MODELAGEM MICROMECÂNICA APLICADA AO ESTUDO DE ARGAMASSAS DE REVESTIMENTO

Tema: Tecnologia dos materiais
Grupo[1]: 2

TULIO HONORIO[1]

[1]Prof. Dr., Laboratoire de Mécanique et Technologie, École Normale Supérieure Paris-Saclay, Département de Génie Civil, Université Paris-Saclay, France, tulio.honorio-de-faria@ens-paris-saclay.fr

RESUMO

Técnicas de homogeneização são utilizadas para modelar as propriedades elásticas e térmicas de argamassas de revestimento a partir de suas composições. As estimativas são obtidas em função do tempo a fim de descrever a evolução dessas propriedades desde as primeiras idades. Uma abordagem simplificada é empregada para modelar o efeito da cura e/ou secagem como inibidores/geradores de um gradiente de microestrutura ou de propriedade no revestimento. Esses resultados representam um avanço na compreensão do comportamento multifísico de revestimentos de argamassa assim como dos efeitos de gradientes de propriedades na performance de materiais à base de cimento.

Palavras-chave: homogeneização, propriedades elásticas, propriedades térmicas, primeiras idades, gradientes de microestrutura.

MICROMECHANICS APPLIED TO THE STUDY OF RENDERING MORTARS

ABSTRACT

Homogenization techniques are used to estimate elastic and thermal effective properties of rendering mortars from their composition. The estimates are obtained as a function of time in order to describe the early age evolution of properties. A simplified approach is used to model the effects of cure and/or drying as microstructure (or property) gradient inducers. These results go towards a better understanding of the multiphysics behavior of rendering mortars as well as the effects of property gradients in the performance of cement-based materials.

Key-words: homogenization, elastic properties, thermal properties, early age, microstructure gradient.

[1] **Grupo 1:** Oriundos de teses, dissertações e relatórios finais de projetos de pesquisa; ou **Grupo 2:** oriundos de disciplinas de pós graduação, iniciação científica, trabalhos de conclusão de curso (TCC), pesquisas aplicadas e outros.

1. INTRODUÇÃO

A micromecânica é o estudo dos comportamentos mecânico, térmico, eletromagnético e de transporte dos materiais com uma microestrutura. Num material com microestrutura é possível identificar heterogeneidades devidas à presença de diferentes fases ou às morfologias específicas associadas a um tipo de fase. A partir de técnicas de homogeneização é possível estimar as propriedades efetivas desses materiais com uma microestrutura levando em consideração a (i) composição do material (em termos de fases presentes e suas frações de volume) e (ii) a morfologia da microestrutura de maneira simplificada. A técnica de homogeneização tem sido amplamente empregada para estimar diferentes propriedades físicas de materiais à base de cimento[(1)–(5)]. Nesse trabalho, essas técnicas são utilizadas para estimar as propriedades elásticas e térmicas de argamassas de revestimento à partir de suas composições. As estimativas são obtidas em função do tempo a fim de descrever a evolução dessas propriedades desde as primeiras idades. Uma abordagem simplificada é empregada para modelar o efeito da cura e/ou secagem como inibidores/geradores de um gradiente de microestrutura ou de propriedade no revestimento. Esses resultados representam um avanço na compreensão do comportamento multifísico de revestimentos de argamassa assim como dos efeitos de gradientes de propriedades na performance de materiais à base de cimento.

2. MODELOS E MÉTODOS

2.1. Estimativas de propriedades elásticas, condutividade térmica e capacidade térmica

Constantes elásticas. No caso de uma morfologia matriz/inclusão de um material micro- e macro-isotrópico com inclusão esféricas distribuídas aleatoriamente num Volume Elementar Representativo, a estimativas de Mori-Tanaka referente aos módulos de compressibilidade K^{MT} e de cisalhamento G^{MT} efetivos de um material com $n+1$ fases, são[(1)]:

$$\frac{K^{MT}-K_0}{K^{MT}+\frac{4}{3}G_0}=\sum_{r=1}^{n}\phi_r\frac{K_r-K_0}{K_r+\frac{4}{3}G_0} \qquad \frac{G^{MT}-G_0}{G^{MT}+H_0}=\sum_{i=1}^{n}\phi_r\frac{G_r-G_0}{G_r+H_0} \qquad (1)$$

onde o índice 0 se refere à matriz; ϕ_r, K_r e G_r são a fração de volume, módulo de compressibilidade e módulo de cisalhamento da fase r; e $H_0=G_0\left(\frac{3}{2}K_0+\frac{4}{3}G_0\right)/(K_0+2G_0)$. O módulo de elasticidade e o coeficiente de Poisson podem calculados usando $E=9KG/(3K+G)$ e $\upsilon=(3K-2G)/[2(3K+G)]$, respectivamente.

Condutividade térmica e Difusividade. No mesmo contexto, a estimativas de Mori-Tanaka da condutividade térmica efetiva de um material com N fases (de condutividade λ_r) é [(6)]:

$$\frac{\lambda^{MT}-\lambda_0}{\lambda^{MT}+2\lambda_0}=\sum_{r=1}^{n}\phi_r\frac{\lambda_r-\lambda_0}{\lambda_r+2\lambda_0} \quad (2)$$

A mesma formula pode ser usada para estimar a difusividade D^{MT} e permitividade ϵ^{MT} efetivas de compósitos.

Capacidade térmica. Sendo uma relação entre grandezas extensivas, a capacidade térmica de uma material com $n+1$ fases é dada por uma "regra de mistura" simples :

$$C^{eff}=\sum_{r=0}^{n+1}\phi_r C_r \quad (3)$$

2.2. Modelagem simplificada da hidratação e assemblagem de fases

Um dos modelos mais simples[7] de assemblagem de fases e de cinética de hidratação é usado para descrever a evolução das frações de volume de todas as fases presentes no sistema em função da relação agua/cimento (a/c em massa) inicial e das variações da quantidade de água disponível no sistema. A Figura 1 mostra a evolução das frações de volume das fases para um sistema com a/c inicial de 0.4 e 0.2.

No contexto da modelagem multi-escala do materiais à base de cimento, em geral a escala da pasta de cimento (nível 1) é separada da escala da argamassa (nível 2) e do concreto propriamente dito (nível 3) [1]. Na escala da pasta, a composição é definida em função das frações de minerais do clinker, produtos de hidratação e quantidade de água. Na Figura 1, a fração de água corresponde à porosidade capilar já que os poros do gel são considerados separadamente e a porosidade interlamelar dos C-S-H já está incluída nas propriedades efetivas dos mesmos. O C-S-H de baixa densidade (LD) é considerado como matriz, e as outras fases como inclusões.

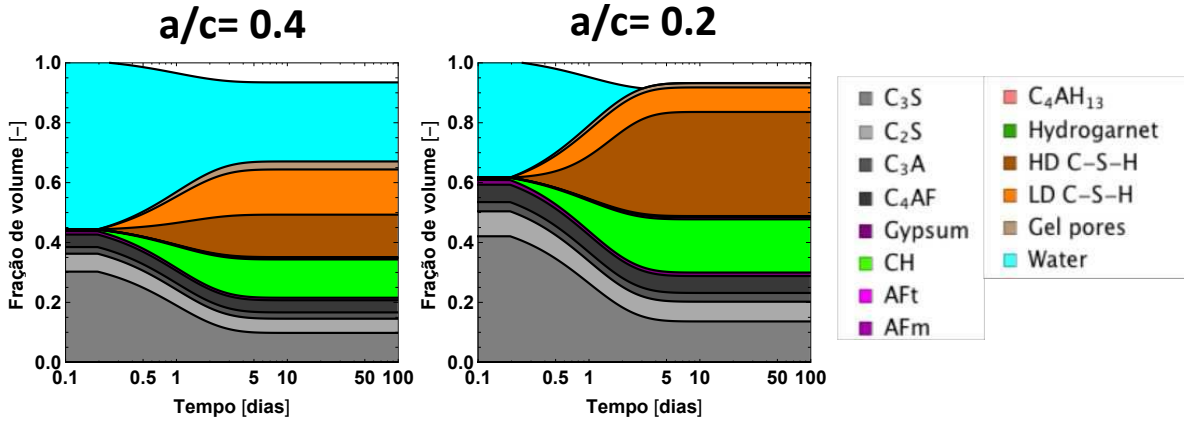


Figura 1 – Evolução das frações de volume das fases para um sistema com a/c inicial de 0.4 e 0.2

A escala da argamassa é constituída de uma matriz de pasta de cimento, cuja propriedades efetivas são obtidas por homogeneização no nível 1, e inclusões de grãos de areia. Nesse trabalho, a zona de transição não é considerada. Uma fração de volume de 40% é adotada para a areia.

As propriedades das fases constituintes da pasta de cimento e da argamassa são mostradas na Tabela 1.

Tabela 1 – Propriedades das fases constituintes de acordo com diferentes referências[1,2,8]. * Valores assumidos à partir das propriedades de fases com composição semelhante[2]

Fase	E [GPa]	υ [-]	λ [W/(m.K)]	D [10^{-11} m^2/s]	C [J/(Kg.K)]
Clinker	140	0.3	1.55	0	750
C-S-H LD	21.7	0.24	0.978	0	950
C-S-H HD	29.4	0.24	0.978	0	950
CH	38	0.305	1.32	0	1150
AFt	22.4	0.25	0.978*	0	1502
AFm	42.3	0.324	0.978*	0	1114.8
Hydrogarnet	22.4	0.25	0.978*	0	1121
C_4AH_{13}	25	0.25	0.978*	0	1121*
Gesso	45.7	0.33	0.66	0	1080.4
Areia	74.5	0.2	3.15	0	845
Porosidade capilar	0	0.5	0.608	220	4183
Porosidade do gel	2.18	0.5	0.608	20	1129

3. RESULTADOS

A Figura 2 mostra as propriedades efetivas estimadas nas escalas da pasta de cimento e da argamassa em função do tempo. Como esperado, e de forma consistente com as evidencias experimentais, o material (i) ganha em rigidez (aumento do módulo de elasticidade) com o tempo; (ii) apresenta uma diminuição na sua difusividade já que a porosidade capilar diminui; (iii) apresenta uma diminuição na sua capacidade calorifica já que a água (que possui um capacidade calorifica elevada) é consumida nos processos de hidratação do cimento; e (iv) apresenta uma condutividade térmica que varia pouco com o tempo já que o contraste entre

as condutividade térmicas das fases presentes no sistema não é pronunciado. Essas observações são aplicáveis à ambas as escalas consideradas.

Com relação à influência do fator a/c, que controla a porosidade do sistema, como esperado a estimativas do modulo de elasticidade são mais elevadas para os menores a/c (i.e. menor porosidade no sistema). Essa menor porosidade se traduz numa difusividade menos elevada para materiais com menor a/c.

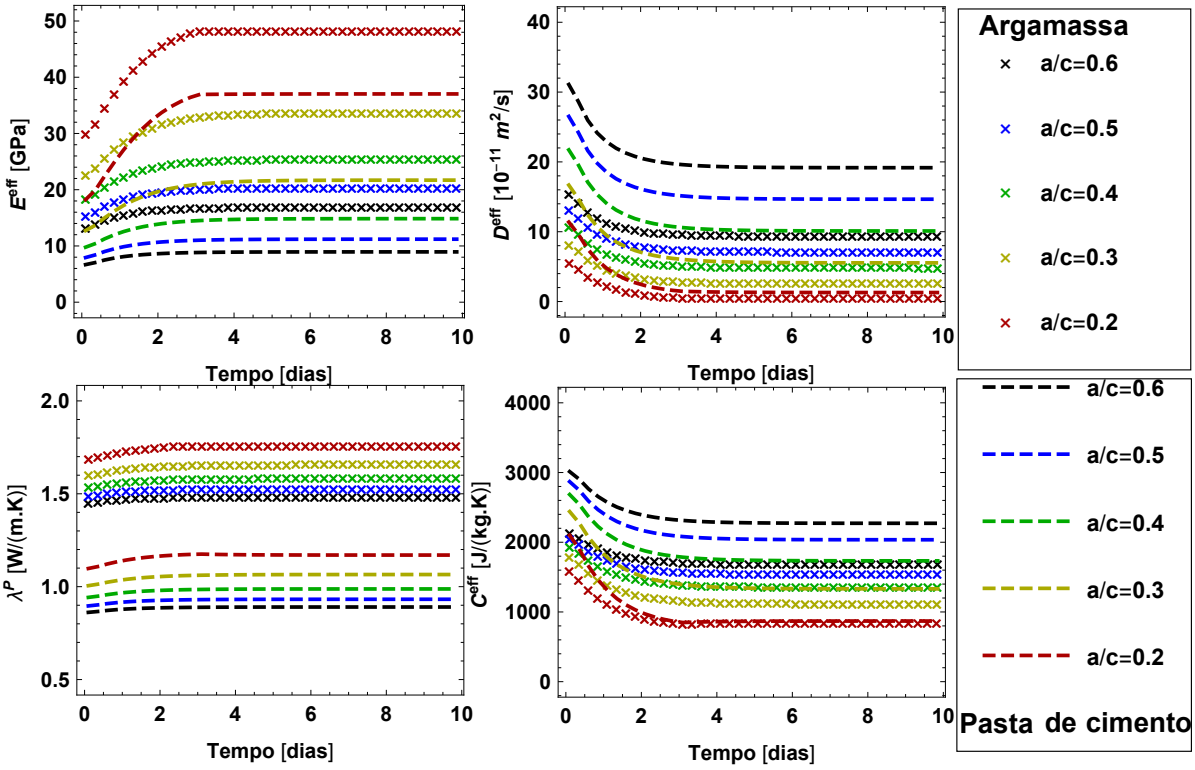


Figura 2 – Propriedades efetivas: modulo de elasticidade E^{eff}, condutividade térmica λ^{eff}, capacidade térmica C^{eff} e difusividade D^{eff} nas escalas da pasta de cimento (linhas) e da argamassa (símbolos).

4. CONCLUSÃO: IMPLICAÇÕES PARA A SECAGEM DE REVESTIMENTOS

A modelagem multi-escala proposta neste trabalho indica a existência de gradiente de propriedades em revestimentos que passam por secagem. O processo de secagem diminui a relação a/c localmente o que se traduz num gradiente de propriedades à partir da superfície que se seca. Esse gradiente segue o front de difusão estabelecido no material.

O transporte de massa num meio poroso pode ser descrito por uma equação diferencial parcial de difusão[9], de forma que a quantidade de água $c(x,t)$ num certa posição x medida

à partir da superfície que se seca e num tempo t é função da grandeza $x^2/(4Dt)$, que sugere que um tempo de cerca de uma dezena de horas para que o front de difusão afete a quantidade de água à uma distancia de 1 cm da superfície que seca num material com a difusividade de 10^{-11} m^2/s. Para um material que experimenta secagem na sua superfície (no qual a cura não é feita), a difusividade ira diminuir na proximidade de superfície evitando assim a propagação do front de difusão (e maiores perdas de agua nas camadas mais afastadas da superfície). A diminuição da difusividade é acompanha de aumento da rigidez do material. O mesmo raciocínio pode ser aplicado à um substrato com grande absorção.

As perspectivas desse trabalho incluem a consideração da zona de transição na escala da argamassa e a quantificação das incertezas associadas à composição do sistema, propriedades das fases e à microestrutura do material. Ampla campanha de validação dos resultados de modelagem com relação à resultados experimentais da literatura, para diferentes formulações de argamassa, está prevista.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. HONORIO, T.; BARY, B.; BENBOUDJEMA, F. Estimation of Elastic Properties of Cement based Materials at Early Age based on a Combined Numerical and Analytical Multiscale Micromechanics Approach. RILEM International Symposium on Concrete Modelling. **Anais**... In: CONMOD14. Beijing, China: out. 2014

2. HONORIO, T.; BARY, B.; BENBOUDJEMA, F. Multiscale estimation of ageing viscoelastic properties of cement-based materials: A combined analytical and numerical approach to estimate the behaviour at early age. **Cement and Concrete Research**, v. 85, p. 137–155, jul. 2016.

3. HONORIO, T.; BARY, B.; BENBOUDJEMA, F. Thermal properties of cement-based materials: Multiscale estimations at early-age. **Cement and Concrete Composites**, v. 87, p. 205–219, mar. 2018.

4. HONORIO, T.; BROCHARD, L.; BARY, B. Statistical variability of mechanical fields in thermo-poro-elasticity: Multiscale analytical estimations applied to cement-based materials at early-age. **Cement and Concrete Research**, v. 110, p. 24–41, 1 ago. 2018.

5. WYRZYKOWSKI, M.; SANAHUJA, J.; CHARPIN, L.; KÖNIGSBERGER, M.; HELLMICH, C.; PICHLER, B.; VALENTINI, L.; HONÓRIO, T.; SMILAUER, V.; HAJKOVA, K.; YE, G.; GAO, P.; DUNANT, C.; HILAIRE, A.; BISHNOI, S.; AZENHA, M.; Numerical benchmark campaign of COST Action TU1404 – microstructural modelling, **RILEM Technical Letters**, v. 2, p. 99–107, dec. 2017.

6. TORQUATO, S. **Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties**. [s.l.] Springer Science & Business Media, 2002.

7. TENNIS, P. D.; JENNINGS, H. M. A model for two types of calcium silicate hydrate in the microstructure of Portland cement pastes. **Cement and Concrete Research**, v. 30, p. 855–863, 2000.

8. STORA, E.; BARY, B.; HE, Q.-C. On Estimating the Effective Diffusive Properties of Hardened Cement Pastes. **Transport in Porous Media**, v. 73, n. 3, p. 279–295, 1 jul. 2008.

9. SAMSON, E. et al. Modeling ion and fluid transport in unsaturated cement systems in isothermal conditions. **Cement and Concrete Research**, v. 35, n. 1, p. 141–153, 1 jan. 2005.