

Entrega Final - Proyecto 1

Ahumada Abrigo, Isidora

e-mail: iahumada@miuandes.cl

Kamke Mardones, Benjamín Eduardo

e-mail: bekamke@miuandes.cl

Real Santis, Matías Guillermo

e-mail: mgreal@miuandes.cl

Silva Castán, Nicolás Eduardo

e-mail: nesilva@miuandes.cl

RESUMEN: *En este proyecto se estudió la difusión del calor en el cemento producto de la hidratación. Para esto se utilizó el lenguaje de programación Python el cual es muy útil para la modelación y simulación de este tipo de fenómenos. La situación que se modeló fue la de un bloque de hormigón rodeado de paredes aisladoras, de Poliestireno (Plumavit), el cual en su interior contenía nueve sensores ubicados en distintas posiciones, de manera de ir registrando la variación de temperatura en función del tiempo, en cada uno de ellos. Finalmente, los resultados de la simulación se compararon con los valores reales del experimento.*

Palabras claves: *hidratación, cemento, modelación, simulación.*

1. Introducción

El proceso de hidratación del cemento es una reacción química exotérmica, es decir, que se libera energía en forma de calor mientras la reacción permanezca activa. La cantidad de calor generado durante la hidratación del hormigón fresco afecta en gran medida el desarrollo de las propiedades mecánicas del material después del fraguado. A esto se debe porque el proceso de hidratación del concreto sea tan relevante para la ingeniería y, además, el tema principal de este proyecto.

La base fundamental de la generación de calor en el proceso de hidratación del cemento se debe a que, al estar en contacto con el agua, los productos de hidratación del cemento reaccionan, algunos más reactivos a generar calor que otros. Este proceso puede ser largo, si no se controla correctamente la hidratación, en caso de hormigones masivos podría demorar hasta 120 años.

En el siguiente *paper* el objetivo es estudiar la difusión calórica en un medio sólido usando simulaciones numéricas en diferencias finitas, es decir, comprender cómo funciona el proceso de generación calórica, el cual se produce durante la elaboración del cemento.

Para esto se utilizó el lenguaje de programación *Python* y se comenzó realizando simulaciones en una dimensión de manera de abarcar el problema de una forma más simplificada. Esto se realizó con el propósito de posteriormente extender el código a dos y luego tres dimensiones, para poder realizar una simulación similar a la real de la difusión de calor en el hormigón.

Con esto se estudió la variación de temperatura de 9 puntos diferentes en un cubo de hormigón, desde que el material se deposita hasta algunas horas luego del fraguado.

En lo que viene de este *paper* se detalla la descripción del modelo utilizado, parámetros y resultados obtenidos.

2. Descripción

El modelo utilizado se basó en la forma que se genera calor en la hidratación del cemento. Este producto aglutinante, al estar en contacto con el agua, sus productos cementicios reaccionan exotérmicamente, en su mayoría, los componentes del Clinker, como son los silicatos bicálcicos y tricálcicos, aluminatos tricálcicos, ferro aluminatos tetracálcicos, óxidos de magnesio, cal libre, y sulfatos de álcalis. Dependiendo de la composición del cemento, este será más o menos reactivo a la generación de calor, por ejemplo, si el material está compuesto de un mayor contenido de aluminatos tricálcicos, el proceso se verá visto con una mayor temperatura, mientras que, si el mayor componente son los silicatos bicálcicos, el calor generado será menor.

Dentro de este contexto, un término muy importante es la calorimetría la cual sirve para cuantificar el movimiento de la reacción de cemento y su sensibilidad a la temperatura. En la situación presente se pueden considerar cuatro tipos de calorimetrías (K. A. Riding, s.f.), para simular un caso tridimensional, las cuales son las siguientes:

1. Calor de solución
2. Calorimetría adiabática
3. Calorimetría semi-adiabática
4. Calorimetría isotérmica

El caso que se ha estudiado en clases considera un prisma rectangular de hormigón rodeado de paredes aisladas de Poliestireno (Plumavit), para el cual se debió modelar la variación de temperatura en distintos puntos dentro del cuerpo. Debido a sus características, se utilizó calorimetría del tipo semi-adiabática.

Este proyecto consistió en una serie de entregas, donde se modeló en *Python* los cambios de temperatura en el hormigón a través del tiempo. Se comenzó con un modelo de una dimensión, para luego seguir en dos y tres dimensiones.

En el primer modelo, se simulaban 10 casos distintos, para los cuales se fueron cambiando las condiciones de borde y el tipo medio sólido. La *Ecuación 2.1*, describe la ecuación diferencial parcial de la evolución de la temperatura por difusión de calor en un medio sólido:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{k}{c\rho} \nabla^2 u = q(t) \text{ Ecuación 2.1}$$

Donde $\partial u / \partial t$ es la variación de la temperatura en función del tiempo, k es la conductividad térmica, c es el calor específico, ρ es la densidad del material y $q(t)$ es una función de calor.

Para poder representar esta ecuación de una forma numérica se recurrió a la siguiente formulación:

$$u_i^{k+1} = q(t_k)\partial t + u_i^k + \frac{K\partial t}{c\rho\partial x^2}(u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k) \quad \text{Ecuación 2.2}$$

De esta forma, se puede representar el fenómeno en diferencias finitas. Para esto se debieron crear las condiciones de borde correspondientes. En cada entrega se tuvieron que hacer diferentes condiciones.

2.1. Modelación Unidimensional

En el modelo unidimensional se consideró una barra, en el cual se debió analizar y modelar la variación de temperatura a través del tiempo. En este caso se consideraron diferentes parámetros para diferentes medios sólidos, también condiciones de borde como distintas temperaturas iniciales y finales. Uno de los resultados obtenidos en esta modelación fue el *Gráfico 2.1.1*. En el cual se muestra, que cada curva es un tiempo diferente. El eje x representa el largo de una barra de hierro de largo 1.0 (adimensional), y el eje y la temperatura. A modo de ejemplo, la curva de color azul con mayor pendiente es el primer momento, mientras que la curva con menor pronunciación es al final de la simulación.

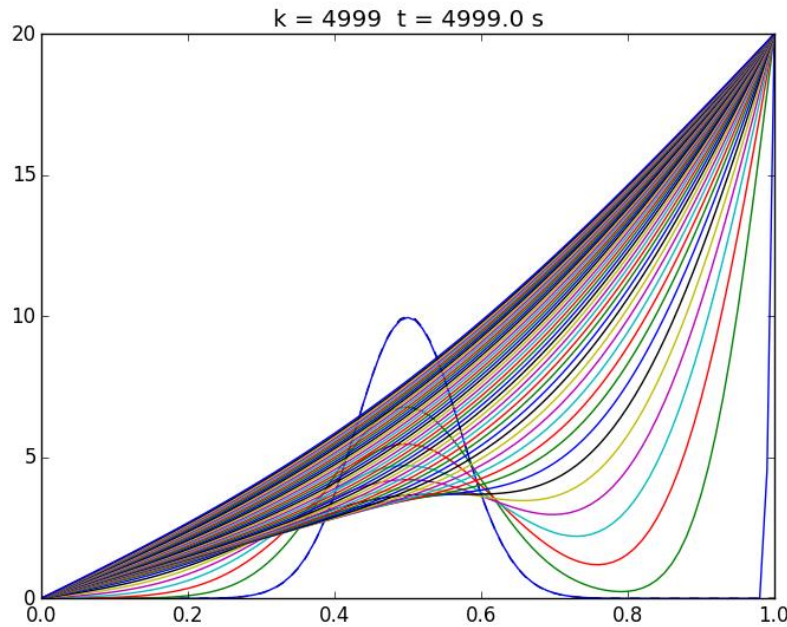


Gráfico 2.1.1: Simulación unidimensional para barra de hierro

2.2. Modelo Bidimensional

En el modelo bidimensional se consideró un campo de temperaturas para un medio sólido, en el cual sus bordes laterales e inferior no difunden calor, y el extremo superior tiene la temperatura ambiente de ese instante. Para modelar la temperatura ambiente se utilizó la *Ecuación 2.2.1*. (Lozano, s.f.)

$$u(x, a, t) = B + A \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{24_{hr}} \cdot t\right) \quad \text{Ecuación 2.2.1}$$

Donde: $A = \frac{T_{max} - T_{min}}{2}$ $B = \frac{T_{max} + T_{min}}{2}$

Entonces, para la modelación de la temperatura ambiente se utilizó la siguiente expresión:

$$(x, a, t) = 20 + 10 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{24_{hr}} \cdot t\right) \quad \text{Ecuación 2.2.2}$$

Los resultados que se obtuvieron se pueden observar en la *Imagen 2.2.1*, en la cual se muestra un conjunto de gráficos, donde cada uno es para un determinado tiempo, los colores más cálidos significan una mayor temperatura, mientras que los más fríos una menor temperatura.

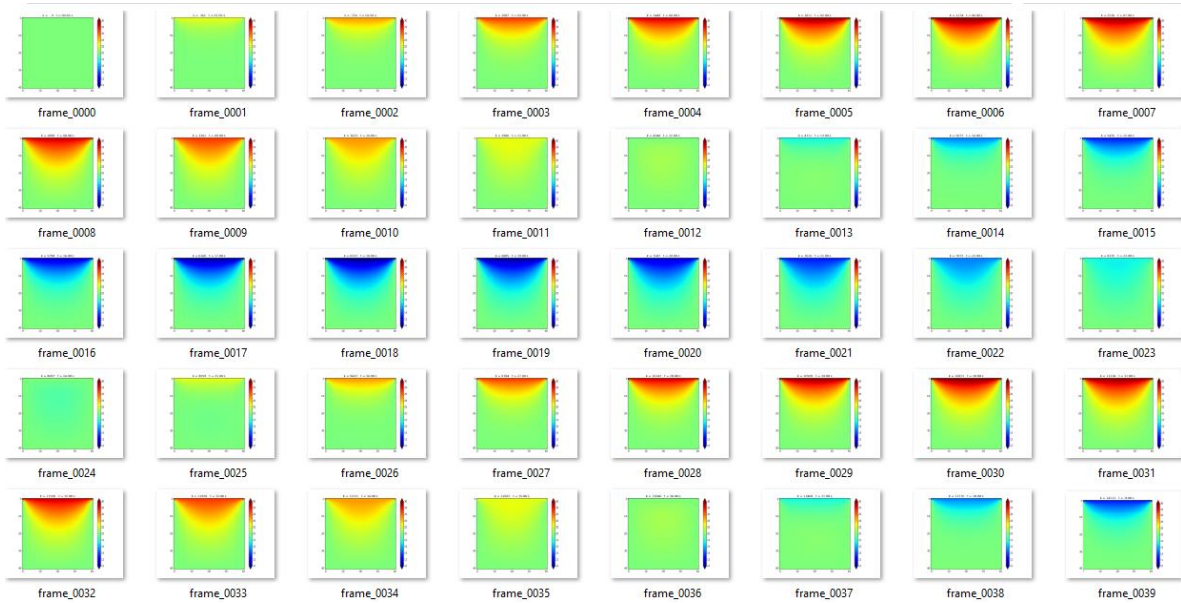


Imagen 2.2.1: Conjunto de gráficos para modelo bidimensional

2.3. Modelo Tridimensional

En el modelo tridimensional se consideró un bloque de Hormigón H30, con sus parámetros respectivos:

Conductividad térmica: $K = 9.5 \text{ m}^2/\text{s}$

Calor específico: $c = 950 \text{ J/kgC}$

Densidad: $\rho = 2400 \text{ kg/m}^3$

Para esto, se consideraron 9 puntos correspondientes a sensores térmicos, los cuales estaban ubicados según la *Imagen 2.3.1*.

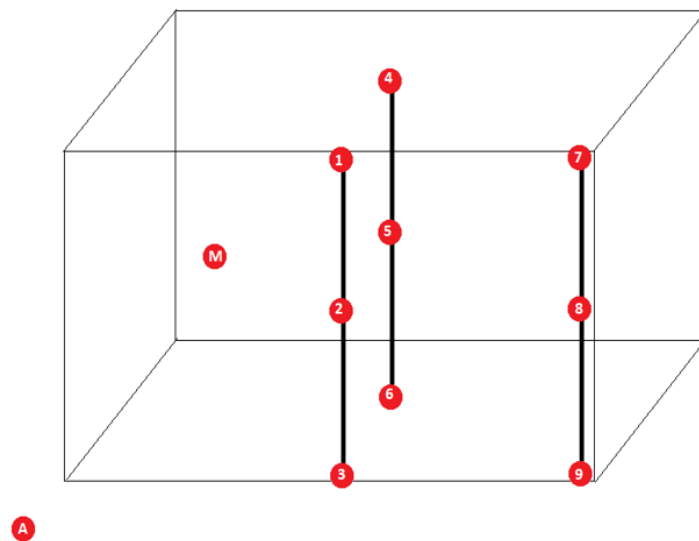


Imagen 2.3.1: Ubicación de los sensores térmicos

2.3.1. Modelo Tridimensional [Entrega 6]

El modelo tridimensional, en primera instancia, se consideró de calorimetría adiabática, debido a que se intuyó que todas las caras estaban cubiertas de poliestireno. Por lo que se modeló que todos sus puntos, menos las caras, generaban calor según la *Ecuación 2.2.2*, y se propusieron condiciones de borde en que las caras estaban a la temperatura inicial de 20.75°C todo el tiempo, la cual es la temperatura inicial del hormigón fresco. El *Gráfico 2.3.1* representa la variación de temperatura en el tiempo, donde cada curva representa un sensor térmico.

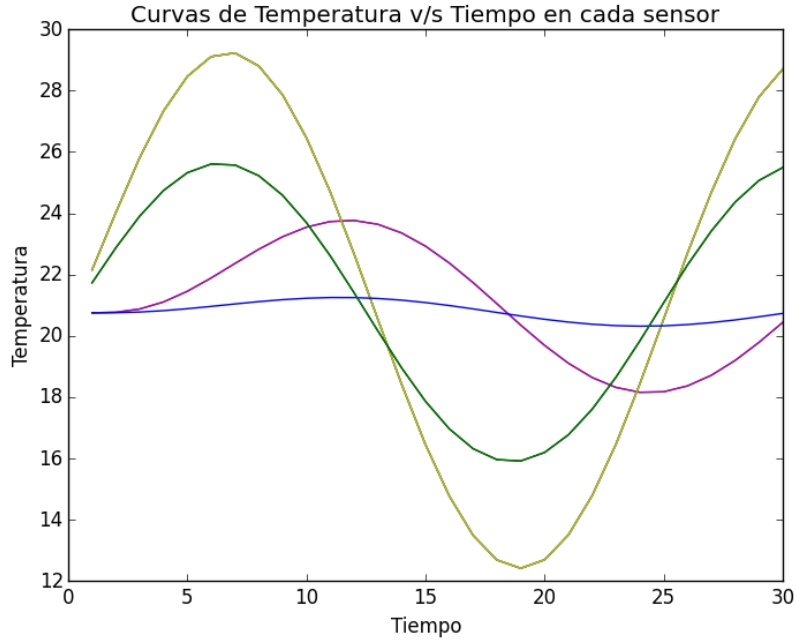


Gráfico 2.3.1: Simulación tridimensional entrega 6

2.3.2. Modelo Tridimensional [Entrega Final]

El modelo tridimensional final se consideró de calorimetría semi-adiabática, en donde todos sus puntos, menos las caras, generaban calor según la *Ecuación 2.3.1*.

$$Q_h(t) = H_u C_c \left(\frac{\tau}{t_e} \right)^\beta \left(\frac{\beta}{t_e} \right) \alpha_u \exp \left(- \left(\frac{\tau}{t_e} \right)^\beta \right) \exp \left(\frac{E}{R} \left(\frac{1}{273 + T_r} - \frac{1}{273 + T_c} \right) \right) \quad \text{Ecuación 2.3.1}$$

Donde:

$$H_u = H_{cem} p_{cem} + 461 p_{slag} + h_{FA} p_{FA} \quad \text{Ecuación 2.3.2}$$

$$H_{cem} = 500 p_{C_3S} + 260 p_{C_2S} + 866 p_{C_3A} + 420 p_{C_4AF} + 624 p_{SO_3} + 1186 p_{FreeCa} + 850 p_{MgO} \quad \text{Ecuación 2.3.3}$$

Para la cual se consideraron los siguientes parámetros¹:

$C_3S = 197.12$	$C_2S = 56.72$	$C_3A = 15.4$	$C_4AF = 28.13$
$SO_3 = 11.$	$CaO = 198.$	$MgO = 8.$	$p_{cem} = 0.25$
$p_{slag} = 0.$	$h_{FA} = 1800.$	$p_{FA} = 0.$	$\beta = 0.98$
$\tau = 9.8$	$h_h = 9.8,$	$H_u \alpha_u = 358.963$	$E = 27.096$
$R = 8.314$			

Debido a que la generación del calor producto de la hidratación del cemento es en todos sus puntos, la *Ecuación 2.3.1* se colocó en todo el campo tridimensional menos en las caras de los extremos del bloque. Se sostuvo que por tener aislamiento en todas sus caras menos la superior, la difusión térmica en ellas era nula, mientras que, en su cara superior, se presentó la condición de borde en la cual, ese extremo tomaba la temperatura ambiente de cada instante de tiempo. Para ello, se extrajeron los datos del archivo “*Temperatura Camara Curado.csv*” de SAF. De esta forma, para cada iteración del código, este tomaba una temperatura ambiente diferente. El *Gráfico 2.3.2* representa la variación de temperatura en grados Celsius en el tiempo (horas), donde cada curva representa un sensor térmico.

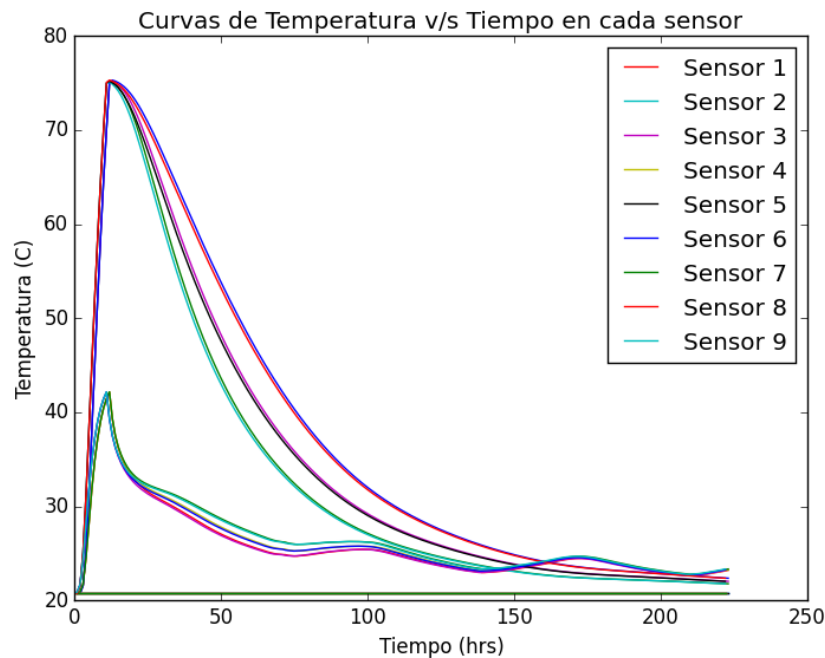


Gráfico 2.3.2: Simulación tridimensional entrega final

2.3.3. Código Entrega Final

Se definen las dimensiones del bloque de cemento:

```
a = 1.          #Ancho del dominio
b = 1.          #Largo del dominio
c = 1.          #Profundidad del dominio
Nx = 20         #Numero de intervalos en x
Ny = 20         #Numero de intervalos en Y
Nz = 20         #Numero de intervalos en Z
dy = a / Ny     #Discretizacion espacial en Y
dx = b / Nx     #Discretizacion espacial en X
dz = c / Nz     #Discretizacion espacial en Z
h = dx          # = dy
```


Se abre el archivo de temperaturas ambiente:

```
archivo = open('TemperaturaAmbiente.txt','r')
TempAmbiente = []
for linea in archivo.readlines():
    TempAmbiente.append(float(linea))
```

Se crea una matriz primaria con la temperatura del hormigón fresco:

```
u_k = TempAmbiente[0]*ones((Nx+1,Ny+1,Nz+1), dtype=double)
u_km1 = TempAmbiente[0]*ones((Nx+1,Ny+1,Nz+1), dtype=double)
```

Se crea una función de generación de calor por la hidratación del cemento:

```
def Q(t):
    C3S,C2S,C3A,C4AF,S03,CaO,MgO,pcem,pslag,hfa,pfa,betha,thau,hh,Huau,E,R=
    197.12,56.72,15.4,28.13,11.,198.,8.,0.25,0.,1800.,0.,0.98,9.8,9.8,358.963,27
    .096,8.314
    Ht = 500.*C3S + 260.*C2S + 866.*C3A + 420.*C4AF + 624.*S03 + 1186.*CaO +
    850.*MgO #Calor de hidratacion
    Hu = Ht*pcem + 461.*pslag + hfa*pfa #Calor total de hidratacion al 100%
    Return Hu*1140.*(thau/t)**betha*(betha/t)*0.7*exp(-(thau/t)**betha)
*exp((E/R)*(1./(273.+66.)-1./ (273.+20.75)))*10**-7
```

Con un ciclo *for* se recorren las matrices, para cada iteración, el tiempo es distinto, por lo tanto, su temperatura:

```
for k in range(int(32*(200./dt))): #se imprimen 200 pares ordenados de puntos
    t = dt*(k+1)
    print "k = ", k, " t = ", t
    #CB esencial
    u_k[:, -1, :] = TempAmbiente[k]
    if k % 15 == 0:
        ListaSensor1.append(u_k[10, 0, 10])
        ListaSensor2.append(u_k[10, 10, 10])
        ListaSensor3.append(u_k[10, 19, 10])
        ListaSensor4.append(u_k[10, 0, 19])
        ListaSensor5.append(u_k[10, 10, 19])
        ListaSensor6.append(u_k[10, 19, 19])
        ListaSensor7.append(u_k[19, 0, 19])
        ListaSensor8.append(u_k[19, 10, 19])
        ListaSensor9.append(u_k[19, 19, 19])
    #Loop en el espacio i = 1 ... n-1 u_km1[0] = 0 u_km1[n] = 20
    for i in range(1,Nx):
        for j in range(1,Ny):
            for l in range(1,Nz):
                #Algoritmo de diferencias finitas 3-D para difusion
                #Laplaciano
```

```

        nabla_u_k = (u_k[i-1,j,l] + u_k[i+1,j,l] + u_k[i,j-1,l] +
                    u_k[i,j+1,l] + u_k[i,j,l-1] + u_k[i,j,l+1] - 6*u_k[i,j,l])/h**2

    if t < 10:
        u_km1[i,j,l] = u_k[i,j,l] + alpha*nabla_u_k + Q(t)
    else:
        u_km1[i,j,l] = u_k[i,j,l] + alpha*nabla_u_k

#CB natural
u_km1[Nx,:,:] = u_km1[Nx-1,:,:]
u_km1[:,Ny,:] = u_km1[:,Ny-1,:]
u_km1[:, :, Nz] = u_km1[:, :, Nz-1]
#Avanzar la solucion a k + 1
u_k = u_km1
#CB esencial una ultima vez
u_k[:, -1, :] = TempAmbiente[k] #Por cada iteracion recorre +1 en la lista
print "Tmax = ", u_k.max()

```

Luego con las funciones de *pyplot* se grafican las curvas para cada sensor.

3. Resultados

El objetivo, tal como se mencionó en la introducción, es que los resultados obtenidos en la Entrega 6 y Entrega Final fueran similares al *Gráfico 3.1*, el cual representa la variación de la temperatura en el tiempo en un experimento real elaborado por un alumno del académico Álvaro Paul de la Universidad de los Andes.

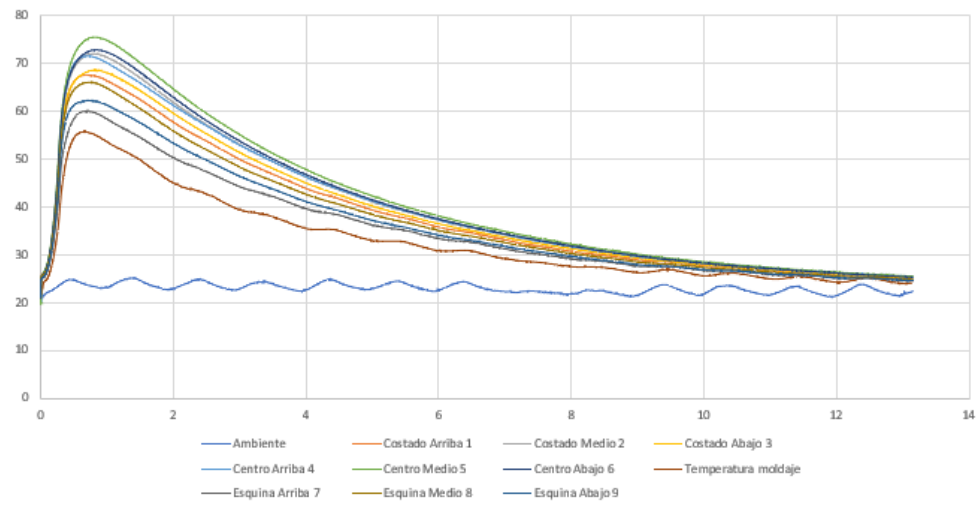


Gráfico 3.1: Experimento académico Álvaro Paul

Observando los *Gráficos 3.1* y 2.3.2, se puede apreciar que tanto en el gráfico presentado por el profesor Álvaro Paul como en el presentado en este *paper* (ambos casos tridimensionales) la temperatura medida por los sensores al comienzo corresponde a la de un hormigón fresco (20,75°C).

Respecto al *Gráfico 2.3.2* se puede observar cómo comienza a aumentar la temperatura a medida que pasa el tiempo, alcanzando la mayor temperatura aproximadamente a las 10 horas luego de comenzar la simulación, la cual fue obtenida en el sensor ubicado en el centro del prisma de hormigón (sensor 2) y el cual registró una temperatura de 75.3°C. Esto es lógico ya que en el centro del prisma es el lugar con menos pérdidas, no así el caso de los extremos debido a que, a pesar de estar aislados con plumavit, no se elimina por completo la interacción con el exterior.

Debido a la condición de pérdidas en los extremos, por la inalcanzable aislación completa del prisma, los sensores ubicados en estas posiciones registraron temperaturas mucho menores a las registradas en el centro, alcanzando temperaturas cercanas a los 42°C (aproximadamente 30°C de diferencia con las medidas en el centro).

Otro aspecto que cabe destacar es que las curvas del gráfico luego de alcanzar su máximo comienzan a decaer hasta que al final de la simulación todos los sensores alcanzan temperaturas entre los 21 y 25°C (acercándose a la temperatura ambiente).

4. Discusión

Como se puede observar en el *Gráfico 2.3.1*, el cual fue realizado para la Entrega 6, la temperatura va fluctuando a lo largo del tiempo para los diferentes puntos. Se puede ver como cada una de las curvas son sinusoidales. Esto se aleja de la realidad, ya que si se compara con el *Gráfico 3.1*, el que representa el experimento realizado por el profesor Álvaro Paul, se logra apreciar que una vez que se alcanza la temperatura máxima en cierto punto, luego comienza a disminuir, similarmente al *Gráfico 2.3.2* de la Entrega Final.

Para que los resultados entregados por la simulación fueran más acertados, se tuvo que realizar correcciones en el código de *Python*.

Para esto, específicamente se corrigió la forma en que se generaba el calor dentro del bloque de hormigón. En la Entrega 6, erróneamente, se sostuvo que había generación de calor en todo el campo de temperaturas en base a la *Ecuación 2.2.2*, fórmula que tiene como término una función periódica, como lo es el $\sin(x)$, debido a esto, al tener una constante como lo es 20°C, y un coeficiente como lo es el 10°C, el $\sin(x)$ al tener un recorrido de -1 a 1, los mínimos y máximos que esta ecuación podía tomar es de 10°C a 30°C. Además de que esta ecuación era la de la temperatura ambiente, lo que no tiene nada que ver con la generación calórica de la hidratación del cemento. Debido a eso, en el *Gráfico 2.3.1* se pueden ver curvas sinusoidales.

En cambio, para la Entrega Final, se corrigió lo anterior, en este caso se suprimió utilizar la *Ecuación 2.2.2*, y se utilizaron las temperaturas del ambiente reales desde el archivo "*Temperatura Camara Curado.csv*" de SAF. De esta forma, se pudo trabajar con datos similares al experimento real. Por otro lado, la generación de calor se cambió a la de la *Ecuación 2.3.1*, la cual, en esta ocasión sí representa la generación de calor producto de la hidratación del cemento. Debido a que esta fórmula no tiene términos periódicos, las curvas

se pueden ver que no son sinusoidales, y se asemejan mucho más al *Gráfico 3.1* del experimento real.

5. Conclusión

Se cumplieron los objetivos propuestos, los cuales eran comprender el fenómeno de generación de calor en la hidratación del cemento. Para esto se comenzó simulando desde lo más básico como lo es un modelo unidimensional para finalmente lograr simular una modelación tridimensional, la cual tiene mayor complejidad por todas las configuraciones en el espacio que esta pueda tener.

También se aprendió acerca de los diferentes tipos de calorimetrías que existen, especialmente de la semi-adiabática, ya que fue la utilizada para modelar la variación de temperatura de acuerdo a las condiciones que se debían simular.

Por otro lado, se entendió la importancia del proceso de hidratación del cemento como la base fundamental de la generación del calor. Al estar en contacto con el agua, el cemento va hidratándose formando productos de hidratación, los cuales se forman desde a superficie de cemento hacia los espacios libres que deja el agua, formando un sólido. Las temperaturas ambientales que están presentes en este proceso deben ser registradas o controladas mediante sensores, en este caso.

Los productos de hidratación finalmente son los que le entregan las propiedades fundamentales a la mezcla de cemento, debido a que algunos generan más o menos calor, y tienen una hidratación más rápida o a largo plazo.

Lo que se puede concluir es que, estudiar fenómenos como el de la difusión de calor o cualquier otro no es una tarea sencilla, ya que se debe entender profundamente el fenómeno en cuestión y además se deben tomar en cuenta todos los factores que puedan afectar los resultados de cualquier tipo de ensayo que se quiera realizar.

6. Referencias

1. K. A. Riding, J. V. K. B. C. L. A. S. A. Z. a. C. C. F., s.f. Methodology Comparison for Concrete Adiabatic. *ACI MATERIALS JOURNAL*.
2. Lozano, J., s.f. Propuesta metodológica para la optimización del cemento. En: s.l.:s.n.