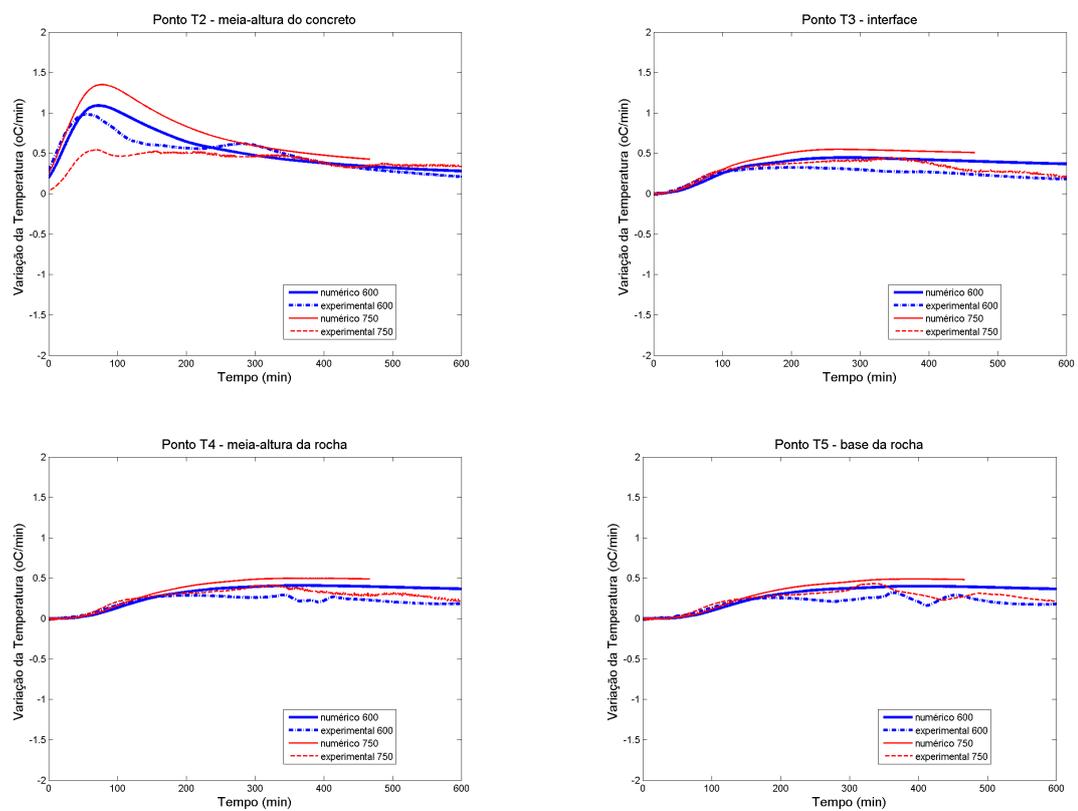


Figura 6.7: Velocidade das evoluções de temperatura para o concreto de alto desempenho (CAD) em cada ponto de análise

### **6.1.3 Saturação**

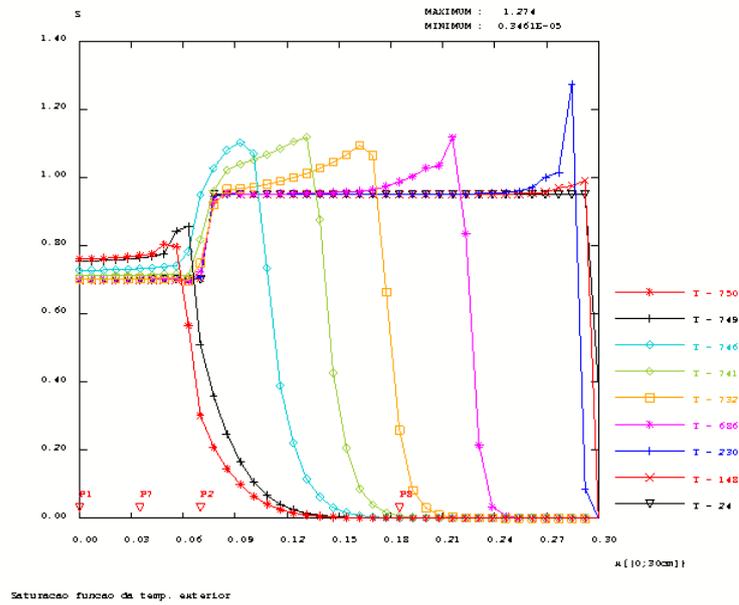
A saturação é apresentada no gráfico da Figura 6.8 através de sua evolução na altura do corpo-de-prova, sendo cada curva obtida para uma dada temperatura na superfície. Ou seja, o eixo das abscissas corresponde as diferentes alturas no eixo em análise. Os pontos P1, P7, P2 e P8 marcados no eixo das abscissas são, respectivamente, os pontos denominados T5, T4, T3 e T2 – sendo a abscissa 0,30 m correspondente ao ponto T1 da superfície aquecida.

São notáveis os valores da saturação maiores que 100% tanto para o CC quanto para o CAD. Sendo uma das hipóteses feitas pelo modelo a consideração do meio indeformável, em alguns pontos críticos relativos a geração e destruição de massa líquida, o volume de água líquida na estrutura acaba superando o volume dos vazios existentes. Essa característica do modelo fica evidente ao se confrontar os gráficos das Figuras 6.8(a) e 6.9(a) com o auxílio da variação das porosidades para os dois casos, vista nas Figuras 6.8(b) e 6.9(b). Os valores acima de 100% são maiores no concreto CAD, que apresenta mais baixa porosidade durante todo o ciclo de aquecimento, evidenciando que a hipótese adotada de indeformabilidade dos meios pode levar a resultados inconsistentes em certas situações.

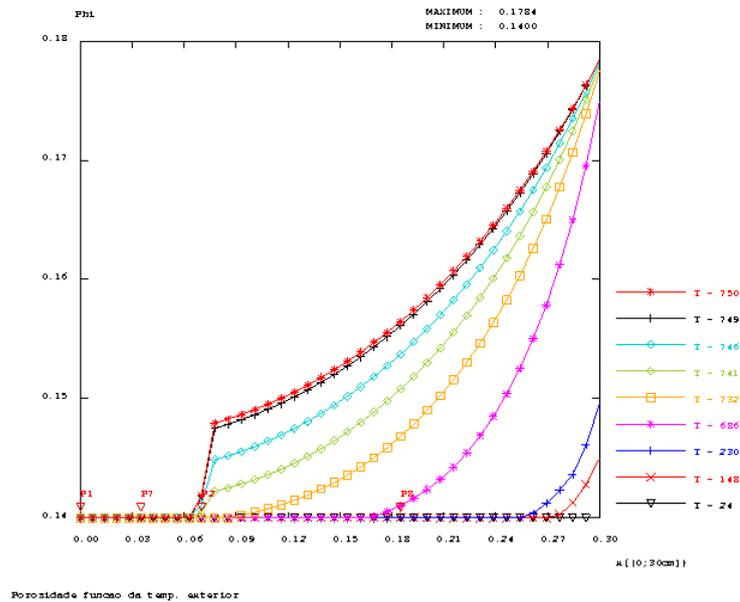
As curvas de saturação também mostram a tendência da migração da água para as zonas mais frias, visto o aumento da saturação na camada rochosa.

### **6.1.4 Pressão de vapor**

As pressões de vapor em função da altura do corpo-de-prova e das temperaturas são dadas nas Figuras 6.10 e 6.11. Essas curvas apresentam o aspecto típico encontrado na literatura experimental para a variação da poro-pressão nos concretos aquecidos ([4]). Os picos de pressão crescem com a temperatura e com a distância da superfície aquecida, caracterizando o fenômeno “moisture clog” citado no Capítulo 2. Esse picos de pressão coincidem exatamente com os picos de saturação, ou seja, caracterizam regiões com alto teor de água. Também se verifica pressões cerca de dez vezes maiores (do que as pressões do concreto comum) no concreto CAD. Realmente o concreto CAD se rompe intensamente quando aquecido até  $750^{\circ}C$  (Figura 3.14).

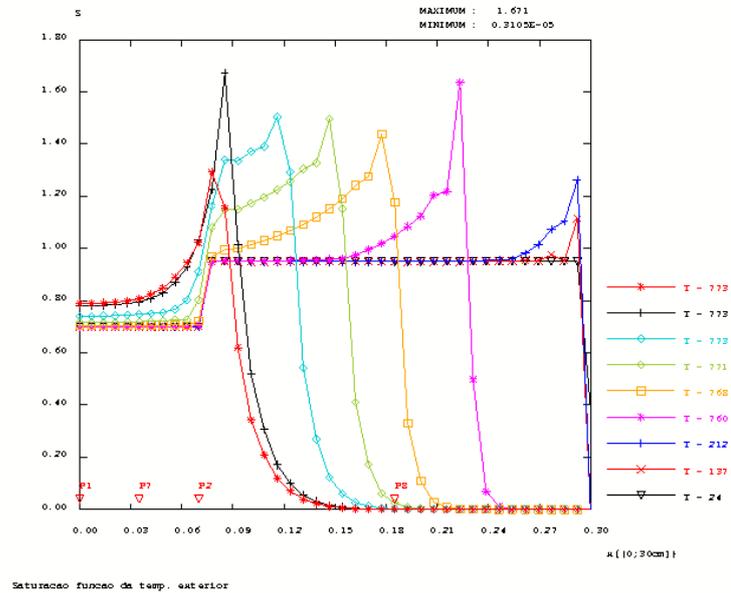


(a) Saturação CC-750

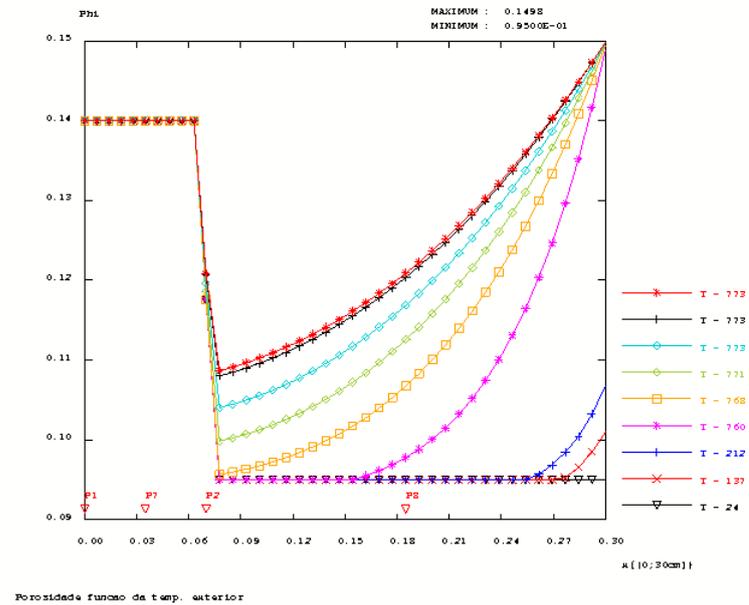


(b) Porosidade CC-750

Figura 6.8: Evolução da saturação e da porosidade ao longo do eixo analisado do concreto comum (CC)



(a) Saturação CAD-750



(b) Porosidade CAD-750

Figura 6.9: Evolução da saturação e da porosidade ao longo do eixo analisado do concreto de alto desempenho (CAD)

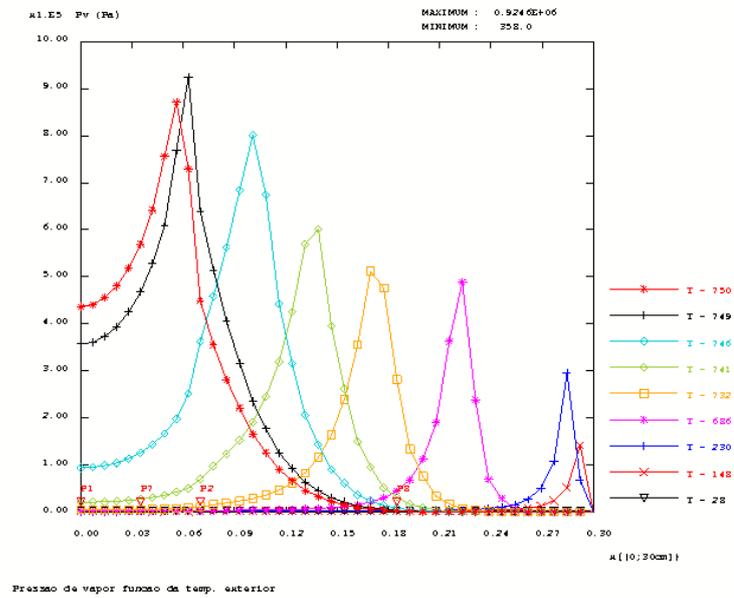


Figura 6.10: Evolução da pressão de vapor ao longo do eixo analisado para o concreto comum (CC)

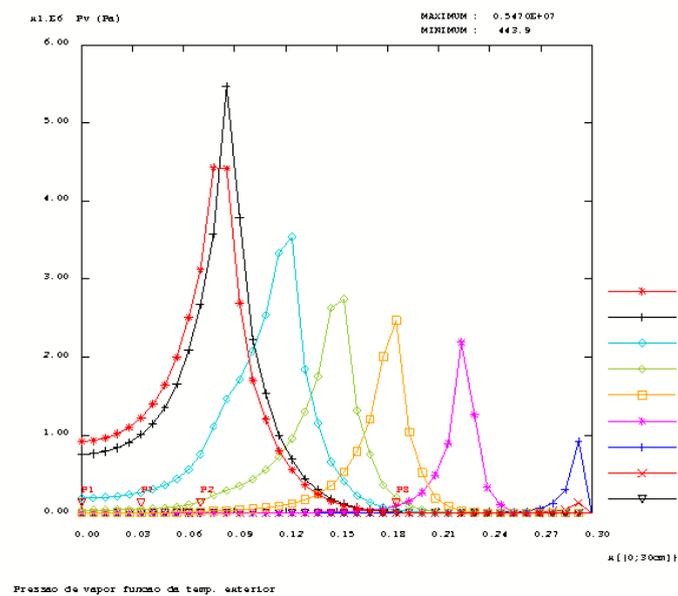


Figura 6.11: Evolução da pressão de vapor ao longo do eixo analisado para o concreto de alto desempenho (CAD)

### **6.1.5 Considerações sobre os resultados numéricos**

A base experimental para comparação dos resultados numéricos é constituída apenas pelos valores medidos das temperaturas. Mesmo assim foi possível verificar alguns pontos importantes para a compreensão e ajustes do modelo empregado.

Ressalta-se que a qualidade dos resultados é fortemente afetada por parâmetros envolvendo aspectos físicos (porosidade, permeabilidade) e aspectos químicos (desidratação do concreto devido à temperatura). Outro ponto é a alta complexidade do problema representado e a sua forte característica não-linear, uma vez que todas as propriedades e efeitos são interdependentes. Também a precisão das medições experimentais é um fator que muito interfere na análise dos resultados.

Analisando-se os resultados relativos à temperatura, saturação e pressão, podem ser feitas as seguintes considerações:

#### 6.1.5.1 Temperatura

- O modelo termo-hídrico implementado mostrou-se capaz de representar a evolução da temperatura no meio composto de modo adequado no que se refere a aspectos qualitativos;
- Nota-se uma boa concordância para as temperaturas calculadas no concreto até o início da desidratação – considerada aqui a partir de  $60^{\circ}C$ ;
- Em valores absolutos, as temperaturas calculadas na rocha são mais próximas dos valores experimentais do que as calculadas para o concreto. Isso também ocorre para os resultados em termos das taxas de variação da temperatura. Este resultado pode significar que o problema no domínio do concreto é mais complexo do que se considerou nesta modelagem, enquanto que para a rocha os resultados são mais satisfatórios.

#### 6.1.5.2 Saturação

- Os resultados obtidos para a variação da saturação são qualitativamente compatíveis com as hipóteses teóricas;
- Como esperado, as concentrações de saturação (picos) ocorrem sucessivamente em direção à base do corpo-de-prova com o aumento da temperatura;

- O deslocamento da umidade para as regiões mais frias do meio encontra resistência devido à baixa permeabilidade dos materiais gerando concentração de umidade nas porções consecutivas às regiões de mais alta temperatura;
- Os valores de saturação que ultrapassam 100% podem ser resultado da hipótese de meio indeformável e do fato de a porosidade ser considerada função apenas dos aspectos químicos.

#### 6.1.5.3 Pressão

- As pressões nos poros devem ter comportamento compatível à evolução da saturação no meio;
- Devido à alta concentração de massa, os picos de saturação coincidem com os picos de pressão;
- Os resultados obtidos para a pressão estão em conformidade com os resultados experimentais observados, um vez que o fenômeno de “spalling” foi detectado nos corpos-de-prova ensaiados, o que se traduz no modelo numérico através da ocorrência de picos de pressão na região entre o concreto e a rocha. Estes resultados estão em conformidade com o resultado da literatura mostrado na Figura 2.4.

## 7 Conclusões e perspectivas

Este trabalho consistiu nos estudos experimental e numérico da evolução da temperatura e dos seus efeitos sobre amostras bicamada de concreto e rocha. Os fundamentos teóricos apresentados nos Capítulos 2 e 4 foram usados na implementação do modelo e os resultados obtidos numericamente foram avaliados de acordo com resultados presentes na literatura e com os resultados do programa experimental.

Os resultados experimentais contribuíram para a validação qualitativa dos resultados numéricos e para a predição das melhorias e adaptações necessárias ao modelo para a busca de resultados quantitativamente mais realistas. Algumas observações importantes acerca do comportamento do concreto podem ser feitas através dos registros do estado pós-aquecimento das amostras. Os níveis de degradação do material são observados para cada tipo de concreto empregado e para cada temperatura máxima considerada. Os concretos comuns e de alta resistência evidenciam suas características físicas e mecânicas ao se comportarem de maneiras bem distintas quando submetidos aos mesmos grau e taxa de aquecimento. O concreto de alta resistência tende a desenvolver maiores pressões nos seus poros, uma vez que é mais compacto do que o concreto comum, reagindo então através do fenômeno do “spalling”, bem marcante no CAD-750. É importante dizer que tamanha degradação afeta a precisão e muitas vezes a coerência das medidas dos termopares. Especialmente no concreto CAD-750, devido aos destacamentos totais dos fragmentos de concreto, os termopares se perdem no meio deixando de medir a temperatura que se desenvolve no interior da massa de concreto. Também pode-se analisar que o relaxamento das pressões desenvolvidas, proporcionado pela intensa fissuração, preserva as regiões mais próximas da interface, ao contrário do que acontece no concreto mais permeável.

Quanto à análise numérica, o modelo empregado demonstrou aptidão para descrever o problema aplicado à bicamada concreto-rocha. O fenômeno do “spalling”, especialmente, fica bem definido e caracterizado pelos perfis de pressão no poros para os concretos CAD. Entretanto, é importante ter conhecimento das suas limitações. A verificação de que a evolução da taxa das temperaturas na rocha e na interface é mais exata do que no concreto, sugere que o modelo termo-hídrico necessita de calibrações de dados para o comportamento interface-rocha enquanto que, para o comportamento do concreto, o mo-

delo requer maior acurácia na descrição do seu comportamento físico, assim como de estudos paramétricos mais aprofundados.

Um modelo importante adotado para o concreto, o da desidratação começando aos 60° C, certamente interfere na qualidade dos resultados. Tem-se como perspectiva uma análise mais detalhada da influência dessa temperatura limite nos resultados numéricos, com a expectativa de que as temperaturas numéricas sejam mais próximas das experimentais.

Deve-se fazer considerações também sobre a hipótese de corpo indeformável aplicada às estruturas bicamada. Sabe-se que as tensões internas geradas pelas temperaturas diferenciais influencia nos aspectos relativos aos danos da estrutura. Por dano pode-se compreender não só as fissuras de origem termo-mecânicas, mas também a porosidade inicial e a porosidade desenvolvida devido aos fenômenos de desidratação. Os danos presentes nos materiais afetam a propagação do calor e, conseqüentemente, o fluxo de massa. Espera-se que, com a inclusão de um acoplamento mecânico, a questão da deformabilidade dos corpos amenize os aspectos obtidos com o cálculo termo-hídrico para a saturação. Esforços neste sentido estão em andamento através da implementação acoplada de um modelo de dano-elasticidade na previsão do comportamento termo-hidro-mecânico da bicamada.

## REFERÊNCIAS

- [1] KUKLA, K. K., *Concrete at high temperatures: hygro-thermomechanical degradation of concrete*, Ph.D. Thesis, University of Glasgow, 2010.
- [2] MEHTA, P. K., MONTEIRO, P. J. M., *Manuel de mécanique des roches*. McGraw-Hill, 1993.
- [3] KHOURY, G. A., “Polypropylene fibres in heated concrete. Part 2: Pressure relief mechanisms and modeling criteria”, *Magazine of Concrete Research*, 2008.
- [4] BAZANT, Z. P., KAPLAN, M. F., *Concrete at High Temperatures*. Pearson Education, 1996.
- [5] HARMATHY, T. Z., “Thermal properties of concrete at elevated temperatures”, *ASTM Journal of Materials*, v. 5, n. 1, pp. 47–74, 1970.
- [6] European Committee for Standardisation, *Eurocode 2: calcul des structures en béton / Part 1-2: règles générales - calcul du comportement au feu*, 2005.
- [7] NCHAMBOU, A. N., *Effet des hautes températures (20-600°C) sur le béton. Cas particulier du béton a hautes performances*, Ph.D. Thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1995.
- [8] MENOUE, A., *Étude du comportement thermomecanique des bétons à haute température: approche multi échelles e l'endommagement thermique*, Ph.D. Thesis, Université de Pau et des Pays de L'Adour, 2004.
- [9] VOSTEEN, H.-D., SCHELLSCHMIDT, R., “Influence of temperature on thermal conductivity, thermal capacity ad thermal diffusivity for different types of rock”, *Physics ans Chemistry of the Earth*, v. 28, pp. 499–509, 2003.
- [10] YAVUZ, H., DEMIRDAG, S., CARAN, S., “Thermal effect on the physical properties of carbonate rocks”, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v. 47, n. 1, pp. 94–103, 2010.
- [11] LION, M., *Influence de la température sur le comportement poromecanique ou hydraulique d'une roche carbonatée et d'un mortier. Etudes expérimentales.*, Ph.D. Thesis, Université des Sciences et Technologies de Lille, 2004.

- [12] BATTISTA, R. C., BATISTA, E. M., CARVALHO, E. M. L., “Reabilitação estrutural do prédio do aeroporto Santos Dumont após danos causados por incêndio”, *Revista Internacional de Desastres Naturales, Accidentes e Infraestructura Civil*, v. 1, n. 1, pp. 51–60, 2001.
- [13] COSTA, C. N., DE FIGUEIREDO, A. D., E SILVA, V. P., “O fenômeno do lascamento (“spalling”) nas estruturas de concreto armado submetidas a incêndio: uma revisão crítica”. In: *44º Congresso Brasileiro do Concreto.*, IBRACON: Belo Horizonte, Brasil, 2002.
- [14] KAMECHE, Z. A., AOUAL, F. K., SEMCHA, A., BELHADJI, M., “Effets des hautes températures sur le comportement du béton: application au revêtement des tunnels”. In: *1<sup>st</sup> International Conference on Sustainable Built Environment Infrastructures in Developing Countries*, 2009.
- [15] KHOURY, G. A., MAJORANA, C. E., PESAVENTO, F., SCHREFLER, B. A., “Modelling of heated concrete”, *Magzine of Concrete Research*, v. 54, n. 2, pp. 77–101, 2002.
- [16] TSHIMANGA, M. K., *Influence des paramètres de formulation sur le comportement à haute température des bétons*, Ph.D. Thesis, Université de Cergy-Pontoise, 2007.
- [17] MAGALHÃES, A. G., DE FRANÇA, E. P., AGUILAR, M. T. P., CALIXTO, J. M., VASCONCELOS, W. L., “A influência de agregados graúdos de diferentes mineralogias nas propriedades mecânicas do concreto de alto desempenho”. In: *17º Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciência dos Materiais*, Foz do Iguaçu - PR, Brasil, 2006.
- [18] NEUVILLE, A. M., *Propriedades do Concreto*. Editora Pini, 1997.
- [19] COSTA, C. N., DE FIGUEIREDO, A. D., SILVA, V. P., “Aspectos tecnológicos dos materiais de concreto em altas temperaturas”. In: *NUTAU 2002, Seminário Internacional Sustentabilidade, Arquitetura, Desenho Urbano, 2002*, São Paulo - SP, Brasil, 2002.

- [20] PONT, S. D., *Lien entre la perméabilité et l'endommagement dans les bétons à haute température*, Ph.D. Thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2004.
- [21] MINDEGUIA, J.-C., PIMIENTA, P., NOUMOWÉ, A., KANEMA, M., “Temperature, pore pressure and mass variation of concrete subjected to high temperature - Experimental and numerical discussion on spalling risk”, *Cement and Concrete Research*, v. 40, pp. 477–487, 2009.
- [22] KREITH, F., BOHN, M. S., *Princípios de Transferência de Calor*. Thomson, 2003.
- [23] LIDUÁRIO, A. S., *Contribuição ao estudo das propriedades térmicas do concreto convencional na presença das adições minerais*, Master's Thesis, Universidade Federal de Goiás, 2006.
- [24] NAUS, D. J., *The effect of elevated temperature on concrete materials and structures - a literature review*, Tech. rep., By Oak Ridge National Laboratory for U.S. Nuclear Regulatory Commission, 2005.
- [25] KOMONEN, J., PENTTALA, V., “Effects of high temperature on the pore structure and strength of plain and polypropylene fiber reinforced cement pastes”, *Fire Technology*, v. 39, pp. 23–34, 2003.
- [26] ROSTASY, F. S., WEISS, R., WIEDMANN, G., “Changes of pore structure of cement mortars due to temperature”, *Cement and Concrete Research*, v. 10, n. 2, pp. 157–164, 1980.
- [27] CHOINSKA, M., KHELIDJ, A., CHATZIGEORGIU, G., PIJAUDIER-CABOT, G., “Effects and interactions of temperature and stress-level related damage on permeability of concrete”, *Cement and Concrete Research*, v. 37, pp. 79–88, 2006.
- [28] HOMAND, F., DUFFAUT, P., *Manuel de mécanique des roches*. v. 1. Ecole des Mines de Paris, 1999.
- [29] AURANGZEB, KHAN, L. A., MAQSOOD, A., “Prediction of effective thermal conductivity of porous consolidated media as a function of temperature: a test example of limestones”, *Journal of physics D: applied physics*, v. 40, n. 16, pp. 4953–4958, 2007.

- [30] HETTEMA, M. H. H., *The thermo-mechanical behaviour of sedimentary rock : an experimental study*, Ph.D. Thesis, Delft University of Technology, 1996.
- [31] FREDRICH, J. T., FONG WONG, T., “MICROMECHANICS OF THERMALLY INDUCED CRACKING IN THREE CRUSTAL ROCKS”, *Journal of Geophysical Research Solid Earth*, v. 91, pp. 12743–12764, 1986.
- [32] NGUYEN, N. B., GIRAUD, A., GRGIC, D., “A composite sphere assemblage model for porous oolitic rocks”, *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, v. 48, n. 6, pp. 909–921, 2011.
- [33] CLAUSER, C., HUENGES, E., “Thermal Conductivity of Rocks and Minerals”, In: *Rock physics and phase relations: a handbook of physical constants (Thomas J. Ahrens)*, v. 3, pp. 105–126, American Geophysical Union: Washington, DC, 1995.
- [34] SERCOMBE, J., GALLE, C., RANC, G., “Modélisation du comportement du béton à haute température: transferts de fluides et de chaleur et déformations pendant les transitoires thermiques”, Note technique CEA SCCME, référence: NT-SCCME 081, 2000.
- [35] LEWIS, R. W., NITHIARUSU, P., SEETHARAMU, K. N., *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. John Wiley & Sons, 2004.
- [36] COUSSY, O., *Poromechanics*. John Wiley & Sons, 2004.
- [37] GALLÉ, C., SERCOMBE, J., PIN, M., ARCIER, G., BOUNIOL, “Behavior of concrete of high performance concrete under high temperature (60-450°C) for surface long-term storage : thermo-hydro-mechanical residual properties”, *Materials research society*, v. 663, 2001.
- [38] RAZNJEVIC, K., *Table des diagrammes thermodynamiques*, 1970.
- [39] PEZZANI, P., “Propriétés thermodynamiques de l’eau”, *Techniques de l’ingénieur*, 1992.
- [40] FERAILLE-FRESNET, A., *Rôle de l’eau dans le comportement à haute température des bétons*, Ph.D. Thesis, l’École Nationale des Ponts et Chaussées, 2000.

- [41] FICHOUX, E. L., *Presentation et Utilisation de CASTEM 2000*, 1998.
- [42] French Atomic Research Center - CEA, *Beginning with Castem 2000*, 1995.
- [43] WALLACE, J. M., HOBBS, P. V., *Atmospheric Science - An Introductory Survey*.  
2nd ed. Elsevier, 2006.

# APÊNDICE A - Código no CAST3M

A seguir são mostrados alguns trechos do código na linguagem GIBIANE. As linhas iniciadas por \* são comentários.

A Figura A.1 mostra o início da criação da geometria e da malhas de elementos finitos. A geometria modelada é um retângulo de 30 cm de altura, dos quais 23 cm são de concreto e 7 cm são de rocha, e 7 cm são de rocha, e 1 cm de largura. A parte relativa ao concreto possui 30 elementos na altura e a parte relativa à rocha possui 10 elementos na altura (sendo **ndemib** e **ndemir** os números de elementos definidos para a metade da altura de concreto e para a metade da altura de rocha). A largura da geometria é discretizada com 5 elementos triangulares.

```

1007 *****
1008 *****PRINCIPAL*****
1009 *****
1010
1011 -----
1012 *      Geometria e Malha
1013 *-----
1014
1015 OPTI DIME 2 ELEM tri3 ;
1016 SAUT ligne ;
1017 * paramètres
1018 h_beton = 0.23 ;
1019 h_roche = 0.07 ;
1020 h_tot   = h_roche + h_beton ;
1021 larg    = 0.1 ;
1022 demi_la = larg * 0.5 ;
1023 demi_hr = h_roche * 0.5 ;
1024 demi_hb = h_roche + (h_beton * 0.5) ;
1025
1026 ndemir = 5 ;
1027 ndemib = (ndemir * 3) ;
1028 n      = 5 ;
1029
1030 * géométrie extérieure
1031 p1 = 0.00 0.00 ;
1032 p7 = 0.00 demi_hr ;
1033 p2 = 0.00 h_roche ;
1034 p8 = 0.00 demi_hb ;
1035 p3 = 0.00 h_tot ;
1036 p6 = demi_la h_tot ;
1037 p10 = demi_la demi_hb ;
1038 p5 = demi_la h_roche ;
1039 p9 = demi_la demi_hr ;
1040 p4 = demi_la 0.00 ;

```

Figura A.1: Criação da geometria e da malha

A Figura A.2 mostra a continuação da criação da malha de elementos finitos e a criação das superfícies de concreto e de rocha separadamente para posterior adição (**sur = sur1 + sur2**).

A Figura A.3 mostra a definição dos dados iniciais do concreto e da rocha, tais como: composição em massa específica do concreto, massa específica da rocha, porosidades, permeabilidades. Também se define nesta fase a evolução que governa a desidratação e o calor latente de desidratação.

```

1042 lint_r1 = DROI ndemir p1 p7 ;
1043 lint_r2 = DROI ndemir p7 p2 ;
1044 lint_b1 = DROI ndemib p2 p8 ;
1045 lint_b2 = DROI ndemib p8 p3 ;
1046 lint_r = lint_r1 et lint_r2 ;
1047 lint_b = lint_b1 et lint_b2 ;
1048 lint = lint_r et lint_b ;
1049 haut = DROI n p3 p6 ;
1050 droitb1 = DROI ndemib p6 p10 ;
1051 droitb2 = DROI ndemib p10 p5 ;
1052 droitr1 = DROI ndemir p5 p9 ;
1053 droitr2 = DROI ndemir p9 p4 ;
1054 droitb = droitb1 et droitb2 ;
1055 droitr = droitr1 et droitr2 ;
1056 droit = droitb et droitr ;
1057 bas = DROI n p4 p1 ;
1058 interfb = DROI n p5 p2 ;
1059
1060 * pour la partie beton
1061 sur1 = DALL haut droitb interfb lint_b ;
1062
1063 * pour la partie roche
1064 sur2 = DALL bas lint_r interfb droitr ;
1065
1066 sur = sur1 et sur2 ;

```

Figura A.2: Criação da malha e das superfícies da geometria (concreto, rocha e geometria total)

```

1071 *-----
1072 *      Formulação do concreto e da rocha
1073 *-----
1074 beton = table ;
1075 roche = table ;
1076
1077 *formulation en kg/m3 de beton
1078 beton.ciment = 362. ;
1079 beton.eauga = 217. ;
1080 beton.eauliee = 0.9 * beton.ciment * 0.21 ;
1081 beton.granu = 1648. ;
1082 BETON.DENSID = 2150. ;
1083
1084 *permeabilidade inicial ao gas
1085 beton.kini = 1.0e-17 ;
1086 beton.poro0 = 0.14 ;
1087 beton.cond20 = 1.86 ;
1088
1089 *formulation en kg/m3 de roche
1090 roche.massr = 2296. ;
1091 roche.kini = 1.0e-17 ;
1092 roche.poro0 = 0.14 ;
1093 roche.cond20 = 1.5 ;
1094
1095 *-- quantité d'eau déshydratée totale (kg/m3) d = 0.127 * <T - 60>
1096
1097 tempe = prog 20. 60. 600. ;
1098 d0 = beton.eauliee ;
1099 desmd = prog 0. 0. ((d0 / 540) * (600. - 60.)) ;
1100 edesmd = evol manu 'tcel' tempe 'deshyd' desmd ;
1101
1102 *-- cinétique de deshydratation (kg/m3/°C) constante = 0.127
1103
1104 tempe2 = prog 20. 59.9 60. 600. ;
1105 des = prog 0. 0. (d0 / 540) (d0 / 540) ;
1106 edes = evol manu 'tcel' tempe2 'deshyd' des ;
1107
1108 beton.edesmd = edesmd ;
1109 beton.edes = edes ;
1110 beton.latdes = 2500000. ;

```

Figura A.3: Dados iniciais dos materiais concreto e rocha

A seguir, tem-se a definição do modelo térmico e da curva de aquecimento na Figura A.4. Também se vê neste trecho do código a definição das condições de contorno térmicas: imposição da curva de aquecimento na aresta superior da geometria (superfície do concreto) e definição dos fluxos nulos nas demais arestas da geometria.

As condições de contorno hídricas podem ser de três tipos: saturação imposta, con-

```

1115 *-----
1116 *      Modelos et C.L térmicas
1117 *-----
1118
1119 modt1 = MODE sur THERMIQUE ISOTROPE ;
1120
1121 *Température imposée à l'extérieur
1122 *
1123 tempimp = BLOQ T haut ;
1124 valimp = DEPI tempimp 1. ;
1125 *
1126 *****
1127 *** T = 600øC COURBE ISO***
1128 *****
1129
1130 LTEMPS = (PROG 0. PAS 300. 1200. 1500. PAS 1500. 39000.);
1131
1132 LT = (PROG 24.0 45.33 108.3 170.7 217.55 260. 447. 514. 537.
1133 551. 559. 567. 572. 574. 577.7 580.8 582.5 584.8 586.4 588.3 589.2
1134 590.8 592.1 594.76 596. 597.41 598.23 598.33 599.43 600. 600. );
1135
1136 *Construction de l'évolution de la température en fonction du temps
1137 evolimp = EVOL MANU 'TEMPS' LTEMPS 'T' LT ;
1138
1139 chat1 = CHAR 'TIMP' valimp evolimp ;
1140
1141 *Creation d'un flux nul
1142 FLUO = MANU CHFO (bas et lint et droit) 1 Q 0. ;
1143 evolflu = EVOL MANU TEMP LTEMPS FLUX (PROG (DIME LTEMPS) * 0.) ;
1144
1145 flul = CHAR 'Q' FLUO evolflu ;

```

Figura A.4: Definição do modelo e condições de contorno térmicas

vecção e pressão de vapor imposta. No caso da última condição, adotada neste trabalho, o valor da pressão de vapor imposta é deduzida do valor da saturação inicial imposta no contorno:

$$p_v = \text{constante} = S_l(t_0)p_{vs}(T_0) \quad \text{sobre } \partial\Omega \quad (\text{A.1})$$

Durante o cálculo a saturação é atualizada no contorno para se impor uma pressão constante:

$$S_l = \frac{S_l(t_0)p_{vs}(T_0)}{p_{vs}(T)} \quad \text{sobre } \partial\Omega \quad (\text{A.2})$$

Sendo assim, é necessário fornecer os valores iniciais dos campos de temperatura e saturação para todos os nós da malha. Essa definição é mostrada na Figura A.5.

A seguir, todos os dados definidos até o momento são organizados dentro das estruturas conhecidas em GIBIANE como “tabelas”, como mostrado na Figura A.6, para possibilitar a passagem dos dados ao procedimento THCR.

Ao iniciar, o procedimento THCR faz uma série de verificações dos dados. Na falta de algum dado importante ele é preenchido por um valor definido como padrão ou então o programa exhibe uma mensagem de alerta. Apesar de ser uma parte importante para a segurança e certeza da correção do cálculo, esta verificação não faz parte do cálculo em si, e por isso serão omitidas as linhas referentes a ela neste apêndice.

```

1164 *-----
1165 *      Condições de contorno hídricas :
1166 *-----
1167
1168 blq_sat = BLOQ T haut ;
1169
1170 *-----
1171 *      Condições iniciais : temperatura e saturação
1172 *-----
1173
1174 *temperatura initial sur toute la surface du maillage
1175
1176 tini = MANU CHPO sur 1 'T' 24. ;
1177
1178 *95% de saturation sur toute la surface
1179 *à changer dans la roche
1180
1181
1182 sur_int = (CHAN POI1 (sur)) DIFF (CHAN POI1 (haut)) ;
1183 sur_int2 = (CHAN POI1 (sur_int)) DIFF (CHAN POI1 (SUR2));
1184
1185 sat0 = (MANU CHPO sur_int2 1 'T' 0.95 nature diffus) et
1186 (MANU CHPO haut 1 'T' 0.39 nature diffus) ET
1187 (MANU CHPO SUR2 1 'T' 0.70 NATURE DIFFUS);
1188

```

Figura A.5: Definição dos campos de temperatura inicial e saturação inicial

```

1189 *-----
1190 *      Appel a PASAPAS
1191 *-----
1192 * Calculs se font à chaque pas de 1000s et cela 1200 fois.
1193
1194 LTEMPS1 = PROG 0. PAS 10. (MAXI LTEMPS) ;
1195 LTEMPS2 = PROG 0. PAS 10. (MAXI LTEMPS) ;
1196
1197 tab1 = table ;
1198
1199 tab1.temperatures      = table ;
1200 tab1.temperatures.0    = tini ;
1201 tab1.modele            = modt1 ;
1202 tab1.chargement        = chat1 et fiul ;
1203 tab1.blocages_thermiques = tempimp ;
1204 tab1.precision         = 1.e-4 ;
1205
1206 tab1.hydr              = table ;
1207 tab1.hydr.satu         = table ;
1208 tab1.hydr.satu.0      = sat0 ;
1209 tab1.hydr.pvimpo       = vrai ;
1210 tab1.hydr.blocages     = blq_sat ;
1211 tab1.hydr.precision   = 1.e-4 ;
1212
1213 tab1.formulation1      = table ;
1214 tab1.formulation1      = beton ;
1215 tab1.formulation2      = table ;
1216 tab1.formulation2      = roche ;
1217
1218 tab1.temps_calcules    = LTEMPS1 ;
1219 tab1.temps_sauves      = LTEMPS2 ;
1220
1221 THCR tab1 ;
1222 ***

```

Figura A.6: Organização dos dados iniciais em tabelas e chamada ao procedimento THCR

A Figura A.7 mostra algumas definições importantes feitas no início do procedimento THCR: calores específicos dos materiais, inicialização dos contadores das iterações, extração da malha do modelo, cálculo da pressão de vapor saturante inicial e a quantidade de água evaporada inicial que é nula.

O laço **calincr** faz o incremento do passo de tempo. A Figura A.8 mostra esse incremento e o preenchimento da tabela de cálculo térmico, **therm**, com modelos, carregamento, condições de contorno e precisão para o critério de convergência.

A Figura A.9 mostra o preenchimento da tabela de cálculo hídrico, **satu**, com modelo,

```

1 eaulib = eauga - eauliee ;
2
3 cciment = 750. ;
4 cgran = 800. ;
5 croche = 674. ;
6 ceauliee = 3760. ;
7 ceaulib = 4184. ;
8 klini = 1.e-4 * kini ;
9 klinir = 1.e-4 * kinir ;
10 cond60 = cond20 - 0.5 ;
11 cond60r = cond20r - 0.5 ;
12 ci_b = (cciment * ciment) + (cgran * granu) ;
13 ci_r = (croche * massr) ;
14
15 *Inicialização de contadores
16
17 * niter = nbre d'itération max
18 * npicard = nbre d'itérations thermique-hydrique max
19
20 incr = 0 ;
21 niter = 500 ;
22 npicard = 10 ;
23
24 ppresu = 1 ;
25 nscr = 0 ;
26
27 SI (NON (EXISTE ETAB TEMPS)) ;
28 ETAB.TEMPS = table ;
29 ETAB.TEMPS.0 = 0. ;
30 FINSI ;
31
32 mail0 = EXTR ETAB.MODELE MAIL ;
33
34 tini = ETAB.'TEMPERATURES'. 0 ;
35
36 pvs0 = FVST tini ;
37 vapini = MANU CHPO mail0 1 T 0. ;

```

Figura A.7: Primeiras definições do procedimento THCR

```

38 -----
39 repeter calincr ((DIME ETAB.TEMPS_CALCULES) - 1) ;
40 -----
41
42 incr = incr + 1 ;
43 incrp = incr + 1 ;
44 tn0 = extr ETAB.TEMPS_CALCULES incr ;
45 tn1 = extr ETAB.TEMPS_CALCULES incrp ;
46 MESS 'Increment numero :' incr 'temps calcule :' tn1 ;
47 MESS ;
48 pascal = prog tn1 ;
49
50 * remplissage de la table de calcul thermique THERM
51
52 therm = table ;
53
54 mol = etab.MODELE ;
55 modt1 = EXTR mol FORM THERMIQUE ;
56 therm.'MODELE' = modt1 ;
57
58 SI (EXISTE mol FORM CONVECTION) ;
59 therm.'MOD_CONV' = EXTR mol FORM CONVECTION ;
60 therm.'MAT_CONV' = ETAB.CARACTERISTIQUES ;
61 FINSI ;
62
63 SI (EXISTE ETAB BLOCAGES_THERMIQUES) ;
64 therm.'BLOCAGES_THERMIQUES' = ETAB.'BLOCAGES_THERMIQUES' ;
65 FINSI ;
66
67 therm.'CHARGEMENT' = ETAB.'CHARGEMENT' ;
68 SI (EXISTE ETAB PRECISION) ;
69 therm.'CRITERE' = ETAB.'PRECISION' ;
70 SINON ;
71 therm.'CRITERE' = 1.e-5 ;
72 FINSI ;
73

```

Figura A.8: Início do laço que incrementa o tempo - tabela para cálculo térmico

condições de contorno e precisão para o critério de convergência.

O algoritmo de Picard se inicia para o tempo corrente englobando os cálculos térmicos e hídricos e verificando sua convergência através do método iterativo de Picard. A Figura

```

75 * remplissage de la table de calcul thermique SATU
76
77 satu = table ;
78
79 moh1 = ETAB.'MODELE' ;
80 modh = EXTR moh1 FORM THERMIQUE ;
81 satu.'MODELE' = modh ;
82
83 SI (EXISTE ETAB.HYDR MODCONV) ;
84 satu.'MOD_CONV' = ETAB.HYDR.MODCONV ;
85 satu.'MAT_CONV' = ETAB.HYDR.MATCONV ;
86 FINSI ;
87
88 SI (EXISTE (ETAB.'HYDR') 'BLOCAGES') ;
89 satu.'BLOCAGES_THERMIQUES' = ETAB.'HYDR'.'BLOCAGES' ;
90 FINSI ;
91
92 SI (EXISTE (ETAB.'HYDR') 'PRECISION') ;
93 satu.'CRITERE' = ETAB.HYDR.PRECISION ;
94 SINON ;
95 satu.'CRITERE' = 1.e-5 ;
96 FINSI ;
97

```

Figura A.9: Início do laço que incrementa o tempo - tabela para cálculo hídrico

A.10 mostra apenas o início do algoritmo com o incremento do contador de iterações e com a atualização dos campos de saturação e de água evaporada segundo o resultado do passo anterior.

```

98 *-----
99 * ALGORITHME DE PICARD
100 *-----
101
102 ipic = 0 ;
103 *
104 repeter boucpic npicard ;
105 *
106 ipic = ipic + 1 ;
107
108 si (> ipic 1) ;
109 t_pic1 = t_pic2 ;
110 s_pic1 = s_pic2 ;
111 finsi ;
112
113 *****
114 * CALCUL THERMIQUE
115 *****
116
117 * conditions initiales Picard
118
119 'SI' (ega ipic 1) ;
120 chsat = exco T satini ;
121 chvap = vapini ;
122 'SINON' ;
123 chsat = exco T (satu.'T1') ;
124 chvap = vapt ;
125 'FINSI' ;
126

```

Figura A.10: Início do laço que verifica a convergência dos resultados térmicos e hídricos

A Figura A.11 mostra o início do laço para cálculo térmico. É atualizado o campo de temperaturas segundo o passo anterior e é calculado o calor específico total segundo a Equação 4.7, para o concreto, e para a rocha desconsidera-se o termo da água quimicamente ligada. A Figura A.12 mostra o cálculo da condutividade térmica para o concreto e a rocha segundo as Equações 4.32, 4.33 e 4.34, que estão definidas pelos procedimentos **PCON-B** e **PCON-R**, respectivamente. Definidas as propriedades dos materiais, a tabela de cálculo térmico termina de ser preenchida e calcula-se as temperaturas chamando-

se o procedimento **TATHER**.

```

138 *-----
139 *           DEBUT CALCUL ITERATIF THERMIQUE
140 *-----
141 ither = 0 ;
142
143 REPETER theriter niter ;
144
145 ither = ither + 1 ;
146
147 si (neg ither 1) ;
148 chtemp = exco T (therm.'T1') ;
149 sinon ;
150 chtemp = exco T tini ;
151 finsi ;
152
153 testd = (chtemp - (EXCO T tini)) MASQ SUPERIEUR 0. ;
154
155 * Calcul de la chaleur spécifique (J/°C/m3)
156 cc1_b = MANU CHPO mail0 1 'SCAL' c1_b ;
157 cc1_r = MANU CHPO mail0 1 'SCAL' c1_r ;
158 * terme (mliee0 - md(T)) * Cliée
159 chliee0 = MANU CHPO mail0 1 'SCAL' eauliee ;
160 cc2_b = (chliee0 - massd) * ceauliee ;
161 * terme poro(T) * rhol(T) * Sl * Clibre
162 por = PORO massd ;
163 rhol = MVEL chtemp ;
164 cc3_b = por * rhol * chsat * ceaulib ;
165 cc3_r = poro0r * rhol * chsat * ceaulib ;
166 * chaleur latente de déshydratation Ceq = Ldes * dmd/dT * dT/dt (T)
167 cindes = 'NOMC' 'SCAL' (chtemp * edes) ;
168 chldes = latdes * cindes * testd ;
169 * chaleur spécifique totale (J/°C/m3)
170 cmat_b = ( cc1_b + cc2_b + cc3_b + chldes ) ;
171 cmat_r = ( cc1_r + cc3_r ) ;
172 cmat_br = ( cmat_b + cmat_r ) * 0.5 ;
173
174 cmat = (cmat_b * ch_unb) + (cmat_r * ch_unr) + (cmat_br * ch_unbr) ;
175 chctot = CHAN CHAM cmat therm.MODELE RIGIDITE MATERIAU ;
176

```

Figura A.11: Início do laço de cálculo térmico e cálculo do calor específico volumétrico total

```

177 * calcul de la conductivité thermique équivalente K = K(Sl,T)
178
179 ktot_b = PCON_B chtemp ;
180 ktot_r = PCON_R chtemp ;
181 ktot_br = ( ktot_b + ktot_r ) * 0.5 ;
182
183 ktot = (ktot_b * ch_unb) + (ktot_r * ch_unr) + (ktot_br * ch_unbr) ;
184 chktot = CHAN CHAM ktot therm.MODELE RIGIDITE MATERIAU ;
185
186 * nouvelles caracteristiques materiau
187
188 therm.MATERIAU = MATE therm.MODELE 'K' chktot 'RHO' 1. 'C' chctot ;
189
190 * CHARGEMENT TERME SOURCE DE VAPORISATION Lvap(T) * ul=>v
191
192 chlvp = LATV chtemp ;
193 chsvap = chvap * chlvp ;
194 sourvap = SOURCE modt1 chsvap ;
195
196 * stockage solution a l'itération précédente
197
198 si (ega ither 1) ;
199 ut1 = tini ;
200 sinon ;
201 ut1 = therm.'T1' ;
202 finsi ;
203
204 therm.'T0' = tini ;
205 therm.'T1' = tini ;
206 therm.'TEMPSO' = tn0 ;
207 therm.'SOURCE' = -1. * sourvap ;
208 therm.'CALCULS' = pascal ;
209
210 TATHER therm ;
211

```

Figura A.12: Cálculo das condutividades térmicas, definição do material do modelo térmico através do operador **MATE**, preenchimento da tabela de cálculo térmico e cálculo das temperaturas pelo procedimento **TATHER**

A Figura A.13 mostra o fim do laço **theriter** com a verificação da convergência dentro do laço e com o cálculo do parâmetro que posteriormente verificará a convergência dos resultados térmico e hídrico simultaneamente.

```

211
212 * critere de convergence
213
214 ut_bou = therm.'T1' ;
215 u_int = ut1 - ut_bou ;
216 u_abs = 'ABS' u_int ;
217 u_abs1 = 'EXCO' u_abs 'T' ;
218 cri2 = 'MAXI' u_abs ;
219
220 *mess 'CRITERE DE CONVERGENCE Thermique = ' cri2 ;
221
222 si (< cri2 therm.'CRITERE') ;
223 mess 'convergence calcul thermique en' ither 'iterations' ;
224 quitter theriter ;
225 finsi ;
226
227 si (ega ither niter) ;
228 'MESS' 'NON-CONVERGENCE THERMIQUE APRES' ither 'ITERATIONS' ;
229 'MESS' 'TEMPS =' TN1 ;
230 'QUITTER' THYD ;
231 finsi ;
232
233 *****
234 fin theriter ;
235 *****
236
237 * critère de convergence thermique PICARD
238
239 t_pic2 = therm.'T1' ;
240
241 si (> ipic 1) ;
242 t_pic = t_pic2 - t_pic1 ;
243 t_apic = 'ABS' t_pic ;
244 t_apic1 = 'EXCO' t_apic 'T' ;
245 tcripic = 'MAXI' t_apic1 ;
246 finsi ;

```

Figura A.13: Fim do laço térmico **theriter**

As linhas das Figuras A.14 e A.15 são a preparação para o cálculo hídrico, onde se vê o cálculo de algumas parcelas da Equação 4.31 e o cálculo da saturação nos limites de contorno para imposição da pressão de vapor constante.

Na Figura A.16 tem-se a atualização do campo saturação para início do cálculo iterativo hídrico, feito pela laço **hyditer**. A sequência de comandos faz o cálculo das demais parcelas da condutividade hídrica dada pela Equação 4.31, que finalmente é dada por **chmhyd**. **PERELB**, **PERELV**, **PEREVB** e **PEREVR** são os procedimentos que calculam as permeabilidades relativas de acordo com as Equações 4.38 e 4.39.

A Figura A.17 mostra a definição das propriedades hídricas dos materiais, a organização dos dados na tabela de cálculo hídrico **satu**, e a passagem dessa tabela para **TATHER** que faz o cálculo da saturação. Antes de finalizar o laço **hyditer**, ainda se faz a verificação da convergência do resultado hídrico.

Na Figura A.18 tem-se o cálculo da quantidade de água transformada em vapor (por evaporação e desidratação) e transferida por convecção.

Após a conclusão do laço hídrico, verifica-se por Picard a convergência dos resultados,

```

248 *-----
249 *   CALCUL HYDRIQUE
250 *-----
251 *   extraction du champ de température
252
253 chtemp = exco T (therm.'T1') ;
254
255 *   calcul du champ de capacité thermique (hydrique)
256
257 por = PORO massd ;
258 rho10 = MVEL (EXCO T tini) ;
259 rho1 = MVEL chtemp ;
260 rhov = MVEV chtemp ;
261 chpcapb = por * (rho1 - rhov + rho1 - rho10) ;
262 chpcapr = poro0r * (rho1 - rhov + rho1 - rho10) ;
263 chpcabr = ( chpcapb + chpcapr ) * 0.5 ;
264 chpcapa = (chpcapb * ch_unb) + (chpcapr * ch_unr) + (chpcabr * ch_unbr) ;
265 chmcapa = CHAN CHAM chpcapa modh RIGIDITE MATERIAU ;
266
267 ** conductivité (hydrique)équivalente liquide (kg/m/s)
268 ** modification pression capillaire   voir NT-SCCME081
269
270 chpvs = PVST chtemp ;
271 kint11 = PPERMLB massd ;
272 kint12 = PPERMLR ;
273 vliq = VISCL chtemp ;
274 chpdlr1 = rho1 * kint11 * (vliq **(-1.0)) * rho1 *
275 (rhov **(-1.0)) * chpvs ;
276 chpdlr2 = rho1 * kint12 * (vliq **(-1.0)) * rho1 *
277 (rhov **(-1.0)) * chpvs ;
278
279 ** conductivité équivalente gaz (kg/m/s)
280
281 kint1 = PPERMGB massd ;
282 kint2 = PPERMGR ;
283 vgz = VISCV chtemp ;
284 chpdvr1 = rhov * chpvs * kint1 / vgz ;
285 chpdvr2 = rhov * chpvs * kint2 / vgz ;

```

Figura A.14: Preparação para cálculo hídrico

```

286
287 *** conditions aux limites
288
289 *   pressions imposées aux limites (recalculées à chaque incrément)
290
291 SI ETAB.HYDR.PVIMPO ;
292 hlim = (ETAB.'HYDR'. 'SATU'. 0) * pvs0 * (chpvs ** (-1)) ;
293 mailb1 = EXTR etab.hydr.blocages MAIL ;
294 chpo0 = redu hlim mailb1 ;
295 tmax = extr ETAB.TEMPS_CALCULES (DIME ETAB.TEMPS_CALCULES) ;
296 evol0 = EVOL MANU (PROG 0. tmax) (PROG 1. 1.) ;
297 dep0 = DEPI ETAB.HYDR.BLOCAGES chpo0 ;
298 ETAB.HYDR.CHARGEMENT = CHAR TIMP dep0 evol0 ;
299 FINSI ;
300
301 *   2) terme source de déshydratation IntV( dm/dT * dT/dt)
302 *   calcul de dm/dT au pas de temps courant
303
304 incr0 = incr - 1 ;
305 temp0 = exco T (therm.'T0') ;
306 temp1 = exco T (therm.'T1') ;
307 deshyd = 'NOMC' 'SCAL' (temp1 * edes) ;
308 deltat = (temp1 - temp0) / (tn1 - tn0) ;
309 deltat = deltat * testd ;
310 sour1b = deshyd * deltat ;
311 sour1r = 0. * ch_unit ;
312 sour1br = ( sour1b + sour1r ) * 0.5 ;
313 sour1 = (sour1b * ch_unb) + (sour1r * ch_unr) + (sour1br * ch_unbr) ;
314
315 *   3) terme source lie a la variation de la masse volumique de l'eau
316 *   - poro * drhol * S1_n-1 / dt
317
318 sour2b = por * (rho10 - rho1) * (EXCO T satini) / (tn1 - tn0) ;
319 sour2r = poro0r * (rho10 - rho1) * (EXCO T satini) / (tn1 - tn0) ;
320 sour2br = ( sour2b + sour2r ) * 0.5 ;
321 sour2 = (sour2b * ch_unb) + (sour2r * ch_unr) + (sour2br * ch_unbr) ;
322
323 chasour = SOURCE modh ( sour1 + sour2 ) ;

```

Figura A.15: Preparação para cálculo hídrico - continuação

armazena-se os resultados, calcula-se a pressão de vapor, a pressão de água líquida, a pressão capilar e a perda de massa. Havendo convergência, finaliza-se uma iteração do

```

325 *****
326 *   DEBUT DU CALCUL ITERATIF HYDRIQUE
327 *****
328 ihyd = 0 ;
329 *****
330 repeter hyditer niter ;
331 *****
332
333 ihyd = ihyd + 1 ;
334
335 si (neg ihyd 1) ;
336 chsat = exco T (satu.'T1') ;
337 sinon ;
338 chsat = exco T satini ;
339 finsi ;
340
341 * calcul du champ de perméabilité relative au liquide
342 chpkrl1 = PERELB chsat ;
343 chpkrl2 = PERELR chsat ;
344
345 * calcul du champ de perméabilité relative au gaz
346 chpkrg1 = PEREVB chsat ;
347 chpkrg2 = PEREVR chsat ;
348
349 * calcul du champ dérivée de la courbe de saturation dh/dS1 = 1
350 * pour S1 = h
351 chpds1 = 1.0 ;
352
353 * calcul de la matrice de conductivité hydrique totale
354 chphymb = chpds1 * ((chpdlr1 * chpkrl1 * (chsat**(-1.0))) +
355 (chpdvr1 * chpkrg1)) ;
356 chphymr = chpds1 * ((chpdlr2 * chpkrl2 * (chsat**(-1.0))) +
357 (chpdvr2 * chpkrg2)) ;
358 chphymbr = ( chphymb + chphymr ) * 0.5 ;
359
360 chphymd = (chphymb * ch_unb) + (chphymr * ch_unr) + (chphymbr * ch_unbr);
361 chmhyd = CHAN CHAM chphymd modh RIGIDITE MATERIAU ;
362

```

Figura A.16: Início do laço do cálculo hídrico

```

363 * définition des propriétés matériau
364 satu.'MATERIAU' = MATE modh 'K' chmhyd 'C' chmcapa RHO 1.0 ;
365
366 * stockage solution à l'itération précédente
367 si (ega ihyd 1) ;
368 ut1 = 100. * (satini) ;
369 sinon ;
370 ut1 = 100. * (satu.'T1') ;
371 finsi ;
372
373 satu.'T0' = satini ;
374 satu.'T1' = satini ;
375 satu.'TEMPS0' = tn0 ;
376 satu.'SOURCE' = chasour ;
377 satu.'CALCULS' = pascal ;
378 satu.'CHARGEMENT' = ETAB.HYDR.CHARGEMENT ;
379
380 TATHER satu ;
381
382 * critère de convergence
383 ut_bou = 100.* (satu.'T1') ;
384 u_int = ut1 - ut_bou ;
385 u_abs = 'ABS' u_int ;
386 u_abs1 = 'EXCO' u_abs 'I' ;
387 cri2 = 'MAXI' u_abs ;
388
389 si (< cri2 satu.'CRITERE') ;
390 MESS 'convergence calcul hydrique en' ihyd 'iterations' ;
391 MESS ;
392 quitter hyditer ;
393 finsi ;
394
395 si (ega ihyd niter) ;
396 'MESS' 'NON-CONVERGENCE HIDRIQUE APRES' ihyd 'ITERATIONS' ;
397 'QUITTER' THYD ;
398 finsi ;
399 *****
400 fin hyditer ;
401 *****

```

Figura A.17: Cálculo da saturação e fim do laço do cálculo hídrico

laço que incrementa o tempo, **calincr**, como mostra a Figura A.19.

```

403 * critere de convergence hydrique PICARD
404
405 s_pic2 = 100. * (satu.'T1') ;
406
407 si (> ipic 1) ;
408 s_pic = s_pic2 - s_pic1 ;
409 s_apic = 'ABS' s_pic ;
410 s_apic1 = 'EXCO' s_apic 'T' ;
411 scripic = 'MAXI' s_apic1 ;
412 finsi ;
413
414 *****
415 * CALCUL QUANTITE D'EAU VAPORISEE, DESHYDRATEE *
416 * ET TRANSFEREE PAR CONVECTION DANS L'INCREMENT *
417 *****
418 * Fvap = Cp * (Sn-1 - Sn) - K1 * Sn * dt + dMd
419 * Terme K1*S1 (divJ1) en kg/m3 (convection)
420
421 chliqb = chpds1 * chpdlr1 * chpkrl1 * (chsat**(-1.0)) ;
422 chliqr = chpds1 * chpdlr2 * chpkrl2 * (chsat**(-1.0)) ;
423 chliqbr = ( chliqb + chliqr ) * 0.5 ;
424
425 chliq = (chliqb * ch_unb) + (chliqr * ch_unr) + (chliqbr * ch_unbr);
426 kls11 = chliq * (exco 'T' (satu.'T1')) ;
427 kls1 = kls11 * (tn0 - tn1) ;
428
429 * Terme Cp * (Sn-1 - Sn) en kg/m3
430 cps11 = chpcapa * (exco 'T' (satu.'T1')) ;
431 cps10 = chpcapa * (exco 'T' (satu.'T0')) ;
432 cps1 = cps10 - cps11 ;
433
434 * Terme dMd en kg/m3 (déshydratation)
435 dmd = sour1 * (tn1 - tn0) ;
436 massd = massd0 + dmd ;
437
438 * Fvap en kg/m3 et dFvap/dt en kg/m3/s (vapeur)
439
440 vap = cps1 + kls1 + dmd ;
441 vapt = vap / (tn1 - tn0) ;

```

Figura A.18: Cálculo da quantidade de água evaporada e transferida por convecção

```

442
443 * critere de convergence Picard
444
445 si (> ipic 1) ;
446 si (< tcripic 1.0e-3) ;
447 si (< scripic 1.0e-3) ;
448 mess 'convergence picard en ' ipic 'iterations';
449 MESS ;
450 quitter boucpic ;
451 finsi ;
452 finsi ;
453 finsi ;
454
455 -----
456 * FIN ALGORITHME DE PICARD
457 -----
458 *****
459 fin boucpic ;
460 *****
461
484 nsor = nsor + 1 ;
485 poroi = (por + poro0r) / 2 ;
486 poros = (POR * ch_unb) + (poroi * ch_unbr) + (poro0r * ch_unr) ;
487 (ETAB.TEMPS).nsor = tn1 ;
488 (ETAB.TEMPERATURES).nsor = THERM.'T1' ;
489 (ETAB.'HYDR'. 'SATU').nsor = SATU.'T1' ;
490 (ETAB.'POROSITE').NSOR = poros ;
491 (ETAB.'CONDUCTIVITE').NSOR = KTOT ;
492 (ETAB.'CHALEUR_SPEC').NSOR = CMAT ;
493
494 * Calcul de la pression de vapeur
495 chtemp = EXCO T therm.'T1' ;
496 hums = EXCO T satu.'T1' ;
497 pressvap = hums * chpvs ;
498
499 * Calcul de la pression d'eau liquide (chpl) et capillaire (chpcap)
500 testhum = hums MASQ 'INFERIEUR' 1.00000001 ;
501 testpl = hums MASQ 'SUPERIEUR' 0.99999999 ;
502 hums2 = (hums * testhum) + testpl ;
503 chpl = chpvs + (8.314 * rhol * chtemp * ('LOG' hums2) * 55.555) ;
504 chpcap = pressvap - chpl ;
505
506 * Perte de masse de l'éprouvette
507 wrel = cpsl + dmd ;
508 wcham = chan 'CHAM' wrel modh 'GRAVITE' ;
509 wincr = intg modh wcham 'SCAL' ;
510 wperte = wperte + wincr ;
511
512 (ETAB.'HYDR'. 'PVAPEUR').nsor = pressvap ;
513 (ETAB.'HYDR'. 'PLIQUIDE').nsor = chpl ;
514 (ETAB.'HYDR'. 'PCAPILLAIRE').nsor = chpcap ;
515 (ETAB.'HYDR'. 'PERTE_MASSE').nsor = wperte ;
516 (ETAB.'HYDR'. 'TENEUR_EAU').nsor = por * rhol * hums ;
517
522 tini = THERM.'T1' ;
523 satini = SATU.'T1' ;
524 vapini = vapt ;
525 massd0 = massd ;
526
527 *OPTI SAUV (CHAINE ftxt '.sauv') ;
528 *SAUV ;
529 *****
530 fin calincr ;
531 *****
532
533 'FINPROC' ETAB ;
534

```

Figura A.19: Fim do algoritmo de Picard e do laço de tempo

# APÊNDICE B - Equação de Clapeyron

Este apêndice mostra com maiores detalhes a dedução da equação que relaciona a pressão de água líquida e a pressão de vapor <sup>1</sup>. Para obtenção dessa equação, chamada Equação de Clapeyron, parte-se da primeira e da segunda leis da termodinâmica.

**1ª Lei da Termodinâmica.** “Para um sistema material, em uma evolução infinitamente lenta de um estado de equilíbrio homogêneo do sistema para outro, a variação da energia interna observada entre os estados é a soma do trabalho mecânico feito por forças externas no sistema e do fornecimento de calor externo.” — que também pode ser enunciada da seguinte maneira — “Supondo que uma parcela de fluido com massa unitária recebe uma certa quantidade de calor  $q$ . Como resultado, a parcela de fluido pode produzir um trabalho externo  $W$  e/ou armazenar energia interna.”



Figura B.1: Representação de um fluido confinado em um cilindro com pistão móvel que sofre variação de volume através da aplicação da força  $F$

O trabalho necessário para expandir ou comprimir uma amostra de fluido confinado em um cilindro com pistão móvel é dado pelo produto da força (pressão  $\times$  área) pela distância percorrida pelo pistão durante a aplicação da força (Figura B.1). Assim:

$$dW = pAdx = pdV. \quad (\text{B.1})$$

Para uma massa unitária, o volume pode ser substituído pelo volume específico do fluido  $\alpha = 1/\rho_f$ . Sendo assim, a 1ª lei da termodinâmica pode ser escrita da seguinte

<sup>1</sup>Este apêndice tem como referências DAL PONT (2004, [20]), COUSSY (2004, [36]) e WALLACE e HOBBS (2006, [43]).

forma:

$$de_f = -pd \left( \frac{1}{\rho_f} \right) + dq = -pd\alpha + dq, \quad (\text{B.2})$$

onde  $de_f$  é a variação infinitesimal da energia interna específica do fluido,  $p$  é a pressão externa sofrida pelo fluido,  $d\alpha$  é a variação infinitesimal do volume específico do fluido e  $dq$  é a porção infinitesimal de calor fornecido a uma massa unitária de fluido.

**2ª Lei da Termodinâmica.** *“Existe uma função chamada entropia tal que a variação de entropia de um sistema material em uma evolução infinitamente lenta de um estado de equilíbrio homogêneo para outro, é igual ao fornecimento externo de entropia. Ela existe em uma escala universal de temperatura absoluta e positiva tal que o fornecimento externo infinitesimal de entropia é definido como o fornecimento externo infinitesimal de calor dividido pela temperatura absoluta.”*

A entropia pode ser interpretada como uma estimativa quantitativa da desordem de um sistema, uma vez que o calor fornecido ao sistema faz a velocidade média de cada molécula aumentar. A entropia, para processos reversíveis, é então definida como:

$$ds_f = \frac{dq}{T}, \quad (\text{B.3})$$

onde  $s_f$  é a entropia específica do fluido,  $T$  é a temperatura absoluta e  $dq$  é a quantidade infinitesimal de calor fornecida ao volume específico (massa unitária) do fluido. Maiores explicações sobre processos reversíveis e irreversíveis e entropia podem ser encontradas na referência [43].

Combinando-se as Equações B.2 e B.3, o balanço de energia é dado pela seguinte equação:

$$de_f = -pd\alpha + Tds_f. \quad (\text{B.4})$$

O volume específico,  $\alpha = 1/\rho_f$ , e a entropia específica,  $s_f$ , são as variáveis de estado termodinâmicas da função  $e_f$ . Sendo assim:

$$e_f = e_f \left( \alpha = \frac{1}{\rho_f}, s_f \right) : \quad \frac{\partial e_f}{\partial \alpha} = -p \quad ; \quad \frac{\partial e_f}{\partial s_f} = T. \quad (\text{B.5})$$

As equações de estado B.5 podem ser parcialmente invertidas com relação as variáveis

conjugadas  $(1/\rho_f, -p)$  através da introdução da entalpia específica do fluido,  $h_f$ :

$$h_f = e_f + \frac{p}{\rho_f} = e_f + \alpha p, \quad (\text{B.6})$$

então as equações de estado tomam a seguinte forma:

$$h_f = h_f(p, s_f) : \quad \frac{\partial h_f}{\partial p} = \alpha \quad ; \quad \frac{\partial h_f}{\partial s_f} = T. \quad (\text{B.7})$$

Agora, invertendo-se parcialmente as Equações B.5 em relação às variáveis  $(s_f, T)$ , com a introdução da energia livre específica de Helmholtz, tem-se:

$$\psi_f = e_f - T s_f, \quad \text{e} \quad (\text{B.8})$$

$$\psi_f = \psi_f\left(\alpha = \frac{1}{\rho_f}, T\right) : \quad \frac{\partial \psi_f}{\partial \alpha} = -p \quad ; \quad \frac{\partial \psi_f}{\partial T} = -s_f. \quad (\text{B.9})$$

As Equações B.5 podem ser totalmente invertidas, com a introdução da entalpia livre específica,  $g_f$ :

$$g_f = \psi_f + p\alpha = h_f - T s_f, \quad (\text{B.10})$$

obtendo-se:

$$g_f = g_f(p, T) : \quad \frac{\partial g_f}{\partial p} = \alpha \quad ; \quad \frac{\partial g_f}{\partial T} = -s_f. \quad (\text{B.11})$$

## B.1 Gás perfeito

Em um processo em que calor é fornecido a uma massa unitária de fluido, cuja temperatura varia, mas cujo volume permanece constante, define-se calor específico a volume constante,  $c_v$ , como:

$$c_v = \left( \frac{dq}{dT} \right)_{V \text{ constante}}. \quad (\text{B.12})$$

Se o volume é constante, da Equação B.2 chega-se a:

$$de = dq, \quad (\text{B.13})$$

então:

$$c_V = \left( \frac{de}{dT} \right). \quad (\text{B.14})$$

Para um gás ideal, conforme a lei de Joule, a energia interna depende apenas da temperatura. Sendo assim, tem-se:

$$de = c_V dT. \quad (\text{B.15})$$

Através da equação de estado de um gás perfeito, dada pela equação seguinte:

$$p\alpha = RT, \quad (\text{B.16})$$

onde R é a constante universal dos gases perfeitos. Pode-se reescrever a Equação B.6 da entalpia específica como:

$$dh = de + dp\alpha = c_V dT + R dT. \quad (\text{B.17})$$

Pode-se também definir um calor específico a pressão constante da seguinte maneira:

$$c_P = \left( \frac{dq}{dT} \right)_{P \text{ constante}}. \quad (\text{B.18})$$

A partir da Equação B.14 a Equação B.2 pode ser reescrita como:

$$dq = c_V dT + p d\alpha \quad (\text{B.19})$$

ou ainda:

$$dq = c_V dT + d(p\alpha) - \alpha dp \quad (\text{B.20})$$

Da Equação B.16 tem-se que  $d(p\alpha) = R dT$ , e então:

$$dq = c_V dT + R dT - \alpha dp = (c_V + R) dT - \alpha dp \quad (\text{B.21})$$

Para pressão constante o último termo da Equação B.21 cai e temos:

$$c_P = c_V + R. \quad (\text{B.22})$$

Podemos reescrever a entalpia da Equação B.17 como:

$$dh = c_P dT, \quad (\text{B.23})$$

ou seja, a entalpia é função apenas da temperatura.

Da relação B.4 deriva a relação seguinte:

$$ds = \frac{de}{T} + \frac{pd\alpha}{T}, \quad (\text{B.24})$$

e então:

$$ds = \frac{c_V dT}{T} + \frac{pd\alpha}{T}, \quad (\text{B.25})$$

através da relação entre os calores específicos, Equação B.22, e a equação dos gases ideais, Equação B.16, tem-se:

$$ds = \frac{c_P dT}{T} - \frac{RdT}{T} + \frac{pd\alpha}{T} \quad (\text{B.26})$$

$$= \frac{c_P dT}{T} - \frac{\alpha dp}{T} \quad (\text{B.27})$$

$$= \frac{c_P dT}{T} - \frac{Rdp}{p} \quad (\text{B.28})$$

A partir da Equação B.28 pode-se escrever a entropia de um gás perfeito. Integrando-se a Equação B.28, entre um estado inicial (índice 0) e um estado genérico final (índice v), tem-se:

$$\int_{s_0}^{s_v} ds = c_P \int_{T_0}^T \frac{dT}{T} - R \int_{p_0}^{p_v} \frac{dp}{p} \quad (\text{B.29})$$

$$s_v(T, p_v) - s_0(T_0, p_0) = c_P \ln \frac{T}{T_0} - R \ln \frac{p_v}{p_0} \quad (\text{B.30})$$

$$s_v(T, p_v) = c_P \ln \frac{T}{T_0} - R \ln \frac{p_v}{p_0} + s_0(T_0, p_0). \quad (\text{B.31})$$

Pode-se, então, calcular a entalpia livre integrando-se a Equação B.10 e a usando-se

as definições das Equações B.23 e B.31:

$$g_v(T, p_v) = c_P(T - T_0) - c_P T \ln \frac{T}{T_0} + R T \ln \frac{p_v}{p_0} - s_0(T_0, p_0) T + h_0(T_0, p_0). \quad (\text{B.32})$$

## B.2 Líquido incompressível

Um líquido incompressível é aquele para o qual a variação de volume devido a uma variação de pressão é insignificante. Assim, o volume é função apenas da temperatura  $T$ , e supõe-se que:

$$\alpha(T) = \alpha(T_0) + k(T - T_0), \quad (\text{B.33})$$

sendo  $k$  uma constante que está relacionada à expansão volumétrica. Através das variáveis  $T$  e  $p$  pode-se reescrever a expressão que define trabalho, segundo definição dada anteriormente pela Equação B.1:

$$dW = p dV = p k dT. \quad (\text{B.34})$$

Podemos escrever o calor da seguinte forma:

$$dq = c(T, p) dT + l(T, p) dp, \quad (\text{B.35})$$

com  $c$  sendo o calor específico suposto função de  $T$  e  $p$ , e  $l$  uma função de  $T$  e  $p$  a ser determinada.

Pode-se reescrever a equação da energia interna para o líquido incompressível, Equação B.2, que é a soma do calor e do trabalho, como:

$$de = dq - p d\alpha = (c(T, p) - p k) dT + l(T, p) dp, \quad (\text{B.36})$$

e então:

$$\frac{\partial e}{\partial T} = c(T, p) - pk \quad (\text{B.37})$$

$$\frac{\partial e}{\partial p} = l(T, p). \quad (\text{B.38})$$

A definição da Equação B.35 permite determinar a entropia:

$$ds = \frac{dq}{T} = \frac{c(T, p)dT}{T} + \frac{l(T, p)dp}{T}, \quad (\text{B.39})$$

e então:

$$\frac{\partial s}{\partial T} = \frac{c(T, p)}{T} \quad (\text{B.40})$$

$$\frac{\partial s}{\partial p} = \frac{l(T, p)}{T}. \quad (\text{B.41})$$

Da Equação B.36 pode-se escrever:

$$\frac{\partial^2 e}{\partial T \partial p} = \frac{\partial c(T, p)}{\partial p} - k = \frac{\partial l(T, p)}{\partial T}, \quad (\text{B.42})$$

e da Equação B.39:

$$T \frac{\partial^2 s}{\partial T \partial p} = \frac{\partial c(T, p)}{\partial p} = \frac{\partial l(T, p)}{\partial T} - \frac{l(T, p)}{T}, \quad (\text{B.43})$$

e então pode-se escrever:

$$l(T, p) = -kT. \quad (\text{B.44})$$

Deduz-se que  $\partial c(T, p)/\partial p = 0$ , uma vez que o calor específico depende apenas de  $T$ , ou seja,  $c = c(T)$ .

A relação B.39 se torna:

$$ds = \frac{c(T)dT}{T} - kdp, \quad (\text{B.45})$$

e então:

$$\frac{\partial s}{\partial T} = \frac{c(T)}{T} \quad (\text{B.46})$$

$$\frac{\partial s}{\partial p} = -k. \quad (\text{B.47})$$

Para a água, medidas mostraram que se pode desprezar a dependência de  $c$  em relação a  $T$ . Assim, integrando-se a Equação B.45, escreve-se a entropia para a água líquida como:

$$\int_{s_0}^{s_l} ds = \int_{T_0}^T \frac{c}{T} dT - k \int_{p_0}^{p_l} dp \quad (\text{B.48})$$

$$s_l(T, p_l) = c \ln \frac{T}{T_0} - k(p_l - p_0) + s_0(T_0, p_0). \quad (\text{B.49})$$

Pode-se então calcular a expressão para a entalpia a partir de sua definição:

$$dh_l = de_l + d(p\alpha(T)) = de_l + pd(\alpha(T)) + \alpha(T)dp, \quad (\text{B.50})$$

assim, a partir das Equações B.34 e B.36, tem-se:

$$dh_l = cdT + (\alpha(T) - kT)dp. \quad (\text{B.51})$$

Em particular:

$$\frac{\partial h_l}{\partial T} = c \quad (\text{B.52})$$

$$\frac{\partial h_l}{\partial p} = \alpha(T) - kT. \quad (\text{B.53})$$

Pode-se escrever a expressão para a entalpia:

$$h_l(T, p) = c(T - T_0) + \alpha(T)(p - p_0) - kT(p - p_0) + h_0(T_0, p_0). \quad (\text{B.54})$$

A partir da definição de base escreve-se a entalpia livre:

$$g_l(T, p_l) = h_l - s_l T = c(T - T_0) + \alpha(T)(p_l - p_0) - cT \ln \frac{T}{T_0} - s_{l0}(T_0, p_0)T + h_{l0}(T_0, p_0). \quad (\text{B.55})$$

### B.3 Mudança de fase

Primeiramente, escolhe-se um estado de referência  $(T_0, p_0)$  idêntico para gás e líquido. Faz-se a hipótese de uma mudança de fase sem dissipação, então é possível igualar as variações de entalpia livre do gás perfeito e do líquido incompressível. É necessário, então, relacionar as entalpias  $g_{v0}(T_0, p_0)$  e  $g_{l0}(T_0, p_0)$  com o auxílio de uma experiência simples. Considerando-se um recipiente contendo uma parte de líquido e tendo o resto de seu volume preenchido por seu vapor puro. Supõe-se que este sistema está em equilíbrio à temperatura  $T_0$ . Se a superfície que separa líquido e vapor é plana, a pressão é a mesma no gás e no líquido. Esta pressão depende da temperatura e é denominada pressão de vapor saturante,  $p_{vs}$ .

Tomando-se as Equações B.32 e B.55 pode-se impor a igualdade das entalpias do líquido e do vapor na temperatura  $T_0$  e na pressão  $p_{vs}$ . As grandezas ligadas ao líquido recebem índice  $l$  e as grandezas ligadas ao gás recebem índice  $v$ :

$$g_l(T_0, p_{vs}(T_0)) = g_v(T_0, p_{vs}(T_0)) \quad (\text{B.56})$$

$$\alpha(T_0)(p_{vs} - p_0) + g_{l0}(T_0, p_0) = RT_0 \ln \frac{p_{vs}}{p_0} + g_{v0}(T_0, p_0). \quad (\text{B.57})$$

Pode-se exprimir  $g_{l0}(T_0, p_0)$  em função de  $g_{v0}(T_0, p_0)$ :

$$g_{l0}(T_0, p_0) = -\alpha(T_0)(p_{vs} - p_0) + RT_0 \ln \frac{p_{vs}}{p_0} + g_{v0}(T_0, p_0). \quad (\text{B.58})$$

E a Equação B.55 pode ser escrita como:

$$g_l(T, p_l) = cT - cT_0 + \alpha(T)(p_l - p_0) - cT \ln \frac{T}{T_0} - \alpha(T)(p_{vs} - p_0) + RT_0 \ln \frac{p_{vs}}{p_0} + g_{v0}(T_0, p_0). \quad (\text{B.59})$$

Considerando-se que não existe dissipação em uma mudança de fase líquido-vapor à temperatura  $T_0$  (ou seja,  $g_l(T_0, p_l) = g_v(T_0, p_v)$ ) para uma interface líquido-vapor não plana, obtém-se uma relação entre  $p_l$  e  $p_v$ :

$$\alpha(T_0)(p_l - p_{vs}) = RT \ln \frac{p_v}{p_{vs}(T_0)}. \quad (\text{B.60})$$

Enfim, escrevendo-se a relação acima em termos de massa, obtém-se a equação de Clapeyron generalizada, mostrada anteriormente no Capítulo 4.

$$p_l = p_{vs}(T_0) + \frac{\rho_l R T_0}{M_l} \ln \frac{p_v}{p_{vs}(T_0)}. \quad (\text{B.61})$$