

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E  
ENGENHARIA DE MATERIAIS**

**AVALIAÇÃO DOS MODELOS NUMÉRICOS PARA A SIMULAÇÃO DA  
SECAGEM DE CONCRETOS REFRAATÓRIOS**

Murilo Henrique Moreira

São Carlos  
2021



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E**  
**ENGENHARIA DE MATERIAIS**

**AVALIAÇÃO DOS MODELOS NUMÉRICOS PARA A SIMULAÇÃO DA**  
**SECAGEM DE CONCRETOS REFRAATÓRIOS**

Murilo Henrique Moreira

Dissertação apresentada ao  
Programa de Pós-Graduação em Ciência  
e Engenharia de Materiais como requisito  
parcial à obtenção do título de MESTRE EM  
CIÊNCIA E ENGENHARIA DE MATERIAIS

Orientador: Prof. Dr. Victor Carlos Pandolfelli

Coorientador: Profa. Dra. Ana Paula da Luz

Agência Financiadora: CNPq - Processo: 132342/2020-0

São Carlos

2021



## **VITAE DO CANDIDATO**

Bacharel em Engenharia de Materiais pela UFSCar (2019).





## UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais

---

### Folha de Aprovação

---

Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Murilo Henrique Moreira, realizada em 25/02/2021.

#### Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Victor Carlos Pandolfelli (UFSCar)

Prof. Dr. Dereck Nills Ferreira Muche (UFSCar)

Prof. Dr. Ricardo Afonso Angélico (USP)

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

O Relatório de Defesa assinado pelos membros da Comissão Julgadora encontra-se arquivado junto ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais.



## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, Margaret e Luiz, por todo o ensino, responsabilidade e disciplina essenciais para alcançar meus objetivos, ao carinho e amizade, e também a minha irmã, Juliana, por sempre ser um modelo de como perseverar e se superar. À minha companheira e melhor amiga Mariana, pelo suporte, atenção e ajuda em todos os momentos.

Agradeço ao Departamento de Engenharia de Materiais, pela qualidade de ensino e inspiração que tantos professores reconhecidos proporcionaram.

Ao Prof. Pandolfelli pela orientação cuidadosa ao longo de 7 anos de valiosa interação, quem sempre auxiliou e me ajudou para as melhores tomadas de decisão, sendo um verdadeiro mentor e proporcionando crescimento profissional e pessoal, estando sempre disponível para ajudar, e que acima de tudo me mostrou a beleza da Engenharia de Materiais.

Agradeço especialmente à minha coorientadora, Profa. Ana Paula, por todos os ensinamentos e auxílio no entendimento da parte experimental, além das importantes ideias e grande amizade.

Agradeço também a todos os colegas e amigos do Grupo de Engenharia de Microestrutura de Materiais, pelo suporte e parceria nas pessoas do Mestre Matheus Santos e do Mestrando Túlio Mumić Cunha e todos colegas que tornaram o dia a dia sempre mais amistoso.

A todos os habilidosos modeladores e grandes amigos, os Professores Ricardo Afonso Angélico, Roberto Federico Ausas e Stefano Dal Pont, que me ensinaram desde o básico até os assuntos mais avançados referentes aos modelos numéricos utilizados no presente trabalho. Traduziram a complexidade em beleza e me inspiram a algum dia alcançar o mesmo domínio de tais ferramentas.

E aos meus amigos e colegas de Departamento, com os quais compartilho grandes memórias, Rodrigo, Murilo e tantos outros ao longo do caminho. Por fim, um agradecimento especial a Doutora Mariana Bráulio, que abriu as portas do GEMM, e tem sido um grande modelo de dedicação e profissionalismo.

Agradeço também à banca de qualificação cujas observações e sugestões auxiliaram a execução do projeto, propuseram questionamentos pertinentes e

aprimoraram a qualidade do texto do projeto de mestrado que serviu como base para a presente dissertação.

Um último agradecimento especial cabe a todos os anônimos que doaram seu tempo direta ou indiretamente, seja desenvolvendo os softwares *open source* usados neste presente mestrado, ou sanando as dúvidas de desconhecidos na plataforma Stack Overflow, verdadeiros tutores sem identidade, que resolveram incontáveis percalços ao longo deste projeto e salvaram preciosas horas.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior -Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Este trabalho também teve financiamento do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – Brasil (CNPq), Processo 132342/2020-0, durante o período de Março de 2020 à Fevereiro de 2021.

## RESUMO

A secagem de refratários monolíticos a base de ligantes hidráulicos é a etapa mais lenta do seu processo de aplicação. Problemas no controle de tal procedimento resultam em trincas, lascamentos e até, em casos extremos, explosões de todo o revestimento, o que afeta a operação adequada dos equipamentos industriais. A fim de reduzir o tempo de parada durante sua instalação ou manutenção, é necessário otimizar tal processo. Como os riscos associados são de elevada gravidade, os usuários de refratários no ambiente industrial adotam práticas exageradamente conservadoras, pautadas por conhecimento semi-empírico. Nesse contexto, o presente trabalho teve como objetivo revisar a literatura, identificar os principais modelos numéricos, compará-los e selecionar aquele mais adequado para esta determinada aplicação. Esta avaliação sistêmica se deu tanto analiticamente quanto a partir de resultados de simulações de cada modelo em comparação a experimentos reais. Dado o amplo número de trabalhos encontrados durante o processo de revisão bibliográfica, também foi proposto um estudo bibliométrico deste campo do conhecimento. O conjunto de informações coletadas e analisadas indicaram que a aplicação mais comum de tais modelos é na simulação de incêndios em estruturas de cimento Portland. Como consequência, a interação com tais pesquisadores é altamente recomendada. Também foi encontrado que é possível categorizar tais modelos entre àqueles com apelo prático e os com detalhada representação dos múltiplos processos físicos que ocorrem em tais cenários, sendo a principal distinção entre esses a sua complexidade. Por fim, o modelo monofásico apresentou a melhor compatibilidade com as aplicações tecnológicas e assim se estudou sua convergência numérica e a sensibilidade dos principais parâmetros de entrada. Baseado nestes resultados, foi proposto e validado com dados experimentais um modelo monofásico meso-escala de elementos mistos com características inéditas na literatura.

**Palavras-chave:** Refratários; Método dos Elementos Finitos; Secagem; Concretos; Monolíticos



## ABSTRACT

### DEVELOPMENT OF NUMERICAL MODELS FOR THE SIMULATION OF THE DRYING OF REFRACTORY CASTABLES

The drying of hydraulic bonded monolithic refractories is the slowest stage of their application process. Problems related to the control of such a procedure result in cracks, spalling and even, in extreme cases, explosions of the entire lining, and consequently of the industrial equipment. In order to reduce the downtime required during the first heat-up step, an optimization of the drying process is necessary. As the risks involved are considerable, the industry adopts overconservative practices, usually guided by semi-empirical knowledge. In this context, the present work aimed to review the literature, identify the main numerical models, compare them and select the most suitable for this application. This systemic evaluation took place both analytically and by simulating the results for each model comparing them with actual practical experiments. Given the high number of works found during the literature review process, a bibliometric study of this field of knowledge was also proposed. The set of information collected and analyzed indicated that the most common application of such models is for the simulation of Portland cement structures under fire. As a direct consequence, interaction with such researchers is highly recommended. It was also realized that these models could be categorized as those with practical appeal and those with detailed representation of the multiple physical processes that occur in such scenarios, with the main distinguishable difference between such classes being their complexity. Finally, the single-phase model represented the best compatibility with the technological applications and thus its numerical convergence was studied and the sensitivity of the main input parameters was determined. Based on that, the development of a single-phase mesoscale mixed element model was proposed and validated with experimental results, which shows features not yet found in the literature.

**Keywords:** Refractories; Finite Element Method; Drying; Castable; Monolithic



## PUBLICAÇÕES

### Trabalhos publicados em revistas internacionais:

V. S. Pinto, D. S. Fini, V. C. Miguel, V. C. Pandolfelli, M. H. MOREIRA, T. Venancio, A. P. Luz. Fast drying of high-alumina MgO-bonded refractory castables, *Ceramics International* 46 (8), 11137-11148. 2020.

D. S. Fini, V. C. Miguel, V. S. Pinto, V. C. Pandolfelli, M. H. MOREIRA, A. P. Luz. Aluminum lactate role in improving hydration and drying behavior of MgO-bonded refractory castables, *Ceramics International* 46 (10), 17093-17102. 2020.

M. H. MOREIRA, R. F. Ausas, S. Dal Pont, P. I. Pelissari, A. P. Luz, V. C. Pandolfelli. Towards a single-phase mixed formulation of refractory castables and structural concrete at high temperatures, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Aceito. 2020.

M. H. MOREIRA, S. Dal Pont, T. M. Cunha, A. P. Luz, C. Parr, V. C. Pandolfelli. Physical phenomena, numerical models and main trends on the simulation of the drying behavior of refractory castables, *Journal of European Ceramic Society*. Submetido. 2021.

M. H. MOREIRA, S. Dal Pont, R. F. Ausas, T. M. Cunha, A. P. Luz, V. C. Pandolfelli. Direct comparison of multi and single-phase models for refractory castables drying, *Ceramics International*. Submetido. 2021.



## SUMÁRIO

FOLHA DE APROVAÇÃO . . . . .	i
AGRADECIMENTOS . . . . .	iii
RESUMO . . . . .	v
ABSTRACT . . . . .	vii
PUBLICAÇÕES . . . . .	ix
SUMÁRIO . . . . .	xi
ÍNDICE DE TABELAS . . . . .	xv
ÍNDICE DE FIGURAS . . . . .	xvii
LISTA DE SÍMBOLOS . . . . .	xxiii
1 INTRODUÇÃO . . . . .	1
2 OBJETIVO . . . . .	7
2.1 OBJETIVOS GERAIS . . . . .	7
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS . . . . .	7
3 REVISÃO DA LITERATURA . . . . .	9
3.1 Aquecimento Inicial e Secagem de Refratários Monolíticos . . . . .	9
3.2 Fenômenos Físicos Envolvidos . . . . .	12
3.3 Modelos Numéricos . . . . .	17
3.3.1 Modelo de Luikov . . . . .	21
3.3.2 Modelo de Bažant . . . . .	24
3.3.3 Modelo de Tenchev . . . . .	27
3.3.4 Modelos de Gawin e de Dal Pont . . . . .	31

3.3.5	Síntese dos Modelos . . . . .	36
3.4	<i>Datamining</i> da Bibliografia . . . . .	38
4	MATERIAIS E MÉTODOS . . . . .	41
4.1	Modelos Numéricos . . . . .	41
4.1.1	Equações de Conservação . . . . .	41
4.1.2	Método dos Elementos Finitos . . . . .	42
4.1.3	Métodos de aproximação de funções . . . . .	44
4.1.4	Construção da Aproximação . . . . .	45
4.1.5	Funções de forma . . . . .	48
4.1.6	Malha . . . . .	49
4.1.7	Forma variacional . . . . .	51
4.1.8	Formulação com Elementos Mistos . . . . .	55
4.2	Equações Constitutivas, Condições Iniciais e de Contorno de Gong	57
4.3	Equações Constitutivas, Condições Iniciais e de Contorno de Fey .	61
4.4	Equações Constitutivas, Condições Iniciais e de Contorno de Dal Pont . . . . .	64
4.5	Visualização dos Resultados . . . . .	67
4.6	<i>Data Mining</i> . . . . .	68
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO . . . . .	71
5.1	<i>Datamining</i> da bibliografia . . . . .	71
5.2	Análise Crítica dos Modelos Matemáticos . . . . .	79
5.3	<i>Benchmark</i> dos Modelos com os Trabalhos Originais . . . . .	84
5.3.1	Trabalho de Gong . . . . .	84
5.3.2	Trabalho de Fey . . . . .	87
5.3.3	Trabalho de Dal Pont . . . . .	89
5.4	Comparação Direta Entre os Modelos com Resultados Experimen- tais . . . . .	90
5.4.1	Ensaio PTM . . . . .	90
5.4.2	Tomografia de Nêutrons . . . . .	95
5.5	Convergência Numérica do Modelo de Gong . . . . .	102

5.6	Análise de Sensibilidade do Modelo de Gong . . . . .	106
5.7	Simulação de Fibras Poliméricas Utilizando Elementos Mistos . . .	111
6	CONCLUSÕES . . . . .	119
7	SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS . . . . .	121
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .	123



## ÍNDICE DE TABELAS

4.1	Parâmetros utilizados no benchmark de Gong et al. [79], equações constitutivas, condições iniciais e de contorno. . . . .	57
4.2	Coeficientes usados para a interpolação da água de desidratação $w_d$ , i.e. Equação 4.13. . . . .	60
4.3	Condições de contorno dos 4 casos apresentados propostos por Gong et al. [79]. . . . .	60
5.1	Resumo dos parâmetros de entrada e as variáveis primárias dos modelos numéricos. Termos marcados com * são considerados como quantidades físicas conhecidas e possíveis de serem encontradas na literatura. Os outros itens são parâmetros dos materiais que necessitam ser mensurados para cada material simulado. . . .	82
5.2	Resumo da comparação teórica entre os modelos de concretos em altas temperaturas. . . . .	83
5.3	Comparação do custo computacional considerando o tempo de CPU para realizar as simulações tridimensionais do ensaio de tomografia de nêutrons. Todos os testes foram realizados com um computador equipado com um processador Intel Xeon E3-1225 (3.30GHz) e 16Gb RAM. . . . .	101



## ÍNDICE DE FIGURAS

1.1 Saída de água líquida na face oposta ao aquecimento de uma placa de concreto a base de cimento Portland [4]. . . . .	3
1.2 Casos de explosão de revestimentos refratários monolíticos durante seu aquecimento inicial em um calcinador de alumina (a), no teto de um forno de alumínio (b), no funil de alimentação de um alto-forno (c), em um duto de gás do alto-forno (d). Editado de [6].	4
3.1 Microestrutura dos materiais refratários monolíticos, adaptado de [1]. . . . .	9
3.2 Mecanismos responsáveis pelo <i>explosive spalling</i> em estruturas de concreto sujeitas ao aquecimento. (a) Tensões térmicas devido ao gradiente térmico, (b) efeito da pressurização do gás no interior dos poros [16], (c) evolução da distribuição de umidade no corpo, o que resulta no fenômeno de <i>moisture clog</i> [19] . . . . .	11
3.3 (a) Tomografia de nêutrons de uma amostra de concreto a base de cimento Portland durante sua secagem pelo topo [23]. As regiões mais claras correspondem a agregados, as intermediárias representam a matriz seca e as regiões mais escuras correspondem a locais mais ricos em umidade, uma vez que as moléculas de água absorvem os nêutrons. (b-d) Evolução da quantidade de água em uma amostra de concreto aquecida pelo topo obtida por meio da tomografia de raios-X [22] (em vermelho, mudanças negativas, i.e. secagem, e em azul, mudanças positivas, i.e. acúmulo de umidade nos poros). Pode-se ver que há uma larga distribuição de tamanhos de poros, alguns vazios, outros parcialmente cheios e outros saturados com água líquida. . . . .	13

- 3.4 Descrição das fases distintas na microestrutura dos concretos (refratários e/ou civil). (a) Possíveis configurações de poro, (b) estado de tensão nas camadas adsorvidas livres e impedidas, onde,  $p_g$  é a pressão de gás no poro,  $p_d$  é a pressão de separação, e  $\gamma$  é a tensão superficial, com o sobrescrito ' indicando o valor total, considerando solicitações externas e o subscrito  $_d$  indicando as quantidades referentes a camada adsorvida impedida. (c) Diagrama demonstrando as camadas adsorvidas livres, impedidas e água capilar, considerando as forças envolvidas (como a pressão de espalhamento total na camada adsorvida livre,  $\pi'_a$ , e na camada impedida,  $\pi'_d$ ,  $p_d$ , e  $p_f$ , que é a pressão desenvolvida em uma camada adsorvida livre saturada, i.e. com 5 moléculas de espessura), adaptado de [17]. . . . . 15
- 3.5 Meio poroso formado por três constituintes, um sólido, um líquido molhante (no caso da secagem de concretos refratários, este líquido será a água) e um líquido não molhante (ar). Apresenta-se um sistema global de coordenadas (com os vetores posição  $\vec{r}$  e  $\vec{x}$  partindo da origem O) onde se define o volume elementar representativo ( $dv$ ) com diâmetro D e apresenta-se uma distância típica na escala microscópica ( $d$ ). Adaptado de [31]. . . . . 19
- 3.6 Valor médio de  $\zeta$  em função do tamanho do RVE,  $dv$ . Adaptado de [31]. . . . . 20
- 3.7 Resumo dos sistemas de equações e variáveis primárias dos modelos de Bažant (monofásico), Tenchev (multifásico que desconsidera a pressão capilar) e Gawin (multifásico que considera a pressão capilar). Em azul, as variáveis primárias são apresentadas. . . 37
- 4.1 Representação da aproximação de vetores bidimensionais em coordenadas Cartesianas. . . . . 47
- 4.2 Representação de duas funções do tipo  $P_1$ ,  $\varphi_2$  e  $\varphi_3$ , em uma malha unidimensional com 5 elementos  $\Omega^{(i)}$ . Adaptado de [66]. . . . . 49

4.3 Fluxograma de um modelo em elementos finitos implementado em um <i>script</i> em FEniCS. . . . .	54
5.1 Panorama geral do banco de dados obtido a partir da busca descrita na Lista 1. A evolução no número de documentos por ano, e seu tipo são apresentados em (a) e (b), respectivamente. Em (c), lista-se as frequências relativas entre cada um dos doze principais periódicos. . . . .	72
5.2 Evolução da ocorrência de grupos de palavras-chaves, (a), termos relacionados com a aplicação dos modelos, (b) com os fenômenos físicos considerados, (c), o modelamento numérico empregado, (d) os experimentos realizados ou referenciados, (e) propriedades do material, e (f) os ensaios utilizados. A ocorrência relativa é obtida pela razão entre o número de publicações com tal termo e o número total de publicações de cada ano. . . . .	74
5.3 Grafo de palavras-chave conectadas com ao menos 72 outros termos. As cores representam a classe de modularidade, os tamanhos são referentes ao número de conexões. . . . .	77
5.4 Perfis de temperatura ao longo da parede unidimensional em diferentes momentos. Os resultados em preto são os resultados apresentados em [79]. As condições de simulação apresentadas são (a) face quente impermeável e face fria permeável e convectiva, (b) face quente permeável e face fria impermeável e convectiva, (c) face quente permeável e face fria impermeável e adiabática e (d) face fria e quente permeável com face fria convectiva. . . . .	85

5.5	Perfis de pressão ao longo da parede unidimensional em diferentes momentos. Os resultados em preto são os resultados apresentados em [79]. As condições de simulação apresentadas são (a) face quente impermeável e face fria permeável e convectiva, (b) face quente permeável e face fria impermeável e convectiva, (c) face quente permeável e face fria impermeável e adiabática e (d) face fria e quente permeável com face fria convectiva. . . . .	86
5.6	Comparação dos resultados obtidos pela implementação utilizando a plataforma FEniCS e aqueles reportados por Fey et al. [13]. Evolução da temperatura (a), evolução da pressão do gás no material, (b), e evolução da pressão de ar seco. . . . .	87
5.7	Comparação dos resultados obtidos pela implementação utilizando a plataforma FEniCS e os resultados reportados por Dauti et al. [11]. Evolução da temperatura (a) e evolução da pressão do gás no material, (b). . . . .	89
5.8	Comparação da evolução da temperatura prevista pelos modelos com os resultados experimentais do ensaio PTM descritos em [80]. Em (a) apresenta-se o modelo monofásico descrito na Seção 3.3.2, em (b) o modelo multifásico DPC se refere ao modelo que desconsidera a pressão capilar, conforme descrito na Seção 3.3.3, e em (c) o modelo multifásico CPC, equivale ao modelo completo que considera os efeitos de capilaridade, conforme apresentado na Seção 3.3.4. . . . .	91
5.9	Comparação da evolução da pressão de gás prevista pelos modelos com os resultados experimentais do ensaio PTM descritos em [80]. Em (a) apresenta-se o modelo monofásico descrito na Seção 3.3.2, em (b) o modelo multifásico DPC se refere ao modelo que desconsidera a pressão capilar, conforme descrito na Seção 3.3.3, e em (c) o modelo multifásico CPC, equivale ao modelo completo que considera os efeitos de capilaridade, conforme apresentado na Seção 3.3.4. . . . .	92

5.10	Resumo da comparação entre os três modelos para o caso de Kalifa, considerando a evolução da temperatura (a), do gás (b) e da pressão máxima. . . . .	94
5.11	Evolução da pressão de vapor prevista pelos modelos no caso de Kalifa. . . . .	95
5.12	Comparação da evolução da temperatura prevista pelos modelos e dos dados experimentais obtidos com a amostra de tomografia de nêutrons relatados por Dauti et al. [11]. Em (a) apresenta-se o modelo monofásico descrito na Seção 3.3.2, em (b) o modelo multifásico DPC se refere ao modelo que desconsidera a pressão capilar, conforme descrito na Seção 3.3.3, e em (c) o modelo multifásico CPC, equivale ao modelo completo que considera os efeitos de capilaridade, conforme apresentado na Seção 3.3.4. . . . .	96
5.13	Comparação da mudança de quantidade de água relativa previsto pelos modelos com os resultados experimentais de tomografia de nêutrons reportados por [11]. . . . .	98
5.14	Comparação da sensibilidade dos modelos com relação a permeabilidade intrínseca inicial após 58 minutos de aquecimento, os resultados de tomografia de nêutrons reportados em [11] também são apresentados para comparação. . . . .	99
5.15	Malha usada nas simulações em 3D. . . . .	100
5.16	Quantidade de água ao final da simulação do ensaio tomográfico em três dimensões. . . . .	101
5.17	Convergência de malha dos campos de pressão, (a) e (b), e de temperatura, (c) e (e), para o cenário de secagem (aquecimento seguindo o procedimento descrito em Gong et al. [79] e na Seção 4.2). . . . .	103
5.18	Convergência de malha dos campos de pressão, (a) e (b), e de temperatura, (c) e (e), para o cenário de incêndio (aquecimento de acordo com a Equação 5.4). . . . .	104

5.19	Convergência temporal considerando o cenário de secagem, (a-b), e o cenário de incêndio, (c-d). . . . .	105
5.20	Maior valor de pressão de vapor encontrado em toda a simulação em função da (a) condutividade hidráulica inicial em diferentes valores de condutividade térmica constante e (b) porosidade inicial em diferentes valores de teor de cimento. . . . .	108
5.21	Evolução temporal da pressão máxima (a-b), da temperatura na face fria (c-d) e da quantidade de água evaporável (e-f), com valores fixos de permeabilidade inicial (a), (c) e (e), e com a condutividade térmica fixa (b), (d) e (f). . . . .	110
5.22	Descrição do caso simulado a fim de comparar o efeito de fibras longas e curtas na secagem de concretos refratários (a), malhas usadas para a fibra longa e curta, (b) e (c), respectivamente. . . . .	113
5.23	Resultados da simulação de fibras longas, (a), (c) e (e), e curtas, (b), (d) e (f), considerando a temperatura, (a) e (b), pressão, (c) e (d), e água evaporável, (e) e (f), após uma hora de aquecimento. Os vetores nas figuras (e) e (f) representam o fluxo de massa calculado diretamente na formulação mista. . . . .	115
5.24	(a) Constante inercial de Forchheimer para uma composição refratária monolítica contendo fibras de polipropileno de diferentes comprimentos, tanto para amostras a verde quanto para amostras queimadas (900 °C durante seis horas). Resultados de ensaios termogravimétricos de refratários monolíticos contendo fibras de diferentes espessuras, aquecidos com taxas de 10 °C/min e 20 °C/min, (b) e (c), respectivamente [94, 95]. . . . .	116

## LISTA DE SÍMBOLOS - LATINOS

- $a_m$  - Difusividade mássica [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]  
 $a_T$  - Difusividade térmica [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]  
 $b$  - Coeficiente de Biot [-]  
 $C_a$  - Capacidade mássica de ar úmido [ $1/\text{Pa}$ ]  
 $C_g$  - Calor específico isobárico da fase gasosa [ $\text{J}/(\text{kg K})$ ]  
 $C_p$  - Calor específico isobárico do concreto [ $\text{J}/(\text{kg K})$ ]  
 $C_l$  - Calor específico isobárico da água líquida [ $\text{J}/(\text{kg K})$ ]  
 $D_{AV}$  - Coeficiente de difusão do ar ou do vapor na mistura gasosa [ $\text{m}^2/\text{s}$ ]  
 $F_i$  - Força no eixo  $i$  [ $\text{N}$ ]  
 $g$  - Aceleração da gravidade [ $\text{m}/\text{s}^2$ ]  
 $\mathcal{H}$  - Variável do balanço de energia térmica [ $\text{J}$ ]  
 $h$  - Umidade relativa [-]  
 $\vec{J}_i$  - Fluxo mássico da fase  $i$  [ $\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$ ]  
 $K$  - Permeabilidade intrínseca [ $\text{m}^2$ ]  
 $K_g$  - Permeabilidade relativa ao gás [-]  
 $K_l$  - Permeabilidade relativa ao líquido [-]  
 $M_i$  - Massa molar da espécie  $i$  [ $\text{kg}/\text{mol}$ ]  
 $\mathcal{M}$  - Variável do balanço de massa [ $\text{kg}$ ]  
 $m$  - Massa [ $\text{kg}$ ]  
 $\dot{m}_d$  - Fluxo mássico de desidratação no volume [ $\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s})$ ]  
 $\dot{m}_{vap}$  - Fluxo mássico de evaporação no volume [ $\text{kg}/(\text{m}^3 \text{ s})$ ]  
 $\mathcal{P}$  - Variável do balanço de momento [ $\text{kg s}$ ]  
 $p$  - Pressão [ $\text{Pa}$ ]  
 $p_d$  - Pressão de separação [ $\text{N}/\text{m}^2$ ]  
 $p_f$  - Pressão de uma camada de água adsorvida livre [ $\text{N}/\text{m}^2$ ]  
 $p_g$  - Pressão de gás no poro [ $\text{N}/\text{m}^2$ ]  
 $\vec{q}$  - Fluxo de calor [ $\text{W}/\text{m}^2$ ]  
 $T$  - Constante universal dos gases [ $\text{J}/(\text{mol K})$ ]

$\frac{1}{r}$  - Curvatura Gaussiana média [1/m]

$S_g$  - Saturação com gás (volume do gás / volume dos poros) [-]

$S_l$  - Saturação com água líquida (volume do líquido / volume dos poros) [-]

$T$  - Temperatura [K]

$t$  - Tempo [s]

$t_{\text{Total}}$  - Tensor de tensão total de Cauchy do material multifásico [Pa]

$U$  - Quantidade de massa específica [-]

$\vec{u}$  - Vetor de deslocamento [m]

$\vec{v}_i$  - Velocidade da fase  $i$  [kg/(m<sup>2</sup> s)]

$w_{\text{change}}$  - Mudança de quantidade de água [kg/m<sup>3</sup>]

$\text{hat}w_{\text{change}}$  - Mudança relativa de quantidade de água [kg/m<sup>3</sup>]

$\bar{\square}$  - Variável definida por unidade de concreto

$\tilde{\square}$  - Variável definida por unidade de mistura gasosa

## LISTA DE SÍMBOLOS - GREGOS

$\beta_s$  - Coeficiente de expansão térmica do esqueleto sólido do concreto [1/K]

$\beta_{slg}$  - Coeficiente de expansão térmica efetivo [1/K]

$\beta_{sl}$  - Coeficiente de expansão térmica das fases sólidas e líquidas [1/K]

$\Gamma_d$  - Grau de desidratação [-]

$\gamma$  - Tensão superficial [N/m]

$\gamma_{gl}$  - Tensão superficial entre gás e líquido [N/m]

$\Delta H_{ad}$  - Entalpia de adsorção [J/kg]

$\Delta H_d$  - Entalpia de desidratação [J/kg]

$\Delta H_s$  - Entalpia de dessorção [J/kg]

$\Delta m_{dehyd}$  - Massa de água liberada por desidratação [kg/m<sup>3</sup>]

$\Delta H_{vap}$  - Entalpia de evaporação da água [J/kg]

$\delta_a$  - Espessura da camada de água adsorvida livre [Å]

$\epsilon_i$  - Fração volumétrica da fase  $i$  [-]

$\kappa$  - Condutividade hidráulica [m/s]

$\kappa_s$  - Coeficiente de fluxo mássico termodifusivo [kg/(m s K)]

$\lambda$  - Condutividade térmica [W/(m K)]

$\lambda_d$  - Coeficiente de fluxo de calor termodifusivo [W/(m Pa)]

$\pi$  - Pressão de espalhamento [N/m]

$\rho$  - Densidade [kg/m<sup>3</sup>]

$\bar{\rho}_i$  - Massa da fase i por volume unitário de concreto [kg/m<sup>3</sup>]

$(\overline{\rho C_p})$  - Inércia térmica do concreto [J/(m<sup>3</sup> K)]

$\overline{\rho C_p \vec{v}}$  - Vetor de energia transporta por fluxo de fluído [J/(m<sup>2</sup> K)]

$\phi$  - Porosidade [-]

$\chi$  - Coeficiente de gradiente térmico [1/K]

$\chi_p$  - Coeficiente de gradiente de filtração [(m s<sup>2</sup>)/kg]

### LISTA DE SÍMBOLOS - SUBSCRITOS

a - Ar

c - Capilar

d - Desidratação

e - Evaporação

g - Gás

l - Líquido

sat - Saturação

v - Vapor



## 1 INTRODUÇÃO

Os materiais refratários são uma classe de produtos naturais ou sintéticos constituídos por óxidos e/ou não óxidos, sendo estes majoritariamente inorgânicos e não-metálicos capazes de manter sua habilidade funcional mesmo em condições extremas de uso, como elevada temperatura, ataques químicos e abrasão [1]. Como um exemplo, a Norma C71 12R8 [2] define especificamente que a temperatura mínima de operação que classifica o material como refratário é de 538 °C (1000 °F).

Tais materiais podem ser subclassificados a partir de diferentes critérios, como sua função (estrutural ou para isolamento térmico), nível de controle da microestrutura e dimensão (estrutural ou avançado), seu caráter químico (refratários ácidos, básicos ou anfóteros) ou ainda a partir de seus principais componentes constituintes (silicosos, alta alumina, magnesianos, etc) [1].

Dentro da classe de materiais refratários estruturais há ainda uma subdivisão adicional, entre aqueles que são conformados ou monolíticos. Os produtos conformados são aqueles que são fornecidos ao consumidor final em um formato específico com dimensões bem definidas, após já ter passado pelas etapas de moldagem, cura, secagem e queima [1]. Já os refratários monolíticos são materiais fornecidos pelo produtor sem um formato específico, podendo ter sua conformação efetuada pelo usuário no local de instalação. Tais materiais apresentam inúmeras vantagens quando comparados com os conformados, por exemplo, uma maior facilidade de aplicação (e, conseqüente possibilidade de robotização), ausência de juntas de expansão, possibilidade de uso como material de reparo, e conformação em geometrias complexas [3].

Entretanto, a inevitabilidade das etapas de cura, secagem e queima por parte do consumidor final se torna um dos principais desafios na aplicação desta classe de material (especialmente no caso dos monolíticos ligados hidraulicamente). Além da dinâmica de riscos entre fornecedor e cliente final, há aspectos técnicos que dificultam tal etapa. Especificamente, no caso de monolíticos, a necessidade de se obter um adequado controle reológico para sua conformação

implica, em alguns casos, no uso de uma maior quantidade de fase líquida (na maioria dos casos, água), a qual pode participar parcialmente ou totalmente de reações químicas com os aditivos ligantes. Dessa forma, a etapa de secagem se torna crucial e exige um maior cuidado do que quando comparado com a mesma etapa no contexto de materiais conformados (os quais contém um teor de líquido inferior) [3].

Considerando ainda os refratários monolíticos, existem aqueles ligados quimicamente a partir de reações químicas entre componentes ácidos e básicos como os refratários fosfatados, e os ligados hidraulicamente, onde reações de hidratação promovem a precipitação de fases que conferem a sua resistência mecânica a verde das peças produzidas [1].

Os refratários deste último grupo requerem de um aquecimento inicial cauteloso, uma vez que tais hidratos podem sofrer diversas transformações (conversão entre fases metaestáveis em compostos mais estáveis) gerando como subproduto vapor de água, ou ainda, de fato, sofrer desidratação e desidroxilação. Soma-se também a parcela de água que não reagiu com o ligante, estando apenas fisicamente adsorvida nas partículas, a qual pode passar pelo processo de evaporação durante aquecimento. Essa geração de gás confinado na porosidade presente na microestrutura do material, aliada a um significativo aumento da temperatura de todo o meio, pode ocasionar uma intensa pressurização da microestrutura, caso o gás não encontre caminhos para migrar do interior para a superfície externa do refratário.

O gradiente desse campo de pressões resulta em um fluxo de massa do gás e do líquido, conforme previsto pela lei de Darcy [3] e observado empiricamente, como descrito por Palmer et al. [5] e na Figura 1.1. A propriedade física que descreve o quão fácil ocorre tal transporte é a permeabilidade intrínseca do material, a qual diminui consideravelmente, ao longo dos avanços recentes no desenvolvimento de composições dos refratários [1]. Isto se deu a partir da busca de uma maior resistência mecânica e química com o aumento da densificação da microestrutura, principalmente a partir da otimização do empacotamento dos agregados e das partículas finas dos componentes presentes na

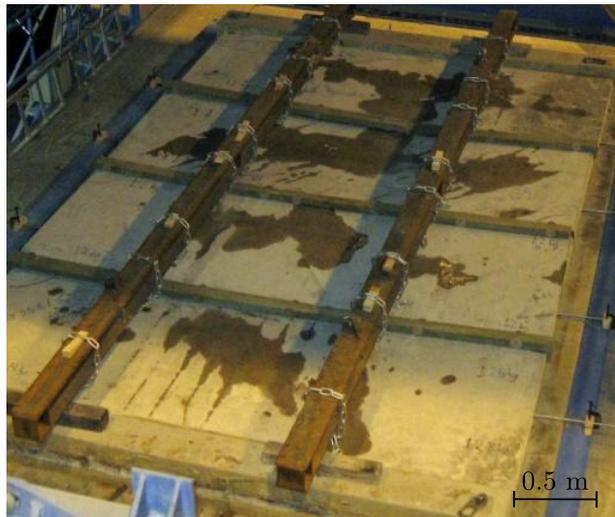


Figura 1.1: Saída de água líquida na face oposta ao aquecimento de uma placa de concreto a base de cimento Portland [4].

matriz das composições[3].

Assim, esta pressurização, aliada à gradientes térmicos que ocorrem ao longo da espessura do revestimento refratário durante seu aquecimento podem gerar trincas e lascamentos, ou ainda em casos extremos, explosões de todo o material cerâmico. A Figura 1.2 apresenta diversos exemplos de acidentes ocorridos durante a etapa de secagem do revestimento de equipamentos industriais.

É possível observar como grandes porções do refratário foram violentamente projetadas, possivelmente decorrente de uma alta energia elástica resultante da deformação térmica diferencial e dos gases pressurizados no interior dos poros da microestrutura, conforme descrito pelas principais teorias que descrevem o fenômeno de “*explosive spalling*” [4, 5].

Como metodologias de prevenção de tais acidentes, lista-se o uso de aditivos como fibras poliméricas, agentes quelantes e pós metálicos (que aumentam a permeabilidade do meio a partir de diferentes mecanismos), fibras metálicas (que promovem uma tenacificação do material), além do controle do aquecimento por meio de curvas de secagem menos agressivas [3].

Nesse contexto, a existência de um modelo que possa simular o comportamento do material refratário durante seu primeiro aquecimento se torna uma

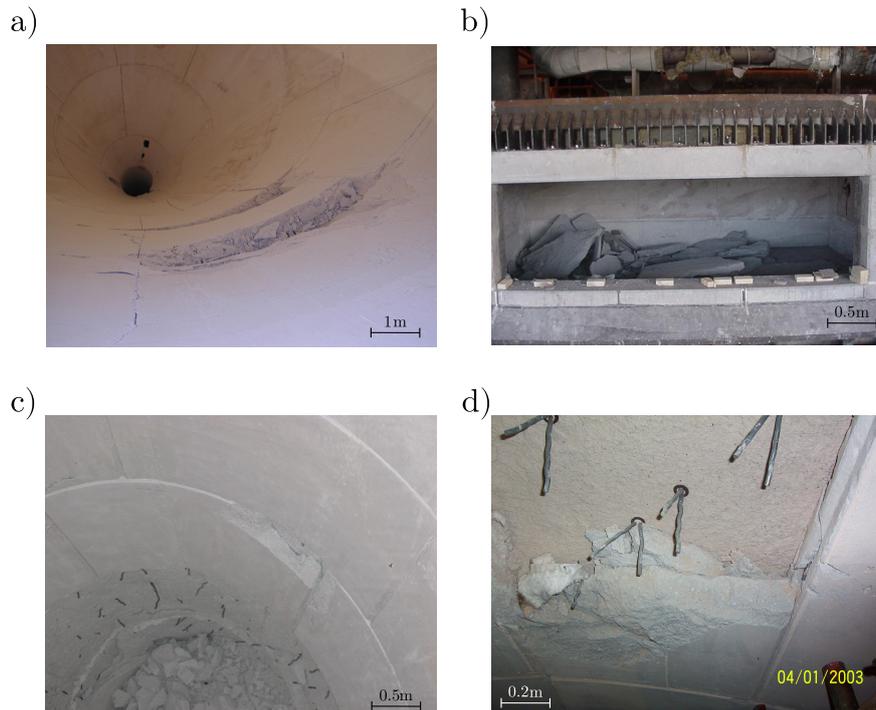


Figura 1.2: Casos de explosão de revestimentos refratários monolíticos durante seu aquecimento inicial em um calcinador de alumina (a), no teto de um forno de alumínio (b), no funil de alimentação de um alto-forno (c), em um duto de gás do alto-forno (d). Editado de [6].

das principais ferramentas possíveis de garantir o aquecimento seguro e eficiente dos revestimentos refratários, principalmente ao se considerar que a escala laboratorial é ordens de grandeza menor do que as dimensões das estruturas industriais.

Assim, neste trabalho, dentre os modelos de secagem já existentes, buscou-se encontrar potenciais candidatos, avaliando suas vantagens e desvantagens, suas hipóteses fundamentais e possibilidades de aplicação tanto no âmbito acadêmico, como principalmente no contexto de aplicação tecnológica.

A maior parte destes modelos foram desenvolvidos para concretos a base de cimento Portland submetidos a alta temperatura, como as observadas em situações de incêndios ou acidentes nucleares [7, 8, 9, 10, 11]. As principais diferenças entre tais cenários e a secagem dos refratários monolíticos são a taxa de aquecimento e a possibilidade de controle das mesmas. Dessa forma, é comum que os escassos trabalhos que objetivaram a aplicação de simulações numéricas

para o estudo do aquecimento inicial dos monolíticos [5, 12, 13] ainda se basearam nos estudos voltados para os concretos desenvolvidos para a construção civil.

Dessa forma, uma análise crítica de cada opção de modelo existente, de suas hipóteses básicas e das vantagens e limitações, se faz necessária. Para tal propósito, uma comparação direta, qualitativa, quantitativa e descritiva das famílias de modelos presentes na literatura foi proposta no presente trabalho.

Adicionalmente, efetuou-se a implementação destes modelos em ferramentas do tipo *open source*, as quais são caracterizadas por sua grande flexibilidade. Com a visão completa do cenário atual do modelamento de concretos como meio porosos, também foi possível selecionar os modelos que podem ser utilizados como base para desenvolvimentos futuros, que representem de forma mais fidedigna a realidade industrial e assim, possibilitar curvas de secagem mais seguras e eficientes.

Estudos numéricos de convergência e sensibilidade dos modelos foram também realizados e, por fim, o desenvolvimento de um modelo de elementos mistos resultou em uma ferramenta numericamente mais robusta e capaz de ser aplicada em cenários de maior complexidade como a simulação em meso-escala de concretos refratários com fibras poliméricas. Os resultados de tal ferramenta concordaram com os experimentos realizados.



## 2 OBJETIVO

### 2.1 OBJETIVOS GERAIS

O presente trabalho procura avaliar criticamente os modelos numéricos apresentados na literatura e propor ferramentas capazes de prever a secagem de concretos refratários, considerando entre diversos aspectos, o nível de complexidade, o número de parâmetros de entrada e a consistência teórica das hipóteses e premissas básicas de cada classe de modelo.

### 2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Para atender os objetivos gerais lista-se as seguintes etapas de desenvolvimento:

- Efetuar uma revisão bibliográfica sobre os modelos existentes na literatura;
- Comparação sistêmica dos modelos matemáticos existentes por meio do estudo e síntese dos principais trabalhos apresentados na literatura e de uma análise quantitativa de larga escala baseada em bibliografia e *datamining*;
- Implementação e desenvolvimento de tais modelos (em específico os modelos de Gong - baseado no estudo de Bažant, Fey - baseado no de Tenchev e Davie - e Dal Pont) em ferramentas *opensource*
- Comparações diretas dos principais modelos desenvolvidos entre si e a partir de resultados experimentais (*benchmarking*);
- Análises de convergência e de sensibilidade das variáveis envolvidas no modelo monofásico;
- Expansão do modelo simplificado para uma formulação em elementos mistos para modelos em mesoescala (para simulação de cenários complexos como análises do efeito da geometria das fibras usadas como aditivos de secagem nos concretos refratários);

- Seleção do modelo mais apropriado para a simulação de secagem de concretos monolíticos dentre os apresentados neste trabalho.

### 3 REVISÃO DA LITERATURA

#### 3.1 Aquecimento Inicial e Secagem de Refratários Monolíticos

O processo de secagem pode ser definido como a remoção de uma fase líquida, por exemplo a água, de algum material a partir de diferentes forças motoras tais como, gradientes de pressão (fluxo de massa capilar), de concentração (fluxo difusivo) ou ainda, de temperatura (fluxos convectivos ou condutivos) [14]. Em materiais compostos por diferentes fases e com porosidade considerável, como os concretos a base de cimento Portland e refratários monolíticos, tais fluxos ocorrem através dos poros na matriz e nas interfaces entre os agregados e matriz decorrentes de falhas de empacotamento, conforme apresentado na Figura 3.1.

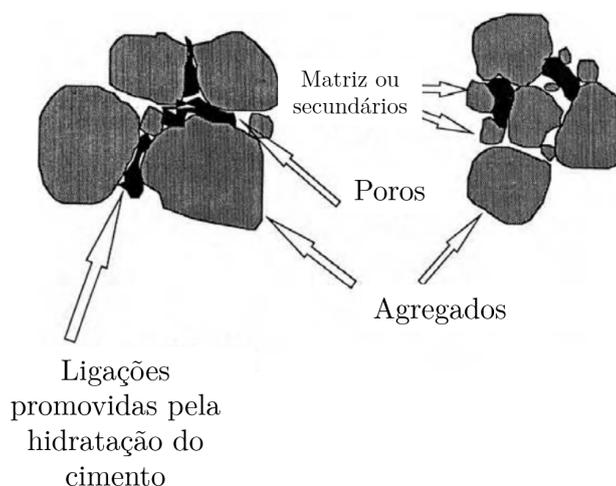


Figura 3.1: Microestrutura dos materiais refratários monolíticos, adaptado de [1].

No processamento dos concretos refratários com ligações hidráulicas, a secagem se dá após as etapas de mistura, conformação e cura, e precede a queima do revestimento. A secagem tem sido amplamente estudada, pois é a mais lenta de toda a aplicação dos refratários monolíticos (limitando uma das principais vantagens desta classe de produtos em relação aos conformados) e aquela onde vários tipos de danos podem ocorrer, como lascamento, trincas e até mesmo, em casos mais extremos, explosões [5, 3].

Tais explosões são referenciadas na literatura como *explosive spalling*, e não

são ainda totalmente compreendidas [11, 5, 15]. Porém, observações experimentais como as das Figura 1.1 e 1.2 indicam que deve haver um mecanismo (ou o efeito combinado de diferentes fenômenos) que gera uma liberação repentina de energia elástica armazenada que pode fraturar e projetar largas porções de concreto em diferentes direções.

Adicionalmente, o transporte da água retida na microestrutura do material tende a ocorrer em ambas as direções (tanto na direção da face quente quanto na fria), sendo normalmente identificado que, em regiões de menor temperatura, o vapor de água pode se condensar (reduzindo a permeabilidade e gerando o efeito chamado de *moisture clog*) e percorrer os canais intercomunicantes dos poros e as possíveis trincas, respectivamente.

As teorias mais aceitas que explicam tal fenômeno, tanto para concretos da construção civil durante incêndios como na secagem de refratários monolíticos, são a existência de gradientes térmicos intensos em posições próximas da face quente e da pressurização do gás nos poros do material, o que é agravado e intensificado devido o fenômeno de *moisture clog* [5, 4, 16, 15].

A Figura 3.2 ilustra esquematicamente ambos os mecanismos, em (a) o gradiente térmico na face quente do revestimento gera uma região tensionada em compressão devido a restrição da expansão térmica do concreto e da água líquida em seu interior. Acredita-se que este mecanismo é o que fornece a maior parte de energia elástica que causa a explosão do material, enquanto que a pressurização nos poros agiria principalmente como um gatilho para o início do crescimento das trincas [17, 15, 18], porém, tais hipóteses são discutíveis e ainda não foram comprovadas.

Já a Figura 3.2 (b) apresenta as tensões de tração decorrentes da pressurização nos poros. Este efeito pode ser explicado com base na pressão de saturação descrita pela equação de Antoine, uma equação semi-empírica que indica que a pressão parcial de um gás cresce exponencialmente com a temperatura em um reservatório lacrado em equilíbrio com sua fase líquida [3], Equação 3.1.

$$\log_{10} p_{sat} = A - \frac{B}{C + T} \quad (3.1)$$

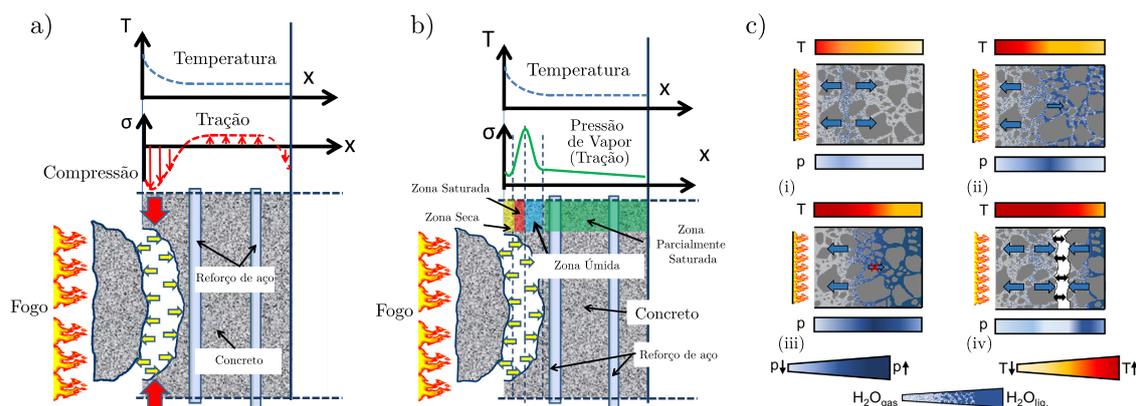


Figura 3.2: Mecanismos responsáveis pelo *explosive spalling* em estruturas de concreto sujeitas ao aquecimento. (a) Tensões térmicas devido ao gradiente térmico, (b) efeito da pressurização do gás no interior dos poros [16], (c) evolução da distribuição de umidade no corpo, o que resulta no fenômeno de *moisture clog* [19]

onde, A, B e C são coeficientes experimentais específicos de cada líquido.

Por fim, na Figura 3.2 (c) é mostrado a evolução da distribuição de umidade que leva ao fenômeno de *moisture clog*. A umidade se acumula entre a frente de secagem e a face fria devido a condensação de água líquida nessas regiões de menores temperaturas, reduzindo a permeabilidade intrínseca do material (conforme observado na Figura 3.3 (b)-(d)).

Estes danos vêm sendo cada vez mais frequentes, tanto em concretos de construção civil sujeitos a uma condição de incêndio, quanto no primeiro aquecimento de produtos refratários, devido a tendência geral de se desenvolver composições de menor porosidade aberta a partir da otimização do empacotamento das fases constituintes [3].

Diversos estudos sugeriram possíveis soluções para a otimização da secagem de materiais refratários. Dentre elas destacam-se: (i) o uso de aditivos que promovam um aumento de permeabilidade, como verificado no caso das fibras poliméricas (o que embora possa reduzir a resistência mecânica ao aumentar a porosidade do material, diminui consideravelmente o risco de pressurização do vapor de água); (ii) a incorporação de fibras metálicas nas composições, as quais induzem a tenacificação do concreto por meio de diversos mecanismos como *crack-bridging*, *microcracking* e o fenômeno de *pullout*, aumentando a resistência ao dano do material, tornando-o mais resistente à propagação de trincas

associadas a pressurização durante a secagem [3]. Além do efeito mecânico, o *microcracking* decorrente dos diferentes coeficientes de expansão da matriz e das fibras metálicas, pode promover um aumento local da permeabilidade do material conforme reportado por Li et al. [20].

Uma outra possibilidade para a redução da probabilidade da origem de danos no material monolítico durante sua secagem é a adequação das curvas de secagem a fim de que taxas mais brandas e patamares de temperatura constante sejam aplicados nos momentos mais críticos, e taxas mais altas sejam usadas nos momentos seguros, otimizando a secagem e reduzindo seu consumo energético e sua duração.

A abordagem de desenvolvimento de composições mais resistentes ao processo de secagem a partir do uso de aditivos e adequação de distribuição granulométrica vem sendo amplamente explorada e resultando em novos produtos comerciais mais condizentes para este fim [21].

Em contrapartida, o desenvolvimento dos procedimentos de secagem ainda são considerados como semi-empíricos (onde se usa o conhecimento das faixas de temperatura onde ocorrem a decomposição de determinadas fases) obtidos a partir de amostras pequenas, distantes das condições industriais [5, 3].

Assim, o melhor entendimento dos fenômenos físicos pode permitir reduções dos riscos envolvidos no processo, além de torná-lo mais rápido e eficiente energeticamente.

### **3.2 Fenômenos Físicos Envolvidos**

Embora o aquecimento dos materiais refratários seja efetuado após um curto período de tempo de cura, enquanto que para os concretos a base de cimento Portland isso ocorra somente com um evento pontual como um incêndio, a similaridade microestrutural destes produtos permite o uso de resultados experimentais e numéricos de ambas as classes de materiais (levando sempre em consideração suas especificidades). Dentro do escopo do estudo do comportamento dos concretos em situações de incêndios, diversos pesquisadores realizaram estudos tomográficos a partir do uso de raios-X [19, 22] e nêutrons [23, 11, 24]. Destas técnicas é possível se obter imagens diretas dos concretos durante seu

aquecimento, conforme apresentado na Figura 3.3

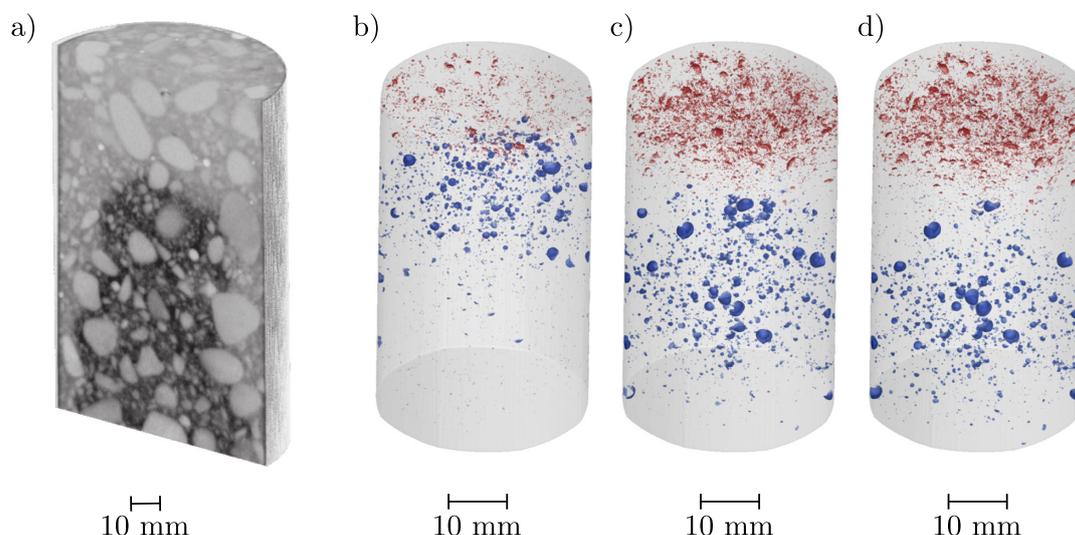


Figura 3.3: (a) Tomografia de nêutrons de uma amostra de concreto a base de cimento Portland durante sua secagem pelo topo [23]. As regiões mais claras correspondem a agregados, as intermediárias representam a matriz seca e as regiões mais escuras correspondem a locais mais ricos em umidade, uma vez que as moléculas de água absorvem os nêutrons. (b-d) Evolução da quantidade de água em uma amostra de concreto aquecida pelo topo obtida por meio da tomografia de raios-X [22] (em vermelho, mudanças negativas, i.e. secagem, e em azul, mudanças positivas, i.e. acúmulo de umidade nos poros). Pode-se ver que há uma larga distribuição de tamanhos de poros, alguns vazios, outros parcialmente cheios e outros saturados com água líquida.

Verifica-se que a água adicionada à composição não é consumida integralmente durante as etapas de hidratação que ocorrem durante a cura. Assim, há uma quantidade de água fisicamente contida nos poros contidos na microestrutura, os quais são decorrentes das falhas de empacotamento. Durante a secagem destes materiais, essa água se move em direção às superfícies do corpo, tanto em forma de vapor como, em alguns casos, como água líquida. Portanto, os modelos numéricos precisam partir de hipóteses que reconheçam tais comportamentos, ainda que ao final, simplificações dos mecanismos menos pertinentes sejam propostas.

Dessa forma é necessário aprofundar a análise da termodinâmica que rege como essa água livre pode se apresentar na microestrutura do material. Para tanto, os trabalhos de Bažant et al. [15, 17] servem como um importante ponto de partida. A Figura 3.4 mostra algumas das configurações na qual a água li-

vre pode se apresentar nos concretos, em (a) é representado um poro em duas dimensões como sendo a área compreendida entre três círculos. Na microestrutura dos concretos consolidados é esperado encontrar poros preenchidos apenas por ar seco (com uma quantia insignificante de vapor de água) próximos da superfície, bem como poros onde vapor de água (em azul claro, na Figura 3.4 (c)) coexiste com água capilar (porções líquidas que se estendem na microestrutura do material, na qual se desenvolve uma interface curva dado às diferenças entre tensões superficiais entre o líquido, gás e sólido) e água fisicamente adsorvida (camada aderida à superfície com menor mobilidade que a água capilar). A Figura 3.4 (c) descreve este último tipo de poro em uma maior resolução, onde a água adsorvida se divide em duas categorias, a água adsorvida livre e a água adsorvida impedida.

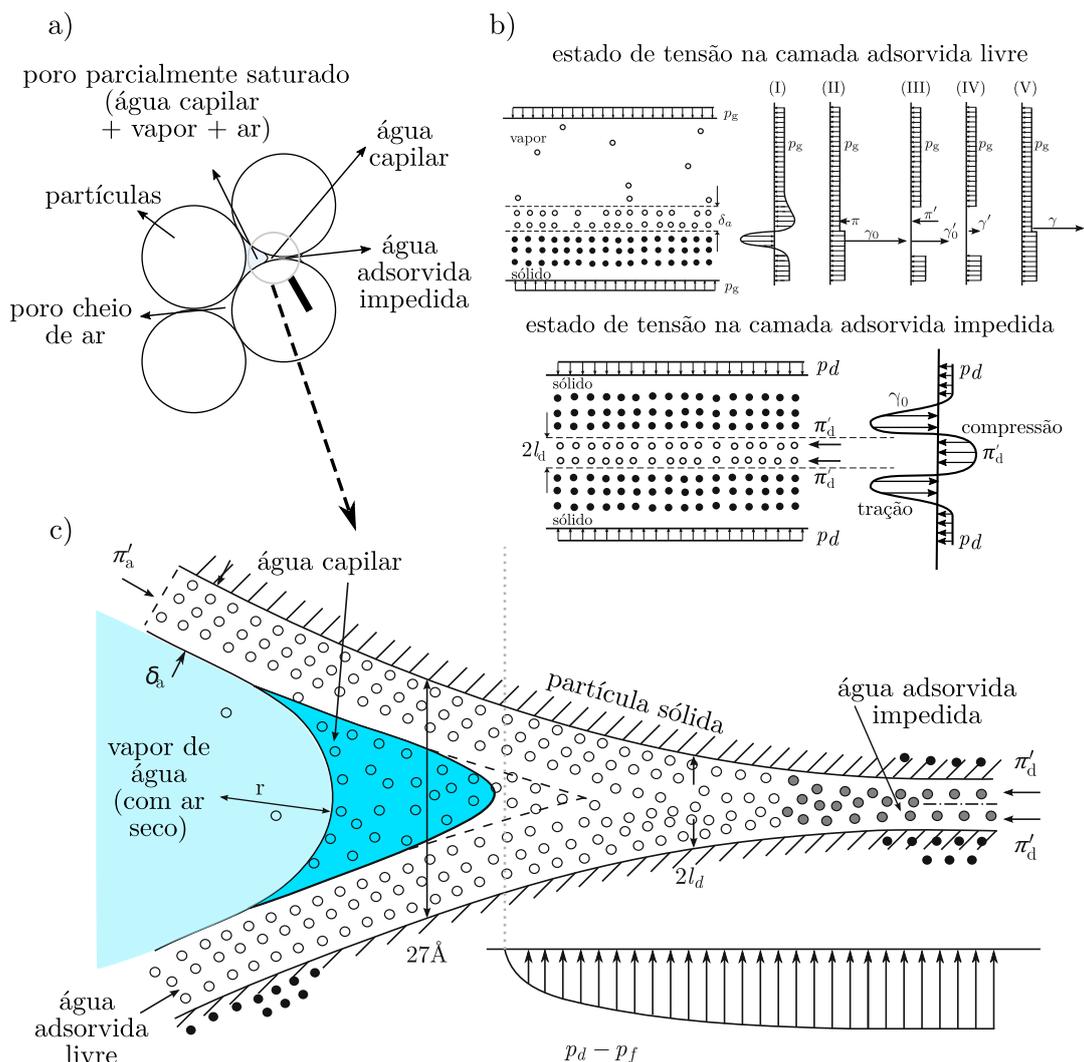


Figura 3.4: Descrição das fases distintas na microestrutura dos concretos (refratários e/ou civil). (a) Possíveis configurações de poro, (b) estado de tensão nas camadas adsorvidas livres e impedidas, onde,  $p_g$  é a pressão de gás no poro,  $p_d$  é a pressão de separação, e  $\gamma$  é a tensão superficial, com o sobrescrito ' indicando o valor total, considerando solicitações externas e o subscrito  $d$  indicando as quantidades referentes a camada adsorvida impedida. (c) Diagrama demonstrando as camadas adsorvidas livres, impedidas e água capilar, considerando as forças envolvidas (como a pressão de espalhamento total na camada adsorvida livre,  $\pi'_a$ , e na camada impedida,  $\pi'_d$ ,  $p_d$ , e  $p_f$ , que é a pressão desenvolvida em uma camada adsorvida livre saturada, i.e. com 5 moléculas de espessura), adaptado de [17].

A água adsorvida livre está em contato direto tanto com o vapor de água, bem como com a água capilar, podendo trocar massa com ambas as fases via condensação e evaporação de moléculas de água. Esta camada pode ter uma espessura,  $\delta_a$ , de até, aproximadamente, 5 moléculas de água (logo, a distância

descrita na Figura 3.4 (c) é de 27Å [15].

A camada adsorvida impedida, por outro lado, não tem contato com a água capilar nem com o vapor de água. Ela é uma consequência da microestrutura dos nanoporos que impedem que em determinada região a água adsorvida desenvolva sua espessura máxima, mesmo com umidades relativas altas o suficiente para se ter as 5 moléculas de água de espessura, o que provém de uma pressão de separação,  $p_d$ .

Assim, a única forma da massa ser transportada pela camada adsorvida impedida é através da difusão entre esta e a camada adsorvida livre originada pela diferença nas pressões de espalhamento,  $\pi'_a$  e  $\pi'_d$ , em cada camada [17]. Estas pressões, ao contrário do que a nomenclatura indica, não são medidas em unidades de força por área unitária, mas sim em força por unidade de comprimento. A Figura 3.4 (b) apresenta os estados de tensão das camadas adsorvidas livres e impedidas. Focando na porção livre, a tensão trativa longitudinal no sólido representa a tensão superficial,  $\gamma_0$ , enquanto que a tensão compressiva na camada adsorvida corresponde a pressão de espalhamento. A resultante destas forças é a chamada tensão superficial entre sólido e líquido,  $\gamma$  (V). Tais tensões podem ser alteradas por forças externas aplicadas no meio poroso, resultando nos valores totais de pressão de espalhamento e de tensão superficial,  $\pi'$  e  $\gamma'_0$ , respectivamente (III).

Considerando a camada impedida, a presença inerente da pressão de separação afeta a pressão de espalhamento  $\pi_d$ , resultando na pressão total de espalhamento,  $\pi'_d$ . Estas teorias são estudadas extensivamente na área de pesquisa de fluência e contração de concreto para a engenharia civil [17]. Para o presente estudo, a principal importância de analisar a microestrutura dos concretos em uma escala tão pequena, sob a ótica da termodinâmica, é que a interpretação dessas características microestruturais originaram duas linhas de raciocínio distintas no modelamento de concretos em alta temperatura.

Os modelos monofásicos descritos por Bažant et al. [7] discutidos em maiores detalhes na Seção 3.3, são baseados na hipótese de que os poros capilares (isto é, poros grandes o suficiente para que porções de água líquida com

interfaces curvas se desenvolvam em seu interior) não são contínuos no material consolidado. Assim seu movimento é controlado pelos nanoporos, conforme apresentado na Figura 3.4 (c), onde a água só pode ser transportada em um estado adsorvido, por meio de difusão. Conseqüentemente, uma maior dificuldade para o transporte de massa é observado nessa região quando comparado ao transporte nas regiões capilares [17, 7].

Dessa forma, partindo de tal hipótese, o fluxo de água adsorvida controlaria o transporte de umidade nos concretos. Assim, Bažant argumenta que modelos que separam o transporte de massa em fluxos de fases distintas não são realísticos, além de haver dificuldades práticas associadas às medidas de propriedades de cada mecanismo isolado [17].

A outra corrente de estudo, liderada nos últimos 20 anos por Gawin e colegas, defende que uma descrição completa e individual das fases envolvidas no transporte de massa e energia é a maneira mais fidedigna de representar tal fenômeno, tanto do ponto de vista fenomenológico, quanto do ponto de vista termodinâmico [25]. Além do mais, tal abordagem permite uma identificação da contribuição de cada mecanismo para o comportamento geral, permitindo conclusões mais detalhadas sobre os efeitos observados.

### **3.3 Modelos Numéricos**

A fim de estudar tais fenômenos físicos que ocorrem em concretos à alta temperatura, diferentes pesquisadores recorreram a modelos numéricos dado a dificuldade de se obter informações a partir de ensaios laboratoriais [7, 25].

Para concretos, independente de sua natureza química (refratários monolíticos ou a base de cimento Portland), sua microestrutura é composta por diversas fases, como a matriz, os agregados e os poros preenchidos com gás, conforme descrito na Figura 3.5.

Portanto, estes podem ser classificadas a partir de sua escala de simulação, assumindo ser coerente adotar-se as abordagens de simulação de sistemas porosos. O transporte de massa na escala dos poros, em regiões de baixa permeabilidade é regido pela equação de Darcy, Equação 3.2 (onde  $\vec{q}$  é o fluxo,  $k$  é a permeabilidade intrínseca,  $\mu$  é a viscosidade dinâmica e  $p$  a pressão), enquanto

que em regiões de alta permeabilidade, na escala de escoamento livre, pode-se aproximar o comportamento real por meio da equação de Stokes [26], Equação 3.3 (onde  $\sigma$  é o tensor de tensão referente a pressão e efeitos viscosos,  $\vec{f}$  é a força de volume,  $\rho$  é a densidade do fluido e  $\vec{u}$  é a sua velocidade). Em diversos casos, como em estudos de reservas de petróleo e de poços artesianos, regiões de permeabilidades altamente heterogêneas demandam tratamentos matemáticos específicos, como modelos de porosidade dupla, ou ainda o acoplamento entre escoamento livre (seguindo a lei de Stokes) e em meio poroso (lei de Darcy) por meio das equações de Brinkman [26].

$$\vec{q} = -\frac{k}{\mu} \nabla p \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \sigma + \vec{f} &= \vec{0} \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) &= 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Em concretos, embora danos termomecânicos e químicos possam aumentar a porosidade e a permeabilidade, modelos baseados na lei de Darcy são a grande maioria [7, 9, 13, 10, 8, 12], com raras exceções, como o trabalho de Zhang et al. [27]. Este último foi o único encontrado na presente revisão bibliográfica que aplica um modelo de porosidade dupla em concretos contendo cimento Portland no transporte de umidade em temperatura ambiente.

Com relação ao tratamento matemático dos concretos como um meio poroso, outra classificação das estratégias se dá a partir da escala considerada. A maioria dos modelos se baseia em uma estratégia de homogenização do meio com o uso de operadores de média locais. Uma breve introdução desta metodologia é feita a seguir, uma vez que todos os modelos a serem abordados no presente trabalho se baseiam em tal estratégia. Para maiores detalhes o leitor é referenciado aos trabalhos de Hassanizadeh e colaboradores [28, 29, 30].

Considerando a Figura 3.5, é possível identificar diferentes escalas de tamanho. No nível microscópico, os tamanhos dos poros ou dos grãos e a escala da não-homogeneidade são da mesma ordem de magnitude, como por exemplo a distância  $d$ . Em tal escala, as equações matemáticas se referem a pontos espe-

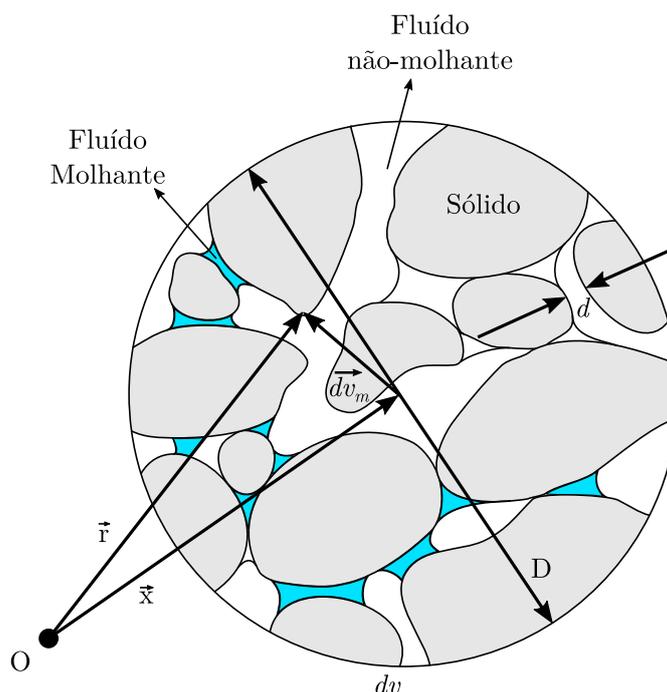


Figura 3.5: Meio poroso formado por três constituintes, um sólido, um líquido molhante (no caso da secagem de concretos refratários, este líquido será a água) e um líquido não molhante (ar). Apresenta-se um sistema global de coordenadas (com os vetores posição  $\vec{r}$  e  $\vec{x}$  partindo da origem  $O$ ) onde se define o volume elementar representativo ( $dv$ ) com diâmetro  $D$  e apresenta-se uma distância típica na escala microscópica ( $d$ ). Adaptado de [31].

cíficos de uma única fase separadamente. Este nível de detalhamento pode não ser vantajoso por diversos motivos, dos quais se destacam, a dificuldade de se obter as propriedades individuais de cada fase, de conduzir experimentos que comprovem tais modelos, além do custo computacional para simular grandes estruturas [31].

Uma vez que tal abordagem traz desvantagens, adota-se a representação do material heterogêneo a partir da consideração de um volume elementar representativo (RVE). Na Figura 3.5, tal elemento,  $dv$ , é definido por um vetor posição,  $\vec{x}$ , que fica no centro do RVE, e por seu diâmetro  $D$ . Dentro do RVE pode-se definir um elemento de volume na escala microscópica a partir de um vetor posição  $\vec{r}$  (definido no sistema de coordenadas global com centro em  $O$ ) e de tamanho  $dv_m$ .

O volume elementar representativo definido na Figura 3.5 permite a definição de variáveis macroscópicas como pressão, temperatura, porosidade, etc, a partir

da média da sua distribuição no RVE. De certa maneira, as fases, que na escala microscópica estavam compreendidas em subdomínios do material, passam a ocupar toda a dimensão da amostra, sendo uma representação homogênea que sobrepõe simultaneamente cada uma das fases em questão. Consequentemente, os modelos derivados de tal técnica são referidos como “homogenized continuum models”, isto é, modelos de meio contínuo homogeneizado.

Os detalhes técnicos de como esse procedimento é realizado estão fora do escopo do presente trabalho podendo ser encontrados nas referências [28, 29, 30, 31, 32]. Em todo caso, a definição do tamanho do RVE se torna um ponto crucial para o modelamento. Por um lado, tal tamanho não pode ser maior do que as dimensões do corpo em si, por outro, deve ser grande o suficiente para que as heterogeneidades microscópicas não se manifestem em uma variável macroscópica. A Figura 3.6 descreve tais limites em função de uma macro-quantia qualquer  $\zeta$ , considerando-se o tamanho do RVE,  $dv$  e apresentando seu intervalo admissível.

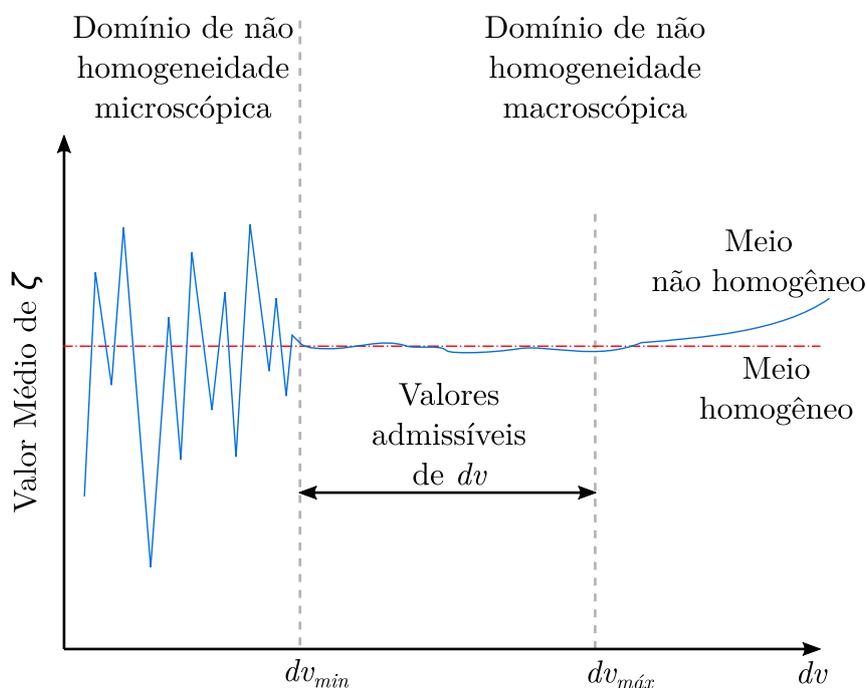


Figura 3.6: Valor médio de  $\zeta$  em função do tamanho do RVE,  $dv$ . Adaptado de [31].

Uma vez definida a estratégia de como tratar as heterogeneidades e o caráter

multifásico dos concretos, cada um dos modelos abordados serão descritos resumidamente a seguir, a partir de suas equações diferenciais parciais, variáveis primárias a hipóteses fundamentais. As equações constitutivas para os modelos de Gong, Fey e Dal Pont serão apresentadas na Seção 4 (Materiais e Métodos).

### 3.3.1 Modelo de Luikov

O modelo de Luikov foi o primeiro trabalho a utilizar a termodinâmica de processos irreversíveis (CIT) para derivar as equações matemáticas que descrevem o comportamento de materiais porosos parcialmente saturados. Ao contrário da termodinâmica tradicional, baseada em fenômenos reversíveis e em sistemas em equilíbrio, a termodinâmica de processos irreversíveis é capaz de descrever processos fora do equilíbrio onde os campos escalares de pressão e temperatura são não-homogêneos [33], permitindo seu uso para a descrição de processos que variam no tempo.

De maneira geral, os objetivos da CIT são i) prover um suporte termodinâmico às equações de transporte clássicas como o transporte de calor (Lei de Fourier), de massa (Lei de Fick), de momento (equações de Navier-Stokes) e cargas elétricas (Lei de Ohm), ii) propor uma descrição sistemática do acoplamento entre tais processos e iii) estudar estados dissipativos e estacionários fora do equilíbrio [33]. Também é importante frisar que a hipótese central da CIT é o equilíbrio local, o que limita sua aplicação para situações que não estejam tão distantes desta condição [33].

Conforme descrito anteriormente nas Seções 3.1 e 3.2, durante a secagem de refratários monolíticos e quando estruturas de concreto a base de cimento Portland são sujeitas à altas temperaturas, o transporte de energia térmica e de massa ocorrem de maneira interdependente, e conseqüentemente, a aplicação de CIT é uma escolha natural para a obtenção do sistema de equações acopladas que descrevem tal fenômeno.

Dessa forma, Luikov propôs um sistema de três equações diferenciais parciais acopladas, as Equações (3.4-3.6), com as variáveis primárias sendo a temperatura,  $T$ , a concentração de massa específica,  $U = \frac{m}{m_0}$ , e a pressão total,  $p$ . Tal modelamento é derivado de um sistema composto de um material com poro-

sidade capilar (isto é, com poros com dimensões suficientemente grandes para se desenvolver meniscos dado as forças capilares) parcialmente saturado com água, que pode se apresentar no estado líquido ou gasoso, além da presença de um gás inerte (ar seco). Na sua forma mais geral, temperaturas abaixo de 0°C são possíveis e a fase molhante (a água) pode ser encontrada no estado sólido (gelo).

A Equação 3.4 descreve o balanço de energia do corpo (considerando todas as fases), com o termo **(a.1)** representando a taxa de mudança da temperatura com o tempo, o termo **(b.1)**, que é o divergente do fluxo de calor ( $\vec{q} = -\lambda\nabla T$ ), que corresponde a energia transportada por condução dentro do corpo, dividido pela inércia térmica (o produto  $C_p\rho_s$ ), com  $a_T = \lambda/(C_p\rho_s)$  sendo a difusividade térmica, e o termo **(c.1)** a energia consumida pela evaporação da água.

$$\underbrace{\frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{(a.1)}} = \underbrace{\nabla \cdot (a_T \nabla T)}_{\text{(b.1)}} - \underbrace{\frac{\Delta H_{vap}}{C_p} \frac{\partial U}{\partial t}}_{\text{(c.1)}} \quad (3.4)$$

$$\underbrace{\frac{\partial U}{\partial t}}_{\text{(a.2)}} = \underbrace{\nabla \cdot (a_m \nabla U)}_{\text{(b.2)}} + \underbrace{a_m \chi \nabla T}_{\text{(c.2)}} + \underbrace{\chi_p \nabla p}_{\text{(d.2)}} \quad (3.5)$$

$$\underbrace{\frac{\partial p}{\partial t}}_{\text{(a.3)}} = \underbrace{\nabla \cdot \left( \frac{\kappa}{\bar{g} C_a \rho_s} \nabla p \right)}_{\text{(b.3)}} + \underbrace{\frac{1}{C_a} \frac{\partial U}{\partial t}}_{\text{(c.3)}} \quad (3.6)$$

A Equação 3.5 apresenta o balanço de massa da água no meio poroso, que corresponde quase que totalmente à água líquida uma vez que  $U = \sum_{i=0}^4 U_i$ ,  $U_i \approx U_l$ . O termo **(a.2)** representa a taxa de mudança da concentração de massa específica com o tempo, **(b.2)** é o fluxo de massa devido a difusão, **(c.2)** é o fluxo devido ao efeito de Soret (difusão devido gradientes térmicos) e por fim **(d.2)** é o fluxo de massa de Darcy (fluxo de massa devido ao gradiente de pressão).

Já a Equação 3.6 apresenta a mudança do potencial de filtragem (a pressão total) decorrente da conservação de massa do vapor de água e ar ( $U_v$  e  $U_a$ ), com o termo **(a.3)** representando a taxa de mudança de pressão com o tempo, o **(b.3)** sendo o divergente do gradiente de pressão, indicando o fluxo de massa

do vapor e **(c.3)** sendo o termo fonte que acopla as Equações 3.5 e 3.6.

A principal contribuição desta formulação é que esta pode ser adimensionalizada, o que resulta em números adimensionais que auxiliam na identificação da importância de cada termo, permitindo a possibilidade do uso de técnicas analíticas para a resolução do sistema de equações em geometrias mais simples, além de identificar quantidades que podem ser medidas direta ou indiretamente via experimentos [34, 35, 36, 37].

A consideração de tais experimentos, tanto para a caracterização quanto para a validação do modelo, é também um aspecto bastante importante dos estudos de Luikov, cujo principal foco era obter medidas confiáveis que garantissem a aplicabilidade do modelo desenvolvido em diversos casos industriais [38]. Esse aspecto é extremamente importante uma vez que na revisão bibliográfica nota-se uma tendência recente de aumento de complexidade dos modelos e um distanciamento dos aspectos experimentais e dos usuários finais, conforme será evidenciado na presente dissertação.

Uma outra contribuição de Luikov foi o desenvolvimento de um modelo usando uma formulação baseada na teoria de similaridade termodinâmica, na qual se definiu um potencial de transporte de massa, uma quantidade simétrica ao potencial de transporte de energia térmica (a temperatura) [38]. A fim de manter o presente trabalho conciso, tal abordagem não será apresentada.

Por fim, nota-se que na área de simulação de concretos em alta temperatura, ambas as abordagens de Luikov deram lugar a outras formulações. Entretanto, Luikov foi o primeiro autor a utilizar argumentos termodinâmicos (baseados na termodinâmica de processos irreversíveis) para desenvolver um sistema de equações diferenciais parciais a partir do qual todos os outros métodos se basearam [25]. Assim, embora a implementação do modelo de Luikov não seja prevista no presente projeto de pesquisa, sua apresentação é fundamental na reconstrução do conhecimento a cerca da simulação da secagem de materiais porosos, um objetivo específico do presente projeto de dissertação.

### 3.3.2 Modelo de Bažant

Em seguida, apresenta-se o modelo desenvolvido por Bažant e colaboradores [7] (aqui referenciado como modelo de Bažant), derivado a partir dos trabalhos de Luikov e da teoria da CIT. É um dos modelos mais amplamente utilizados tanto por empresas de consultoria como as dos autores Palmer [39] e Gong [12], quanto por órgãos públicos, como usinas nucleares [7]. Sua principal diferença em relação ao modelo apresentado anteriormente é o fato de que, baseado na microestrutura dos concretos, Bažant assume o fluxo de uma única fase que representa todas as fases da água (conforme justificado na Figura 3.4).

Como consequência, algumas equações de estado semi-empíricas, ajustadas por meio de experimentos, como as curvas de sorção isotérmicas (que descrevem a quantidade de água fisicamente ligada disponível para evaporação existente no concreto em determinada condição de temperatura e pressão), levam a valores de umidade relativa maiores que 100%, o que é considerado como uma desvantagem de tal abordagem, devido a falta de sentido físico de tais valores [40].

Por outro lado, Bažant justifica a existência de tal valor a partir de argumentos termodinâmicos, explicando que devido a presença de uma curvatura Gaussiana negativa do menisco de água [17], valores de umidade relativa maiores do que 100% são previstos pelas equações de Kelvin (que correlaciona a umidade relativa,  $h$ , com a pressão capilar,  $p_c = p_g - p_l$ ) e de Laplace (relacionando a pressão do gás  $p_g$ , com a pressão do líquido,  $p_l$ , a tensão superficial do sistema gás e líquido,  $\gamma_{gl}$  e a curvatura média da interface,  $\frac{1}{r}$ ), as Equações 3.7 e 3.8, respectivamente. Além disso, observações experimentais apresentam evidências da existência de  $p_v \geq p_{sat}$  o que permite valores de  $h$  maiores que 100% [17].

$$p_c = p_g - p_l = -\frac{RT\rho_l(T)}{M_w} \ln(h) \quad (3.7)$$

$$p_g = p_l + \frac{2\gamma_{gl}}{r} \quad (3.8)$$

O sistema de equações do modelo resultante é definido pela escolha de va-

riáveis desconhecidas. Assim, a primeira escolha foi a temperatura, uma vez que esta tem uma elevada importância no fenômeno, além da facilidade de aplicar condições de contorno e de sua interpretação física ser direta. A segunda variável escolhida foi a pressão de vapor,  $p_v$ .

Para o desenvolvimento do sistema de equações diferenciais parciais, o fluxo de massa é descrito por uma componente Darciana ( $\vec{J}_{Darcy} = -\rho\vec{v} = -\rho\frac{K}{\nu}\nabla p_v$ , onde a permeabilidade intrínseca,  $K$ , com unidade de  $m^2$ , pode ser substituída pela condutividade hidráulica,  $\kappa = \frac{K\rho\bar{g}}{\mu}$  com unidade de  $m/s$ ) e uma componente de Soret ( $\vec{J}_{Soret} = -\kappa_s\nabla T$ ). O fluxo de massa na formulação de Bažant pode ser considerado como a soma das equações de balanço escritas separadamente para o vapor e a água líquida, além de se ignorar o gás seco no poro, o que de certa forma, o torna um modelo equivalente aos modelos multifásicos.

Já o fluxo de calor consiste na lei de Fourier ( $\vec{q}_{Fourier} = -\lambda\nabla T$ ) e no efeito de Dufour ( $\vec{q}_{Dufour} = -\lambda_d\nabla P$ ). Baseado em resultados experimentais, as leis de transporte recíprocas (isto é, os fluxos de Soret e Dufour) são negligenciados [7].

Assim, considerando o balanço de massa e de energia térmica, o sistema de equações parciais diferenciais obtidos é descrito nas Equações 3.9 e 3.10.

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t}}_{\text{(a.1)}} = \nabla \cdot \underbrace{\left(\frac{\kappa}{g}\nabla p_v\right)}_{\text{(b.1)}} + \underbrace{\frac{\partial \bar{\rho}_d}{\partial t}}_{\text{(c.1)}} \quad (3.9)$$

$$\underbrace{\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{(a.2)}} = \nabla \cdot \underbrace{(\lambda \nabla T)}_{\text{(b.2)}} - C_l \underbrace{\frac{\kappa}{g} \nabla p_v \cdot \nabla T}_{\text{(c.2)}} + \underbrace{\Delta H_s \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t}}_{\text{(d.2)}} \quad (3.10)$$

A Equação 3.9 descreve o balanço de massa da umidade (água líquida e vapor de água), onde o termo **(a.1)** representa a taxa de mudança de umidade com o tempo em um determinado ponto. Essa quantidade é igual a massa transportada para, ou deste ponto, na forma do fluxo de Darcy **(b.1)**, ou da desidratação das fases hidratadas do cimento **(c.1)**.

A equação de balanço de energia (Equação 3.10) descreve a taxa de variação de energia térmica em determinado ponto, **(a.2)** (onde  $\rho C_p$  é o produto densidade

e calor específico do material, sem considerar a água fisicamente adsorvida), o que é igual à energia transportada por condução de ou para determinado ponto, **(b.2)**, a energia transportada por convecção da água (vapor e/ou líquido), **(c.2)**, e a entalpia de liberação da água fisicamente adsorvida, a entalpia de dessorção, **(d.2)**, que é a soma da entalpia de evaporação da água líquida e a entalpia de adsorção ( $\Delta H_s = \Delta H_{vap} + \Delta H_{ad}$ ).

Diversos autores (incluindo o próprio Bažant) fizeram diferentes simplificações e suposições como: i) negligenciar a entalpia de dessorção [7], **(d.2)** na Equação 3.10 (algo que é coerente com o fato de que as partículas em geral possuem um diâmetro relativamente grande, e portanto menor área superficial disponível para adsorção); ii) considerar a entalpia de dessorção igual a entalpia de evaporação da água líquida,  $\Delta H_s = \Delta H_{vap}$  [12, 39, 41]; iii) usar um termo adicional na Equação 3.10 que considera a energia de desidratação,  $\Delta H_d \frac{\partial w_d}{\partial t}$ , [41]; desconsiderar o transporte de energia por convecção, **(c.2)** na Equação 3.10, [42].

No modelo original de Bažant et al., [7], as equações constitutivas usadas foram derivadas semi-empiricamente, aproximando resultados experimentais a partir de equações baseadas na termodinâmica do processo [40]. Por exemplo, a curva de sorção isotérmica  $\bar{\rho}_e$  (que descreve a quantidade de água evaporável contida na microestrutura do concreto) foi derivada considerando dois regimes distintos separados por uma região interpolada linearmente. A primeira etapa representa uma região insaturada (na qual a umidade relativa pode ser calculada  $h = \frac{p_v}{p_{sat}} < 0.96$ ) onde uma lei de potência (com coeficientes obtidos empiricamente) correlaciona a temperatura e pressão com a quantidade de água evaporável, a quantidade de água para saturação da amostra em temperatura ambiente e a massa de cimento adicionada na composição. A etapa super saturada sucede a interpolação linear e é caracterizada pela porosidade bem como pela deformação elástica do concreto.

Assim, a suposição que o transporte de água líquida e gasosa pode ser simplificada em um modelo que considera uma única fase (o que resulta num modelo com um número menor de parâmetros e mais fácil de se implementar), explica

porque este se tornou o modelo mais comum adotado para a descrição do comportamento de concretos em alta temperatura.

Ainda assim, outros autores afirmam que devido a estas mesmas suposições, tal abordagem simplifica demasiadamente o processo, além de negligenciar fenômenos físicos importantes associados com transformações observadas na microestrutura porosa em alta temperatura [25]. Assim, os próximos modelos apresentados são aqueles que descrevem as fases individualmente.

### 3.3.3 Modelo de Tenchev

Tenchev et al. [8] propuseram um modelo multifásico (referenciado aqui como Modelo de Tenchev) como uma maneira de superar os aspectos negativos dos desenvolvimentos de Bažant e Luikov, principalmente o fato de que considerando tais implementações, os mecanismos de transporte de massa são combinados, podendo mascarar características individuais de cada fenômeno e dificultar a avaliação da sensibilidade das variáveis do modelo. Assim, o modelo de Tenchev considera o ar seco, o vapor de água e a água líquida como fases distintas.

As principais hipóteses feitas por Tenchev e colegas foram: i) todas as fases dentro de um volume de controle infinitesimal estão em equilíbrio termodinâmico (uma hipótese também feita pelos modelos anteriormente apresentados), ii) as fases gasosas são consideradas como gases ideais, iii) o efeito de Soret, o fluxo de massa devido o gradiente de temperatura, é negligenciável (conforme assumido por Bažant), iv) não há difusão de água fisicamente ligada, uma vez que esta é transportada apenas após evaporação, e v) a pressão do gás é igual a pressão do líquido, i.e., os efeitos de tensão superficial são desconsiderados (veja a Equação 3.8 e assumida uma curvatura Gaussiana média infinita).

As variáveis primárias selecionadas são a temperatura,  $T$ , a pressão do gás,  $p_g$ , e a densidade do vapor de água,  $\tilde{\rho}_v$  (onde o símbolo  $\tilde{\rho}$  acima das variáveis indica a massa de determinado constituinte do gás por metro cúbico de mistura de gás). O sistema de equações parciais diferenciais é apresentado nas Equações 3.11 - 3.13.

$$\underbrace{\frac{\partial(\epsilon_g \tilde{\rho}_a)}{\partial t}}_{\text{(a.1)}} = \underbrace{-\nabla \cdot \vec{J}_a}_{\text{(b.1)}} \quad (3.11)$$

$$\underbrace{\frac{\partial(\epsilon_g \tilde{\rho}_v)}{\partial t}}_{\text{(a.2)}} + \underbrace{\frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t}}_{\text{(b.2)}} - \underbrace{\frac{\partial \bar{\rho}_d}{\partial t}}_{\text{(c.2)}} = \underbrace{-\nabla \cdot (\vec{J}_v + \vec{J}_l)}_{\text{(d.2)}} \quad (3.12)$$

$$\underbrace{(\overline{\rho C_p}) \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{(a.3)}} - \underbrace{\Delta H_{vap} \frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t}}_{\text{(b.3)}} + \underbrace{(\Delta H_d + \Delta H_{vap}) \frac{\partial \bar{\rho}_d}{\partial t}}_{\text{(c.3)}} = \underbrace{\nabla(\lambda \nabla T)}_{\text{(d.3)}} + \underbrace{\Delta H_{vap} \nabla \cdot \vec{J}_l}_{\text{(e.3)}} - \underbrace{(\overline{\rho C_p \vec{v}}) \nabla T}_{\text{(f.3)}} \quad (3.13)$$

A Equação 3.11 representa a conservação de massa para o ar seco, onde **a.1** corresponde à taxa de mudança de massa de ar em um volume unitário (onde  $\epsilon_g$  é a fração volumétrica do gás e  $\tilde{\rho}_a$  é a densidade do ar seco - massa de ar por metro cúbico de mistura gasosa), e **b.1** é a massa transportada de, ou para, o volume de controle, com o fluxo de ar seco dado pela Equação 3.14, que considera o fluxo convectivo de acordo com a lei de Darcy ( $\vec{v}_g = -\frac{KK_g}{\mu_g} \nabla p_g$ , onde  $K$  é a permeabilidade intrínseca e  $K_g$  é a permeabilidade relativa da fase gasosa no concreto seco) e o fluxo difusivo seguindo a lei de de Groot (segundo termo).

$$\vec{J}_a = \epsilon_g \tilde{\rho}_a \vec{v}_g - \epsilon_g \tilde{\rho}_g D_{AV} \nabla \left( \frac{\tilde{\rho}_a}{\tilde{\rho}_g} \right) \quad (3.14)$$

Em seguida, a Equação 3.12 descreve o balanço de massa da água (líquida e vapor), onde **a.2** representa a taxa de variação de massa de vapor de água em um volume de controle, **b.2** é a taxa de mudança de massa de água líquida (onde a barra acima dos símbolos,  $\bar{\rho}$ , indica a massa de uma fase específica por metro cúbico de concreto, nesse caso  $\bar{\rho}_l$  é a massa de água líquida), e **c.2** é a taxa de variação da massa decorrente da desidratação. A soma desses parâmetros é igual a massa de vapor e líquido transportado de, ou para, o volume de controle, **d.2**, conforme descrito pelas Equações 3.15, que considera os fluxos de Darcy e difusivo do vapor de água, e 3.16, que descreve o fluxo de Darcy da água líquida,  $\vec{v}_l = -\frac{KK_l}{\mu_l} \nabla p_l$ . Novamente deve ser reforçado que é assumido a igualdade entre

a pressão de gás e do líquido,  $p_g = p_l$ , (ver suposição (v)).

$$\vec{J}_v = \epsilon_g \tilde{\rho}_v \vec{v}_g - \epsilon_g \tilde{\rho}_g D_{AV} \nabla \left( \frac{\tilde{\rho}_v}{\tilde{\rho}_g} \right) \quad (3.15)$$

$$\vec{J}_l = \bar{\rho}_l \vec{v}_l \quad (3.16)$$

Por último, a Equação 3.13 descreve o balanço de energia térmica, com **a.3** sendo sua taxa de variação em um volume unitário (com  $\overline{(\rho C_p)} = \rho_s C_s + \bar{\rho}_L C_l + \epsilon_g \tilde{\rho}_v C_v + \epsilon_g \tilde{\rho}_a C_a$ , a inércia térmica efetiva do concreto), **b.3**, **e.3**, e **c.3** as energias utilizadas para evaporação de água líquida e de desidratação, **d.3** é a energia transportada por condução, e **f.3** é a energia transportada por convecção (onde  $\overline{\rho C_p \vec{v}} = \bar{\rho}_l C_l \vec{v}_l + (\tilde{\rho}_v C_v + \tilde{\rho}_a C_a) \epsilon_g \vec{v}_g$ ), que foi descartada na implementação de Tenchev devido a problemas numéricos [8].

Este modelo foi expandido por Davie et al. [43], onde a consideração de efeitos capilares e o transporte de água adsorvida foi realizada. Tais hipóteses são implementadas ao mudar a descrição do fluxo de massa de água líquida (Equação 3.16), adicionando um termo que incorpora a difusão de água adsorvida (e uma função condicional que descreve a saturação com água adsorvida do sistema) e ao levar em conta a pressão do líquido a partir da equação de Kelvin, Eq. 3.7, [43]. Em tal estudo foi constatado que a simplificação de ignorar a pressão capilar poderia ser feita sem influenciar os valores de pressão do poro em testes envolvendo altas taxas de aquecimento. Em todo caso, outras discussões referentes a inconsistências termodinâmicas foram apontadas por Gawin et al. [44] e reconhecidas por Tenchev [45].

Por fim, o modelo descrito não considera os aspectos mecânicos do fenômeno de *explosive spalling*, podendo somente indicar o comportamento geral da pressurização dos gases nos poros durante o aquecimento, fornecendo apenas informações gerais referentes aos mecanismos que transportam a água no meio poroso.

Um outro trabalho de Tenchev et al. [46] foi desenvolvido para considerar os efeitos termomecânicos nas simulações, considerando o modelo constitu-

tivo de concreto de Ortiz [47], e o acoplado de forma fraca com seu modelo termo-hídrico [8]. Consequentemente as pressões nos poros computadas pelas equações de balanço de massa e calor resultam em forças de corpo na análise termomecânica, conforme descrito pela Equação 3.17, onde  $b$  é o coeficiente de Biot e considerando  $b = 1$  por Tenchev et al. [46].

$$F_x = b \frac{\partial p_g}{\partial x}; \quad F_y = b \frac{\partial p_g}{\partial y}; \quad F_z = b \frac{\partial p_g}{\partial z} \quad (3.17)$$

O acoplamento entre os modelos é considerado fraco, pois, os danos computados pela análise termomecânica não afetam a permeabilidade do concreto, o que na prática ocorre mediante o aumento de permeabilidade do material devido ao crescimento de trincas, o que facilita o transporte de massa pela microestrutura.

O modelo constitutivo de Ortiz reporta que a inelasticidade do concreto a partir de um modelo de dano distribuído independente da taxa para a matriz e considerando o concreto como um compósito (ao considerar a teoria de misturas) [47]. Por meio de tal teoria a evolução de trincas paralelas a direção de carregamento pode ser explicada a partir da distribuição desigual de tensões entre a matriz e os agregados, e, como o *explosive spalling* é um efeito decorrente de tensões compressivas (ver a Seção 3.1), um modelo mecânico que engloba tais efeitos é de grande interesse, pois, este pode reproduzir o comportamento observado no concreto em altas temperaturas [46]. Outra vantagem do modelo de Ortiz é que este pode ser facilmente implementado em códigos de elementos finitos [47]. Em contrapartida, algumas das propriedades mecânicas em função da temperatura precisaram ser ajustadas a partir de resultados experimentais de compressão uni e biaxiais em altas temperaturas [46], o que pode dificultar a aplicação desta metodologia para materiais que não possuem dados de tais experimentos em altas temperaturas.

De maneira geral é possível observar que a consideração de aspectos mecânicos permite resultados com interpretações precisas de comportamentos observados experimentalmente. Além disso, tais considerações permitem visualizar efetivamente o dano causado pelas altas temperaturas nos materiais. Assim, a

próxima seção apresenta dois modelos que avançaram ainda mais o desenvolvimento da representação termo-hidromecânica de concretos em altas temperaturas, o primeiro apresentando um sistema totalmente acoplado (considerado um avanço sobre o modelo de Tenchev) e o segundo considerando aspectos em multiescala (como a presença e o efeito de agregados).

### 3.3.4 Modelos de Gawin e de Dal Pont

Gawin et al. [25] desenvolveram um modelo que acopla totalmente os aspectos termo-hídricos com a análise termomecânica ao levar em conta que os danos previstos influenciam a permeabilidade do concreto. Este modelamento será referenciado no presente trabalho como Modelo de Gawin.

Como os outros modelos, Gawin parte das premissas das teorias de CIT e da teoria da mistura híbrida (conforme descrito na Figura 3.6). Esta metodologia permite a descrição de um sistema multifásico (como o meio poroso parcialmente saturado) por uma metodologia de cálculo de médias de quantidades nos volumes representativos. Tal metodologia foi inicialmente proposta por Hassanizadeh e Gray [28, 29, 30]. Aplicando-a em geo-materiais, Lewis et al. [31] inspiraram Gawin et al. [9] a utilizá-la para materiais de construção civil (concretos com cimento Portland).

A principal diferença quando comparado com a formulação proposta por Tenchev está na seleção da variável primária que descreve o estado hídrico do material. Gawin et al. [25], escolheram a pressão capilar,  $p_c$ , ao invés da densidade do vapor de água usada por Tenchev,  $\bar{\rho}_v$ .

Esta escolha foi pautada por justificativas termodinâmicas que defendiam que a consideração da pressão capilar enquanto quantidade física tinha sentido físico em todos os cenários da secagem. Isto é, tanto para situações onde a saturação com água líquida era alta, quanto para aquelas onde esta saturação era pequena (e normalmente não seria possível definir uma pressão capilar) [48], ou ainda em temperaturas acima da temperatura crítica da água (374.15 °C), onde seu sentido físico mudava apropriadamente entre pressão capilar e o potencial hídrico.

Por outro lado, na definição de Tenchev, a densidade do vapor de água para regiões totalmente saturadas com água líquida não possui sentido físico, o que

torna o modelo de Gawin mais consistente com a teoria. Uma outra característica importante, e um incremento em relação aos modelos previamente apresentados, é que Gawin permite a descrição de equações da cinética de desidratação e dos danos químicos dos materiais.

Como os demais modelos, sua formulação consiste num sistema acoplado de equações diferenciais parciais que descrevem a conservação de massa, energia, e agora, de momento de Cauchy. Suas variáveis primárias são a temperatura,  $T$ , a pressão capilar,  $p_c$ , a pressão do gás,  $p_g$ , o vetor de deslocamentos,  $\vec{u}$  e três parâmetros internos que descrevem a evolução de desidratação e deterioração do concreto: o grau de desidratação,  $\Gamma_d$ , o parâmetro de danos químicos,  $V$  e o parâmetro de dano mecânico,  $d$ . As Equações 3.18 - 3.21 descrevem o sistema de equações do modelo.

A Equação 3.18 apresenta o balanço de massa do ar seco e contém a mudança do grau de saturação de água líquida, **a.1**, da densidade do ar, **d.1**, a evolução da porosidade causada pelo aumento de temperatura, **b.1**, a deformação elástica do sólido, **c.1**, o processo de desidratação, **e.1**, e a consequente variação da densidade do sólido, **f.1**. Por fim, fluxos difusivos e advectivos são representados pelos termos **g.1** e **h.1**, respectivamente.

$$\begin{aligned}
 & -\underbrace{\phi \frac{\partial S_w}{\partial t}}_{\text{(a.1)}} - \underbrace{\beta_s(1-\phi)S_g \frac{\partial T}{\partial t}}_{\text{(b.1)}} + \underbrace{S_g \nabla \cdot \vec{v}_s}_{\text{(c.1)}} + \underbrace{\frac{S_g \phi}{\tilde{\rho}_a} \frac{\partial \tilde{\rho}_a}{\partial t}}_{\text{(d.1)}} - \underbrace{\frac{\dot{m}_d S_g}{\rho_s}}_{\text{(e.1)}} - \\
 & - \underbrace{\frac{(1-\phi)S_g}{\rho_s} \frac{\partial \rho_s}{\partial \Gamma_d} \frac{\partial \Gamma_d}{\partial t}}_{\text{f.1}} + \underbrace{\frac{1}{\tilde{\rho}_a} \nabla \cdot \vec{J}_a}_{\text{g.1}} + \underbrace{\frac{1}{\tilde{\rho}_a} \nabla \cdot (\phi S_g \tilde{\rho}_a \vec{v}_g)}_{\text{h.1}} = 0 \quad (3.18)
 \end{aligned}$$

Em seguida, o balanço de massa da água líquida e gasosa é dado pela Equação 3.19. Nela, se considera a mudança da saturação com água líquida, **a.2**, a variação da densidade do sólido devido as deformações elásticas, **b.2**, devido a desidratação, **i.2**, e a evolução da porosidade com a temperatura, **c.2**, e o estado de desidratação em si, **j.2**. A evolução da densidade do vapor de água e da água líquida são descritos pelos termos **d.2** e **e.2**, respectivamente. Os fluxos são

considerados como a difusão e convecção de vapor (**f.2** e **g.2**) e a convecção da água líquida, **h.2**. Também se considera um termo fonte referente a vaporização da água, **k.2**

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\phi(\bar{\rho}_l - \tilde{\rho}_v) \frac{\partial S_l}{\partial t}}_{\mathbf{a.2}} + \underbrace{(\bar{\rho}_l S_l + \tilde{\rho}_v S_g) \nabla \cdot \vec{v}_s}_{\mathbf{b.2}} - \underbrace{\beta_{slg} \frac{\partial T}{\partial t}}_{\mathbf{c.2}} + \\
& + \underbrace{S_g \phi \frac{\partial \tilde{\rho}_v}{\partial t}}_{\mathbf{d.2}} + \underbrace{S_l \phi \frac{\partial \bar{\rho}_l}{\partial t}}_{\mathbf{e.2}} + \underbrace{\nabla \cdot \vec{J}_v}_{\mathbf{f.2}} + \underbrace{\nabla \cdot (\phi S_g \tilde{\rho}_v \vec{v}_g)}_{\mathbf{g.2}} + \\
& + \underbrace{\nabla \cdot (\phi S_l \bar{\rho}_l \vec{v}_l)}_{\mathbf{h.2}} - \underbrace{(\bar{\rho}_l S_l + \tilde{\rho}_v S_g) \frac{(1-\phi)}{\rho_s} \frac{\partial \rho_s}{\partial \Gamma_d} \frac{\partial \Gamma_d}{\partial t}}_{\mathbf{i.2}} - \\
& \quad - \underbrace{\frac{\dot{m}_d}{\rho_s} (\bar{\rho}_l S_l + \tilde{\rho}_v S_g)}_{\mathbf{j.2}} = - \underbrace{\dot{m}_d}_{\mathbf{k.2}}
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Já a Equação 3.20 se refere ao balanço de energia térmica e considera os mesmos termos do modelo de Tenchev, considerando a energia térmica acumulada no material, **a.3**, os fluxos de calor convectivos (**b.3**) e condutivos (**c.3**) e o calor consumido pelas mudanças de fase, a evaporação e desidratação, **d.3** e **e.3**, respectivamente.

$$\begin{aligned}
& \underbrace{(\overline{\rho C_p}) \frac{\partial T}{\partial t}}_{\mathbf{a.3}} + \underbrace{(\bar{\rho}_l C_l \vec{v}_l + \tilde{\rho}_g C_g \vec{v}_g) \cdot \nabla T}_{\mathbf{b.3}} - \underbrace{\nabla \cdot (\lambda \nabla T)}_{\mathbf{c.3}} \\
& = - \underbrace{\dot{m}_{vap} \Delta H_{vap}}_{\mathbf{d.3}} + \underbrace{\dot{m}_d \Delta H_d}_{\mathbf{e.3}}
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Adicionalmente, considerando os fenômenos termomecânicos, a Equação 3.21 descreve a conservação de momento linear de Cauchy, nela se ignora as forças inerciais, considerando apenas o tensor total de tensões, **a.4**, que engloba as contribuições de solicitações externas e o efeito da pressão exercida pelos fluídos nos poros do material. Também se considera a força gravitacional pelo termo **b.4**.

$$\underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{t}_{\text{Total}})}_{\text{a.4}} + \underbrace{\rho \vec{g}}_{\text{b.4}} = 0 \quad (3.21)$$

O modelo completo é composto por 11 relações constitutivas distintas e 3 equações de evolução que descrevem o comportamento das variáveis internas  $\Gamma_d$ ,  $V$  e  $d$ , resultando no modelo mais complexo (e completo) disponível na literatura para a simulação do desempenho de concretos em altas temperaturas.

Esta complexidade pode ser interpretada como a maior desvantagem do uso deste tipo de modelo, uma vez que sua aplicabilidade é limitada, dadas a sua elevada complexidade, as dificuldades em se mensurar todos os parâmetros de entrada e os desafios numéricos de se considerar um problema multi-físico tão complexo [17].

Uma outra abordagem utilizada por grupos de pesquisa que buscam entender os mecanismos fundamentais que regem o comportamento de concretos em alta temperatura (o mesmo objetivo de Gawin e seu grupo [25]) é a simulação em nanoescala [49, 50, 51, 52, 53, 54], onde a consideração do problema em uma escala tão pequena desconsidera as propriedades efetivas e permite entendimentos mais detalhados das interações entre as microestruturas, a umidade e a temperatura.

Por fim, o último modelo apresentado na presente seção descreve uma abordagem meso-escala. Esta pode ter grande vantagem quando compara com os modelos do meio contínuo homogeneizado (i.e. todos os modelos apresentados até este ponto do presente projeto de dissertação), uma vez que é possível simular a interação de estruturas não porosas em contato direto ou no interior de corpos de concreto, como treliças metálicas, sistemas de ancoragem de refratários ou ainda agregados com diferentes tamanhos médios e distribuições de tamanho.

O modelo descrito por Dal Pont et al. (referido como modelo de Dal Pont), [55] é baseado na mesma abordagem utilizada por Gawin et al. onde uma formulação termo-hidromecânica é proposta com as variáveis primárias sendo a tempe-

ratura,  $T$ , a pressão do gás,  $p_g$ , a pressão capilar,  $p_c$  e o vetor de deslocamentos,  $\vec{u}$ , para descrever o comportamento da matriz do concreto. Os agregados são considerados como um subdomínio composto por sólidos impermeáveis, regidos apenas pelas equações de balanço térmico (ignorando os termos relacionados com os fluxos de massa) e do balanço de momento linear [55]. É importante salientar que a zona de transição interfacial entre a matriz e os agregados não é considerada.

Esta separação dos materiais permite uma melhor descrição dos efeitos termomecânicos uma vez que cada componente individual é representado por seu coeficiente de expansão térmica individual. No caso de concretos, o coeficiente de expansão térmica efetivo é regido de forma majoritária pelo comportamento expansivo monotônico dos agregados (uma vez que é o componente de maior concentração da composição), mascarando o comportamento da matriz que passa por sucessivos regimes de expansão e contração [55].

Por meio desta ferramenta de simulação foi possível descrever as observações feitas pelo ensaio de tomografia de nêutrons ao se avaliar o efeito de um agregado grande (metade do diâmetro da amostra cilíndrica) que acelerou a frente de secagem quando comparado com a amostra sem este. Também, foi possível propor explicações para tal comportamento observado, uma vez que o efeito de aceleração da frente de secagem só foi observado na simulação que considerou o dano termomecânico, o que indica que é justamente esse dano que amplia a permeabilidade na interface e acelera a secagem do material [55].

Tal abordagem representa uma das formulações mais recentes para a simulação de concretos à alta temperatura, e suas principais contribuições são: i) o seu caráter mesoescala, que abre uma nova frente de pesquisa (inviável com os modelos pré-existentes), e ii) o uso em conjunto de técnicas de observação direta, como a tomografia de nêutrons e raios X e a ressonância nuclear magnética com modelos computacionais, o que facilita a obtenção de propriedades efetivas dos materiais.

Estes experimentos não afetam nenhuma propriedade do material, diferente dos testes onde se mede a pressão e a temperatura a partir de sensores embu-

tidos nas amostras (PTM), os quais geram resultados não confiáveis, que ainda são a principal metodologia empregada para validação dos modelos [24]. Como contraponto, as técnicas de observação experimental direta ainda são restritas à geometrias muito pequenas (cilindros de 30mm de diâmetro e 60mm de altura).

De toda forma, abordagens integradas como a utilizada por Dal Pont et al. são fundamentais para inovações, tanto para o avanço do entendimento teórico do fenômeno, como para propor ferramentas de grande apelo tecnológico para aplicação em processos industriais. Além disso, estes procedimentos permitem sanar a principal crítica feita aos modelos termo-hidromecânicos do estado da arte, que é a sua complexidade e dificuldade em se obter parâmetros de entrada confiáveis [25].

### **3.3.5 Síntese dos Modelos**

A fim de resumir os modelos e apresentá-los de maneira comparativa um quadro resumo é apresentado na Figura 3.7.

Modelo de Bažant	
Sistema de Equações:	Equações Intermediárias::
$\frac{\partial \tilde{\rho}_c}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_m + \frac{\partial \tilde{\rho}_d}{\partial t}$ $\rho C_p \frac{\partial T^*}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + C_l \cdot \vec{J}_m \cdot \nabla T + \Delta H_s \frac{\partial w}{\partial t}$	$\vec{J}_m = -\left(\frac{\kappa}{g} \nabla p_v\right)$ $\Delta H_s = \Delta H_{vap} + \Delta H_{ad}$
*Variáveis Primárias	
Modelo de Tenchev	
$\frac{\partial (\epsilon_g \tilde{\rho}_a)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_a$ $\frac{\partial (\epsilon_g \tilde{\rho}_v)}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho}_l}{\partial t} - \frac{\partial \tilde{\rho}_d}{\partial t} = -\nabla \cdot (\vec{J}_v + \vec{J}_l)$ $(\overline{\rho C_p}) \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T)$ $+ \Delta H_{vap} \nabla \cdot \vec{J}_l - (\overline{\rho C_p \vec{v}}) \cdot \nabla T$ $+ \Delta H_{vap} \frac{\partial \tilde{\rho}_l}{\partial t} + (\Delta H_d + \Delta H_{vap}) \frac{\partial \tilde{\rho}_d}{\partial t}$	$\vec{J}_a = \epsilon_g \tilde{\rho}_a \vec{v}_g - \epsilon_g \tilde{\rho}_g D_{AV} \nabla \left(\frac{\tilde{\rho}_a}{\tilde{\rho}_g}\right)$ $\vec{J}_v = \epsilon_g \tilde{\rho}_v \vec{v}_g - \epsilon_g \tilde{\rho}_g D_{AV} \nabla \left(\frac{\tilde{\rho}_v}{\tilde{\rho}_g}\right)$ $\vec{v}_g = \left(-\frac{K K_g}{\mu_g} \nabla p_g\right)$ $\vec{J}_l = \tilde{\rho}_l \left(-\frac{K K_l}{\mu_l} \nabla p_l\right)$ $\overline{\rho C_p \vec{v}} = \tilde{\rho}_l C_l \vec{v}_l + (\tilde{\rho}_v C_v + \tilde{\rho}_a C_a) \epsilon_g \vec{v}_g$
Modelo de Gawin	
$\frac{\partial (\epsilon_g \tilde{\rho}_a)}{\partial t} + \tilde{\rho}_a S_g \nabla \cdot \vec{u} + \tilde{\rho}_a \beta_s (1 - \phi) S_g \frac{\partial T}{\partial t}$ $- \tilde{\rho}_a \frac{\dot{m}_d S_g}{\rho_s} - \tilde{\rho}_a \frac{(1 - \phi) S_g}{\rho_s} \frac{\partial \rho_s}{\partial \Gamma_d} \frac{\partial \Gamma_d}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}_a$ $\frac{\partial (\epsilon_g \tilde{\rho}_v)}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho}_l}{\partial t} (\tilde{\rho}_l S_l + \tilde{\rho}_v S_g) \nabla \cdot \vec{u} - \beta_{slg} \frac{\partial T}{\partial t}$ $- (\tilde{\rho}_l S_l + \tilde{\rho}_v S_g) \frac{(1 - \phi)}{\rho_s} \frac{\partial \rho_s}{\partial \Gamma_d} \frac{\partial \Gamma_d}{\partial t}$ $- \frac{\dot{m}_d}{\rho_s} (\tilde{\rho}_l S_l + \tilde{\rho}_v S_g) + \dot{m}_d = -\nabla \cdot (\vec{J}_v + \vec{J}_l)$ $(\overline{\rho C_p}) \frac{\partial T}{\partial t} + (\tilde{\rho}_l C_l \vec{v}_l + \tilde{\rho}_g C_g \vec{v}_g) \cdot \nabla T - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = -\dot{m}_{vap} \Delta H_{vap}$ $+ \dot{m}_d \Delta H_d$ $\nabla \cdot (\mathbf{t}_{Total}) + \rho \vec{g} = 0$	$p_c = p_g - p_l$ $\vec{J}_a = \epsilon_g \tilde{\rho}_a \vec{v}_g - \epsilon_g \tilde{\rho}_g D_{AV} \nabla \left(\frac{\tilde{\rho}_a}{\tilde{\rho}_g}\right)$ $\vec{J}_v = \epsilon_g \tilde{\rho}_v \vec{v}_g - \epsilon_g \tilde{\rho}_g D_{AV} \nabla \left(\frac{\tilde{\rho}_v}{\tilde{\rho}_g}\right)$ $\vec{v}_g = \left(-\frac{K K_g}{\mu_g} \nabla p_g\right)$ $\vec{J}_l = \tilde{\rho}_l \left(-\frac{K K_l}{\mu_l} \nabla p_l\right)$ $\overline{\rho C_p \vec{v}} = \tilde{\rho}_l C_l \vec{v}_l + (\tilde{\rho}_v C_v + \tilde{\rho}_a C_a) \epsilon_g \vec{v}_g$

Figura 3.7: Resumo dos sistemas de equações e variáveis primárias dos modelos de Bažant (monofásico), Tenchev (multifásico que desconsidera a pressão capilar) e Gawin (multifásico que considera a pressão capilar). Em azul, as variáveis primárias são apresentadas.

### 3.4 *Datamining* da Bibliografia

A bibliometria consiste no estudo quantitativo de produções acadêmicas e patentes a fim de se obter informações sobre o estado de uma determinada área de estudo, colocando em perspectiva países em relação ao mundo, uma instituição em comparação com aqueles de seu país ou ainda contextualizando determinados autores ou grupo de autores em relação a toda a comunidade referente a tal campo de atuação [56, 57].

O principal produto do trabalho científico se traduz em produções literárias como artigos em revistas científicas, resumos em congressos e livros, o que permite a difusão de descobertas, correções e contrapropostas, além de efetivamente documentar conclusões cientificamente fundamentadas [56]. Consequentemente, o uso de bases de dados para o estudo de uma comunidade pode ser de papel fundamental para se traçar não só um panorama da situação atual, como também obter tendências futuras [57].

Nesse contexto, a base de dados bibliográfica multidisciplinar Scopus [58] acaba sendo uma ferramenta importante. A possibilidade de se realizar buscas em seu acervo de aproximadamente 69 milhões de trabalhos científicos permite a obtenção de buscas abrangentes sobre determinados tópicos. Tais pesquisas podem levar em consideração a busca por termos presentes nos títulos, resumos e *key-words*, além de ser possível especificar o intervalo de tempo desejado, áreas específicas da ciência e o tipo do registro bibliográfico.

Recorrendo às linguagens de programação orientadas ao objeto, como Python [59], é possível preparar gráficos da evolução do uso de determinadas *key-words*, presença dos trabalhos em certos *journals* além de estabelecer grafos entre as *key-words* conforme descrito na Seção 4.6.

Esta ferramenta foi empregada no presente trabalho, visando complementar a revisão bibliográfica efetuada e para traçar panoramas sobre o estado da arte do tema de estudos de secagem de concretos refratários a partir de modelos computacionais.

Por fim, no intervalo entre a escrita do projeto de mestrado para o exame de qualificação e a redação da presente dissertação, foram encontrados novos

estudos de destaque nesta área do conhecimento, nominalmente, i) estudos buscando o desenvolvimento de sensores de umidade para materiais refratários, ii) novos ensaios realizados utilizando tomografia de nêutrons e iii) estudos que acoplam CFD e FEM.

O projeto CUBISM é um projeto europeu que visa o aumento da competitividade das indústrias consumidoras de materiais refratários por meio do desenvolvimento de sensores de ondas acústicas superficiais para a aquisição de pressão e umidade relativa em materiais porosos até a temperatura de 500°C [60, 61]. Além de aspectos experimentais o projeto também tem envolvido simulações baseadas no método de elementos discretos [62], entretanto, deve-se notar que o modelo desenvolvido não contempla o transporte mássico, capturando apenas os efeitos termomecânicos. Estes estudos podem ser promissores e devem ser acompanhados por todos os pesquisadores e usuários de materiais refratários monolíticos.

Além dos trabalhos desenvolvidos no projeto CUBISM, Tengatinni et al. [63] apresentaram um novo estudo buscando aprimorar o arranjo experimental para a realização de tomografia de nêutrons a fim de evitar o fluxo mássico na direção radial das amostras cilíndricas, o que somado ao efeito de *beam hardening* (isto é, efeito de filtragem dos feixes de nêutrons menos energéticos, havendo uma maior detecção dos nêutrons mais velozes) inviabiliza análises quantitativas sobre a quantidade de água no interior da amostra [11, 23]. Para tanto, revestimentos de quartzo e titânio foram testados, resultando em uma redução, porém ainda incompleta do fluxo radial. Além destas análises, o efeito das fibras poliméricas foi examinado, identificando que estas reduzem consideravelmente o tempo para a secagem das amostras, bem como o efeito de saturar as amostras com água líquida, que resultou em trincamentos e explosões.

Tais testes representam avanços e abrem novas portas para futuras abordagens, como a execução de um projeto de seleção de materiais para revestir as amostras e impedir o fluxo radial de maneira apropriada, analisar por meio de uma maior resolução espacial o efeito das fibras como canais para a remoção da água, e com a diminuição do tempo de aquisição das tomografias, uma análise

tomográfica do *explosive spalling*.

Por fim, Bernardi et al [64] apresentaram uma metodologia combinada de utilização de simulação por fluidodinâmica computacional e elementos finitos para a avaliação de túneis sob incêndios. Tais modelos são de elevado custo computacional e de grande complexidade envolvendo simulações de meios fluídos e sólidos, mas que trazem vantagens em relação aos ensaios propostos no presente mestrado, como a possibilidade de simular o aquecimento convectivo considerando a geometria da peça (uma vez que, por exemplo, a secagem de um canal de corrida é significativamente distinta de uma panela siderúrgica), e a possibilidade de aplicar fluxos térmicos não homogêneos nas interfaces sólidos-fluído.

Para estudos futuros, a estratégia de simular o aquecimento de todo um equipamento refratário de forma virtual, podendo verificar parâmetros como efeito da mistura de gases para a combustão, localização da chama, e o próprio procedimento de secagem, simbolizam e sintetizam a essência da Indústria 4.0, tão necessária para a otimização dos processos industriais e a competitividade econômica das empresas envolvidas.

## 4 MATERIAIS E MÉTODOS

O presente trabalho buscou alcançar o objetivo proposto de avaliar os diferentes modelos passíveis de serem utilizados para a previsão do comportamento durante a secagem de refratários monolíticos (ver Seção 2) a partir de duas estratégias principais: (i) revisão sistemática da literatura por meio de ferramentas bibliométricas e (ii) comparação direta dos modelos implementados em elementos finitos usando a plataforma FEniCS [65].

Dessa forma, esta seção apresenta a metodologia usada para a implementação dos modelos e a abordagem empregada no estudo da bibliografia relacionada ao tema. Inicialmente, parte-se de uma breve introdução da metodologia numérica de elementos finitos e em seguida se apresenta a estrutura geral do modelo. A implementação dos modelos mono ou multifásicos seguem uma mesma lógica, porém a fim de manter a presente dissertação concisa, maiores detalhes poderão ser encontrados nas referencias originais. A metodologia de pós-processamento também é descrita e por fim a estratégia desenvolvida para efetuar o *data mining* da literatura é apresentada.

### 4.1 Modelos Numéricos

#### 4.1.1 Equações de Conservação

As equações que regem o modelo em escala macroscópica são originadas a partir das leis de conservação de massa e de energia considerando um elemento de volume infinitesimal de um meio contínuo homogenizado (uma vez que o problema é multifásico devido a microestrutura dos concretos). Em modelos nos quais se considera as tensões mecânicas, uma terceira lei é considerada, a de conservação de momento. O resultado é um sistema de equações parciais diferenciais e um conjunto de condições de contorno, e, devido sua natureza transiente (i.e. há evolução temporal das quantidades de interesse), um conjunto de condições iniciais. Para a solução deste sistema utiliza-se o método dos elementos finitos na discretização espacial e diferenças finitas na discretização temporal.

Retomando as equações do modelo de Bažant, 3.9 e 3.10, se tem uma equa-

ção decorrente do balanço de massa e outra decorrente do balanço de energia. As variáveis primárias são a pressão,  $P$ , e a temperatura,  $T$ . Antes de prosseguir para as discretizações, uma revisão da lógica por trás do método dos elementos finitos é apresentada.

#### 4.1.2 Método dos Elementos Finitos

A presente seção busca introduzir alguns dos importantes conceitos referentes ao Método dos Elementos Finitos (FEM). Busca-se balancear a exposição de conceitos fundamentais com uma maneira sintética de expor tais ideias de modo a ser conciso e ainda manter a didática. Para maiores informações refere-se ao livro-texto de Langtangen et al. [66], de onde a estrutura da presente seção foi baseada.

O procedimento padrão para a modelagem matemática de fenômenos físicos parte de Leis Fundamentais da física (como as leis de conservação de massa,  $\mathcal{M}$ , momento,  $\mathcal{P}$ , e energia interna,  $\mathcal{H}$ ) e de relações características entre estímulos e respostas representadas por equações constitutivas (como a Lei de Hooke em elasticidade linear e a Lei de Fourier em transferência de energia térmica).

Este trabalho envolverá, no caso do modelo de Gong, a resolução de sistemas de equações diferenciais parciais resultantes de duas equações de conservação (são elas, conservação de massa,  $\mathcal{M}$ , e de energia interna,  $\mathcal{H}$ ) e diversas equações de estado, entre elas, as curvas de sorção isotérmicas,  $\phi = f(P, T)$ , a Lei de Fourier para a descrição do fluxo de calor,  $\vec{q}_{\mathcal{H}} = -k\nabla T$  e a Lei de Darcy para a descrição do fluxo de massa,  $\vec{q}_{\mathcal{M}} = -\frac{\kappa}{\mu}\nabla P$ .

As equações diferenciais são os objetos matemáticos mais importantes para a representação matemática de fenômenos físicos inclusive existindo casos de desenvolvimentos matemáticos (em termos de terminologia e técnicas de resolução) resultantes de estudos de problemas físicos [67]. A descrição de taxas temporais ou de gradientes espaciais levam em consideração a ideia do efeito que um pequeno diferencial em uma variável independente (tempo, dimensão em  $x$ ,  $y$ , ou  $z$ ) tem em uma variável dependente (seja um campo escalar, como a temperatura, ou campos vetoriais, como os campos elétricos, campos magnéticos, tensões mecânicas, etc.), com isso permitindo a descrição de fenômenos

no tempo e espaço (por exemplo, como varia a temperatura  $T$  em um pequeno diferencial  $\partial x$ ).

Tais equações podem ser classificadas em equações diferenciais ordinárias (ODE) quando se tem apenas funções de uma única variável independente e suas derivadas, ou em equações diferenciais parciais (PDE) quando se tem funções de várias variáveis independentes e suas respectivas derivadas parciais.

No geral, as ODE's lineares podem ser resolvidas analiticamente, isto é, é possível obter sua solução em uma forma fechada (uma expressão matemática que pode ser avaliada em um número finito de operações algébricas). Por outro lado, as PDE's muitas vezes exigem procedimentos de solução mais complexos, fazendo uso de expansões em séries, análises de similaridade e análises assintóticas [68]. Uma grande complicação de tais métodos é que, em geral, funcionam apenas para geometrias e condições de contorno tão simplificadas ao ponto de se distanciar consideravelmente da realidade (como análises feitas em placas infinitas ou semi-infinitas) de certas aplicações.

Como alternativa a tais métodos, e devido ao avanço da capacidade computacional, os métodos numéricos alcançaram uma elevada relevância [69]. O desenvolvimento de *softwares* comerciais permitiram que tais métodos fossem popularizados mesmo entre usuários que não possuem extenso conhecimento dos detalhes da implementação de tais metodologias. Naturalmente tais *softwares* se especializaram em análises mais usuais, como, por exemplo, cálculos de análises estruturais, análises térmicas e fluido-dinâmicas. Dessa forma, casos mais específicos onde se tem o acoplamento de vários fenômenos (como o acoplamento do transporte de massa e de energia necessárias ao presente trabalho) não são implementados.

Assim, justifica-se o desenvolvimento de um modelo baseado na metodologia dos elementos finitos, uma das mais comuns estratégias de solução de PDE's e ODE's por meio do uso de uma malha para representar domínios com geometrias complexas. Para tanto, será utilizado a plataforma FEniCS [65] disponível na linguagem Python [59].

### 4.1.3 Métodos de aproximação de funções

A lógica por trás do FEM, é uma metodologia de aproximação já estabelecida que permite a representação de funções aproximadas de uma maneira sistemática por meio de funções de forma sobre uma malha. Considerando maiores detalhes, pode-se resumir o método como:

#### **Definição 4.1.1: Método dos Elementos Finitos (resumo)**

1. Discretização do domínio em elementos finitos
2. Derivação de equações sobre cada elemento da malha seguindo uma metodologia de aproximação
3. Acoplamento das equações locais dos elementos resultando num sistema global de equações (lineares ou não)
4. Imposição de condições de contorno (ajustes nas matrizes e vetores do sistema de equações lineares resultantes)
5. Solução numérica destas equações
6. Pós-processamento dos resultados

O software FEniCS [65] automatiza a grande maioria das etapas listadas, permitindo que o foco seja nas análises dos resultados e suas respectivas interpretações. Assim, a presente seção não abordará aspectos fundamentais (como a abordagem de acoplamento do sistema global ou as metodologias de resolução numérica do sistema), mas automatizados, dando maior enfoque para aspectos que ilustrem os conceitos lógicos por trás da metodologia (como as metodologias de aproximação, algumas funções de elementos finitos e as formulações variacionais). Com tal introdução será possível justificar a escolha de parâmetros do modelo como o tipo de elemento, a malha utilizada, a formulação utilizada, entre outros.

Inicialmente será apresentado e descrito a ideia por trás das metodologias de aproximação, em especial do Método de Galerkin, para poder derivar as equações locais de cada elemento. Existem inúmeras variações de tal metodologia,

com alterações pontuais, recebendo nomes distintos. Porém, no presente trabalho foi utilizada a estratégia padrão aqui apresentada.

Antes de introduzir a abordagem para a obtenção de soluções numéricas de equações diferenciais, serão definidas entidades matemáticas a partir da aproximação via método de Galerkin para vetores (de fato, funções podem ser encaradas como vetores que residem em um espaço de dimensões infinitas e, portanto, a aproximação de funções equivale à aproximação de vetores). Isso tornará o procedimento mais fácil de se compreender.

#### 4.1.4 Construção da Aproximação

Para ilustrar a metodologia utilizaremos a aproximação de uma equação trivial:

$$\mathbf{u} = \mathbf{v} \quad (4.1)$$

Tal equação representa a busca pela melhor aproximação do vetor  $\mathbf{v}$ , que reside no espaço vetorial  $V$ , por meio do vetor  $\mathbf{u}$  existente em  $U$ , um subespaço de  $V$ . Existem duas abordagens para encontrar o melhor vetor  $\mathbf{u}$  motivadas por conceitos da álgebra linear que nos permitem formalizar algoritmos para a resolução dessa tarefa. Algumas delas são a metodologia dos mínimos quadrados e a da projeção. Estas são descritas nas Definições 4.1.2 e 4.1.3.

#### Definição 4.1.2: Metodologia dos Mínimos Quadrados

A melhor aproximação de um vetor,  $\mathbf{v}$  se dá quando o vetor erro  $\mathbf{e} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$  (isto é, a diferença entre o vetor  $\mathbf{v}$  e a aproximação  $\mathbf{u}$ ) possui a menor norma (a partir da métrica definida no espaço vetorial em questão) possível, isto é:

$$\frac{\partial e}{\partial c_i} = 0$$

para cada coeficiente  $c_i$  de cada vetor base do subespaço do espaço vetorial  $V$  que abriga  $\mathbf{u}$ .

**Definição 4.1.3: Metodologia da Projeção**

A melhor aproximação de um vetor,  $v$ , se dá quando seu erro, o vetor  $e = v - u$  é perpendicular (o termo mais geral seria ortogonal) ao subespaço ao qual o vetor  $u$  reside, isto é :

$$e \cdot u = 0$$

A metodologia proposta na Definição 4.1.2 é bastante intuitiva, porém, a Metodologia da Projeção pode ser mais complicada de se visualizar. Para tanto, na Figura 4.1 é possível observar como o menor erro entre  $v$  e  $u$  se dá quando o erro  $e$  é perpendicular ao espaço onde  $u$  existe. Observe que a aproximação da figura representa a aproximação de dois vetores bidimensionais existentes em um espaço Euclidiano representado em coordenadas Cartesianas, o que poderá ser generalizado para vetores definidos em espaços de maiores, ou ainda, de infinitas dimensões. Nesse contexto, como funções são vetores, pode-se garantir que ambas metodologias acima definidas também resultarão em metodologias de aproximação de funções (que são vetores, afinal).

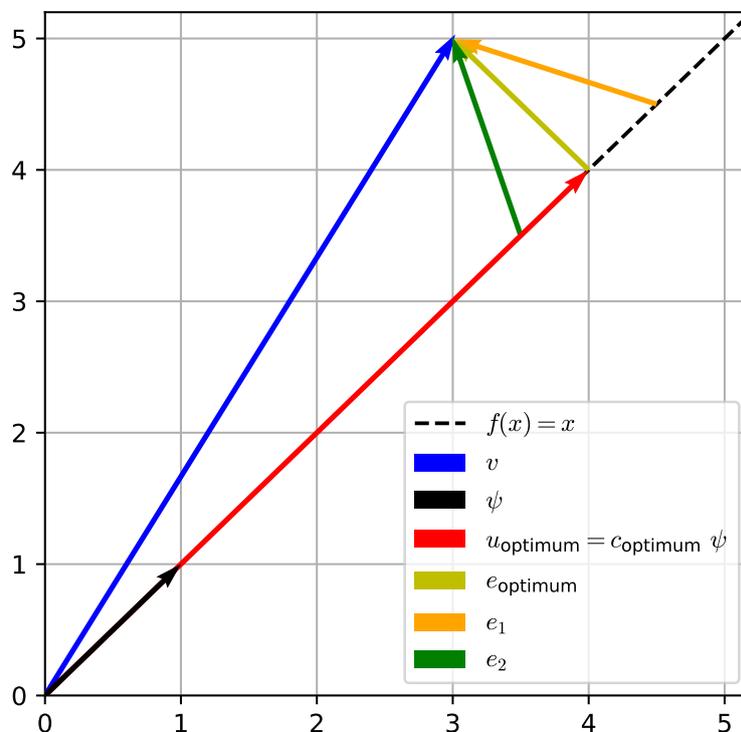


Figura 4.1: Representação da aproximação de vetores bidimensionais em coordenadas Cartesianas.

É evidente que a melhor aproximação  $u_{\text{optimum}}$  resulta no erro de menor norma Euclidiana (comprimento do vetor, seguindo a definição de uma norma em um espaço vetorial Euclidiano), entretanto observe também que o erro ótimo,  $e_{\text{optimum}}$ , é perpendicular a reta onde procuramos o vetor  $u$  que melhor aproxima  $v$ . Lembrando-se da Geometria Analítica, quando dois vetores são perpendiculares seu produto interno é nulo e assim, busca-se  $u$  tal que  $e \cdot u = 0$ .

O matemático russo Boris Galerkin usou deste mesmo princípio para obter a solução de equações diferenciais, definindo o método de Galerkin [70]. É importante notar que, seja na aproximação de vetores euclidianos em 2D, vetores gerais ou funções, ambas metodologias (dos mínimos quadrados e da projeção) são equivalentes, resultando nos coeficientes que formam a combinação linear que gera a melhor aproximação possível de um vetor em um determinado subespaço.

Observe também que um caso especial se dá quando a função que buscamos aproximar reside no mesmo subespaço de busca. Isto é, se ao invés de procurarmos a melhor aproximação de  $v$  na reta  $f(x) = x$ , mas em todo espaço bidimensional, encontraríamos o próprio vetor  $v$  como sua própria melhor aproximação, obtendo um erro nulo. Este cenário é bastante raro, e no caso do FEM, impossível, uma vez que a solução é procurada num espaço discreto, enquanto a solução exata reside num espaço contínuo. Ainda assim, existem teoremas e provas matemáticas que garantem que problemas bem colocados em FEM convergem para a solução exata, quanto mais refinada for a malha (refinamento  $h$ ) ou quanto maior for a ordem do polinômio usado como função base (refinamento  $P$ ) [66].

#### 4.1.5 Funções de forma

Como visto anteriormente nos exemplos de vetores de duas dimensões no espaço Euclidiano, as aproximações de determinado vetor podem ser representadas por intermédio de combinações lineares de coeficientes e vetores bases que definem o espaço vetorial. O que as metodologias de aproximação fornecem são algoritmos que permitem encontrar o conjunto de coeficientes que formam a combinação linear dos vetores base, cujo erro é o menor possível, segundo a Definição 4.1.2, ou que o erro seja ortogonal ao subespaço onde se procura a aproximação, segundo a Definição 4.1.3.

Assim, é evidente que a escolha do espaço de aproximação e de seus vetores base é primordial para que o processo de aproximação seja o mais prático e eficiente possível. Dentre as várias possibilidades, é comum a busca por vetores ortogonais e isso pode ser mostrado pelo apelo que certas funções ortogonais apresentam, como as funções trigonométricas seno e cosseno, que são as bases das aproximações de Fourier.

No caso de tais funções trigonométricas seu domínio é o mesmo que todo o domínio ao qual a função a ser aproximada se estende. Porém, uma estratégia consiste no uso de funções base com suporte compacto, isto é, aquelas que são não nulas apenas em uma porção do domínio, e zero em todo o resto do domínio, essas funções bases são as funções de elemento finito, usadas em

FEM. Além disso, uma outra característica vantajosa destas funções é o fato de que elas apresentam a propriedade de serem uma partição da unidade, isto é, a soma delas resulta em 1 em todo o domínio. Esta característica implica em uma equivalência dos graus de liberdade com os valores dos campos escalares (ou vetoriais) físicos aproximados pelo método, conferindo maior praticidade ao método.

A Figura 4.2 ilustra uma função base de elementos finitos definida por partes e linear (referenciada no presente trabalho como  $P_1$  [71]). Cada nó é associado com uma função desse tipo.

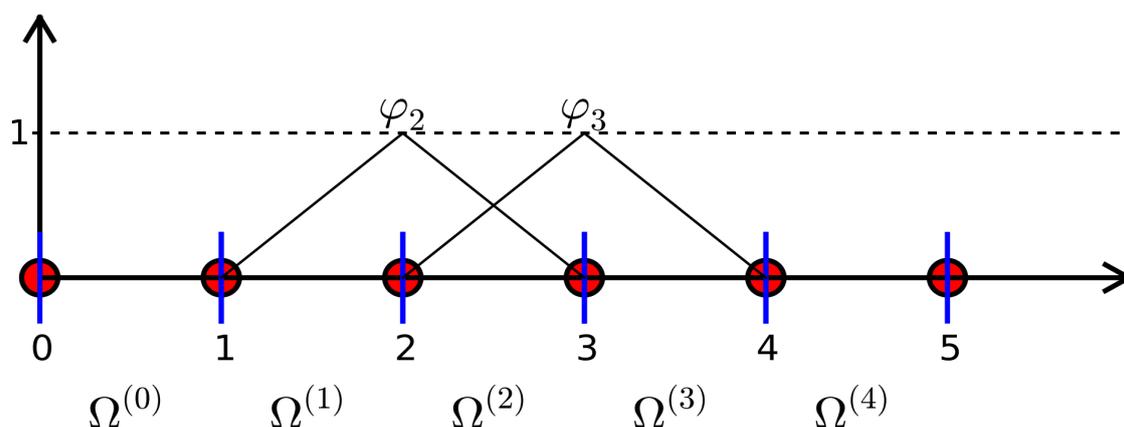


Figura 4.2: Representação de duas funções do tipo  $P_1$ ,  $\varphi_2$  e  $\varphi_3$ , em uma malha unidimensional com 5 elementos  $\Omega^{(i)}$ . Adaptado de [66].

Tais funções são excelentes motivações para a divisão do domínio em uma malha, pois, em cada elemento de determinada malha tem-se funções de forma que são não nulas apenas nessa região do domínio. A vantagem é que se pode definir domínios complexos de uma maneira sistemática, onde a convergência é obtida conforme a malha se torna mais refinada (isto é, com maior número de elementos representando o domínio). Além disso, pode-se obter matrizes que são diagonais durante a resolução numérica, o que facilita tal processo (do ponto de vista do custo computacional).

#### 4.1.6 Malha

A malha é uma partição do domínio em elementos cuja intersecção é nula e cuja união resulta exatamente no domínio. O conceito mais generalizado de um

elemento finito é apresentado na Definição 4.1.4.

**Definição 4.1.4: Definição Geral de Elemento Finito**

- Um elemento finito é uma célula em um sistema de coordenadas locais de referência cujos limites são chamados de vértices;
- Em cada célula se define um conjunto de funções base do tipo de elementos finitos e um conjunto de graus de liberdade, isto é, quantidades que se busca calcular (por exemplo, a temperatura em determinados pontos ao se resolver a equação de calor);
- Finalmente define-se um mapa entre os graus de liberdade locais (de dentro do elemento) e os globais (definidos em todo domínio). Tal mapa serve para organizar os resultados obtidos após o cálculo;
- Define-se um mapa geométrico entre a célula e o domínio físico (qual posição no sistema de coordenadas locais corresponde a determinado ponto nas coordenadas globais).

A princípio pode-se parecer que tais definições acabem tornando o método apenas mais complexo e abstrato. Porém, tal abstração garante que a metodologia de resolução no elemento seja feita individualmente, elemento a elemento (inclusive usando as mesmas equações, pois usa-se o mesmo elemento de coordenadas de referência em todas as células da malha), sem considerar as especificidades referentes a geometria.

Isto facilita a generalização do método e, aliada a facilidade de implementação computacional, justifica a maior popularidade de FEM em relação a outros métodos como os métodos de diferenças finitas, FDM, e volumes finitos, FVM (também verificado na Figura 5.2 (c)). Após o cálculo em cada um dos elementos se realiza o processo de *assembly* (montagem) onde se une as informações de cada elemento obtendo os graus de liberdade em toda a malha, e por meio de interpolações, de todo o domínio.

Assim, é possível definir a malha e os elementos, independentemente do problema físico a ser resolvido. No caso da plataforma FEniCS, uma vez definido

a malha, o subespaço de funções onde se buscará a melhor aproximação, e os elementos a serem utilizados, a resolução do sistema de equações pode ser montada a partir da forma variacional do problema físico.

#### 4.1.7 Forma variacional

Todo problema matemático onde se busca encontrar uma função que satisfaça uma equação diferencial (ou um sistema de equações diferenciais) pode ser apresentado de três maneiras distintas. A primeira forma é a forma diferencial, que é a maneira mais tradicional de representar um problema. A segunda, é a partir da consideração da estratégia de aproximação via Galerkin, onde se usa a propriedade da ortogonalidade do erro mínimo com o subespaço para buscar a melhor aproximação para definir o problema (a forma variacional). Por fim, há ainda a formulação extremal, na qual procura-se minimizar um funcional, isto é, uma função que tem como argumento uma função e retorna um escalar.

Para poder utilizar o método de Galerkin o problema precisa ser reformulado de uma maneira específica, chamada de "Forma Fraca" ou "Forma Variacional". Esta reformulação é necessária para poder resolver um problema definido em um espaço com dimensões infinitas (o espaço do problema físico em si, definido por meio das leis fundamentais e equações de estado em um domínio contínuo) em um espaço de dimensões finitas (o subespaço discretizado onde se buscará a solução).

Há também uma motivação referente ao fato de que as funções de elemento finito (em especial as funções polinomiais por partes da família  $P$ ) são apenas funções de classe  $C^0$ , isto é, suas derivadas não são diferenciáveis. Dessa maneira, a representação de operadores laplacianos ( $\nabla^2$ ) por meio dessas funções seria problemático (uma vez que operadores laplacianos envolvem segundas derivadas, que em funções  $C^0$  não existem). Assim, ao utilizar a identidade de Green (integração por partes em múltiplas dimensões) em um termo laplaciano, uma das derivadas é "transferida" para a função teste, requerindo apenas a primeira derivada das variáveis primárias (aproximadas pelas funções de elemento finitos de classe  $C^0$ ).

Para ilustrar tal conceito será apresentado um exemplo com a equação de

Poisson  $\nabla \cdot (k \nabla u) = f(x)$ , conforme Cummings propõe [72] (o leitor é referenciado a tal trabalho para maiores detalhes, como a solução em si). Este é um problema de valor sobre um contorno e portanto deve-se considerar um conjunto de condições de contorno. Para simplificar será assumido que o domínio do problema é unidimensional e que o termo laplaciano é negativo. Também será considerado que o contorno do problema ( $\Gamma$ ) se divide em uma porção cujo valor da derivada da variável  $u$  é fixo (condição de Neumann),  $\Gamma_N$ , e outra porção onde o valor da variável  $u$  é fixo (condição de Dirichlet),  $\Gamma_D$ . Assim, tem-se o seguinte problema:

#### Problema 4.1.1: Forma Diferencial

Encontre  $u \in U$  tal que  $u = g_D$  em  $\Gamma_D$ ,  $k \frac{du}{dx} = g_N$  em  $\Gamma_N$  e que satisfaça:

$$-\frac{d}{dx} \left( k \frac{du}{dx} \right) = f(x) \text{ em } \Omega \quad (4.2)$$

A equação 4.2 e as condições de contorno propostas compõe a formulação diferencial, também chamada de forma forte do problema (observe a existência de uma derivada de segunda ordem da variável primária  $u$ ). Para aplicar a metodologia dos elementos finitos é necessário postular o problema em sua forma variacional (também chamada de forma fraca). Para tanto a Equação 4.2 é multiplicada por uma função teste  $\psi$ , definida no subespaço onde se busca a aproximação, e integrada ao longo de todo domínio  $\Omega \in (0, l)$ :

$$-\int_{\Omega} \frac{d}{dx} \left( k \frac{du}{dx} \right) \psi d\Omega = \int_{\Omega} f(x) \psi d\Omega \quad (4.3)$$

Aplicando a identidade de Green ao termo do lado esquerdo, chegamos na formulação variacional.

#### Problema 4.1.2: Forma Variacional

Encontre  $u \in V$  tal que  $u = g_D$  em  $\Gamma_D$ ,  $k \frac{du}{dx} = g_N$  em  $\Gamma_N$  e que satisfaça:

$$\int_{\Omega} k \frac{du}{dx} \frac{d\psi}{dx} d\Omega - \left[ k \psi \frac{du}{dx} \right]_0^l = \int_{\Omega} f \psi d\Omega \quad (4.4)$$

Essa formulação é “enfraquecida” no sentido de que as condições de conti-

nuidade para a aproximação é menor do que a continuidade da solução exata, facilitando, assim, o uso de funções de elementos finitos para sua aproximação. Além disso, no processo de obtenção da forma fraca, os termos laplacianos de ordem reduzida a partir da identidade de Green, fornecem uma maneira fácil de se aplicar as condições de contorno de Neumann (também conhecidas como condições Naturais, uma vez que surgem naturalmente na forma variacional). Isto facilita a implementação computacional.

Também observe que levando todos os termos do Problema 5.1.2 para o lado esquerdo (obtendo o que se chama de resíduo,  $R = 0$ ), e considerando a integral do produto da equação diferencial com a função teste ( $\psi$ ) como uma generalização do produto interno entre vetores cartesianos, estaria sendo resolvido o mesmo problema de aproximação da Metodologia de Projeção apresentada na Definição 4.1.3

Uma vez munido de tal formulação, é possível implementar o problema na plataforma FEniCS. Para tanto, pode-se seguir o fluxograma representado na Figura 4.3, onde a introdução da forma variacional é feita a partir da definição do resíduo.

Considerando as etapas descritas na Figura 4.3, inicialmente se define a malha de elementos finitos. Esta pode ser construída por meio de funções próprias da biblioteca FEniCS, recorrendo à biblioteca *mshr*, (um dos componente integrante do FEniCS), ou sendo importada de ferramentas especializadas como Gmsh [73] ou softwares comerciais como Abaqus [74].

Em seguida, define-se contornos por meio de marcações na malha. Tal estratégia é de grande importância, pois, assim pode-se definir múltiplas condições de contorno independentes. Para tanto, utiliza-se uma função que atribui um valor para cada elemento pertencente para cada porção do contorno.

Uma vez escolhido os domínios, subdomínios e os contornos, define-se medidas (os infinitesimais -  $dx$ , por exemplo - usados nas integrais são generalizados como medidas de Lebesgue [75], portanto, a nomenclatura adotada por FEniCS), que serão fundamentais para definir as integrais (os diferenciais  $dx$  e  $ds$ , que representam uma porção infinitesimal de volume e de superfície quando se trata

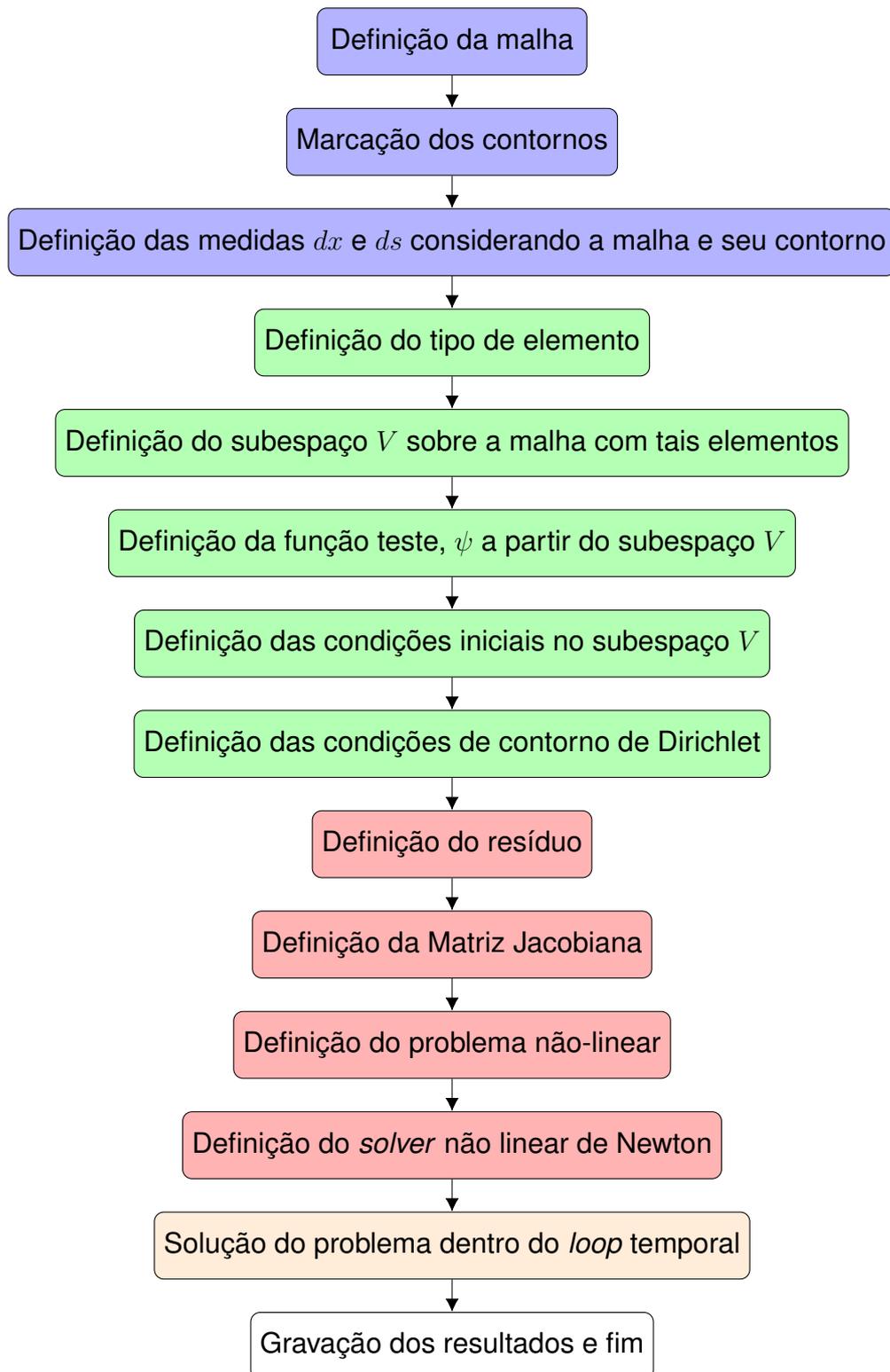


Figura 4.3: Fluxograma de um modelo em elementos finitos implementado em um *script* em FEniCS.

de um domínio tridimensional, respectivamente).

Uma vez completada as etapas referentes a geometria do problema (caixas azuis no fluxograma da Figura 4.3), define-se o subespaço de funções onde será procurado a solução numérica do problema (caixas verdes). Para tanto, se escolhe o tipo de elemento, é fornecida a malha para a criação do subespaço, se determina a(s) função(ões) teste(s), condições iniciais e as condições de Dirichlet.

Em seguida para a construção e resolução do sistema de equações lineares (caixas vermelhas), define-se o resíduo, a partir da formulação variacional. Para a aplicação do método de Newton para a solução de problemas não-lineares, se computa a matriz Jacobiana associada a tal resíduo. O problema não-linear é especificado considerando a forma variacional, as variáveis independentes, a matriz Jacobiana e as condições de contorno do tipo Dirichlet. A última etapa é a declaração do objeto *solver* que de fato montará e resolverá o sistema linear resultante.

Caso o problema seja transiente, um laço temporal é definido, onde se resolve o problema a cada passo de tempo, conforme descrito na caixa laranja do fluxograma. Por fim, os resultados obtidos são gravados para futura visualização e etapas de pós-processamento (a caixa branca).

#### **4.1.8 Formulação com Elementos Mistos**

O método apresentado na seção anterior descreve a metodologia de aproximação de elementos finitos para uma única função. O método pode ser expandido para a busca de mais de uma função e dois espaços de função, como é feito no caso do modelo monofásico, onde se busca uma função que descreve a distribuição da temperatura e outro que descreve a pressão do vapor. Nesse caso ambos os espaços são escalares.

Uma outra forma matemática de se colocar o problema da secagem de concretos refratários pode ser efetuada a partir da adição da velocidade como uma variável vetorial primária de maneira explícita. Dessa forma, o problema numérico passa a envolver campos escalares (temperatura e pressão) e um campo vetorial (velocidade), necessitando então que sejam utilizados uma mescla de elementos finitos de diferentes tipos [70].

Análises funcionais (campo da matemática que considera o estudo dos espaços de funções) preveem, porém, que nem toda combinação de tipos de elementos finitos resulta em um problema bem-posto, assim, existem certas combinações propostas por diferentes pesquisadores que são reconhecidamente robustas e capazes de serem utilizadas para a resolução de um problema em sua formulação mista [76]. Um exemplo notável é o conjunto de elementos de Raviart-Thomas, o qual foi aplicado para a descrição do modelo de Gong em sua formulação mista. As Equações 4.5 - 4.7 descrevem o novo sistema de equações:

$$\frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} = -\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} + \frac{\partial \bar{\rho}_d}{\partial t} \quad (4.5)$$

$$\bar{\mathbf{u}} = -\frac{\kappa}{g} \nabla p_v \quad (4.6)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + C_l \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla T + \Delta H_s \frac{\partial \bar{\rho}_e}{\partial t} \quad (4.7)$$

A fim de manter o presente trabalho conciso, a presente seção não descreverá os pormenores da metodologia, como a seleção dos elementos e os ajustes nas condições de contorno. Para maiores detalhes o leitor é referenciado para o artigo submetido por Moreira et al. [77].

A principal vantagem desta abordagem é que a sua utilização é localmente conservativa (por definição), sendo neste aspecto equivalente ao método dos volumes finitos. A formulação tradicional de elementos finitos, por outro lado, não apresenta este aspecto, podendo prever oscilações espúrias na massa de um determinado elemento. Este aspecto, em condições extremas (elevada taxa de aquecimento, alto grau de não linearidade dos parâmetros, descontinuidades nos domínios, entre outros) pode comprometer a convergência numérica do modelo ou ainda inutilizar os resultados.

Dessa forma, no presente trabalho, esta metodologia foi utilizada para simular o caso de um acidente durante a secagem de um concreto refratário, onde a curva de aquecimento não obedeceu ao protocolo previamente definido, gerando um rápido aquecimento (seguindo a curva de incêndio definida pela ISO 834

[78]), em concretos apresentando fibras poliméricas como aditivos.

## 4.2 Equações Constitutivas, Condições Iniciais e de Contorno de Gong

As equações constitutivas utilizadas para a validação do modelo monofásico proposto são baseadas nos parâmetros de um material refratário apresentado por Gong [79], o qual possui a curva de sorção e a permeabilidade referenciadas do trabalho de Bažant [7] (ajustados para um material refratário) e as outras propriedades constantes em função da pressão e temperatura (uma simplificação, que facilitava a implementação numérica). As explicações físicas por trás de tais parâmetros está além do escopo da presente dissertação. Dessa forma, para maiores detalhes das suposições semi-empíricas propostas por Bažant et al. é sugerido ao leitor os seguintes trabalhos [7, 17]. Os parâmetros com valores constantes podem ser encontrados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Parâmetros utilizados no benchmark de Gong et al. [79], equações constitutivas, condições iniciais e de contorno.

Parâmetros	Valores
Condutividade térmica do concreto, $\lambda$	1,67 W/(m K)
Densidade do concreto, $\rho$	2000 Kg/m <sup>3</sup>
Calor específico do concreto, $C_{p,c}$	1100 J/(Kg K)
Calor específico da água, $C_{p,w}$	4100 J/(Kg K)
Entalpia de desidratação, $\Delta H_d$	0 J/Kg
Aceleração da gravidade, $g$	9,81 m/s <sup>2</sup>
Permeabilidade inicial, $\kappa$	1x10 <sup>-12</sup> , m/s
Quantidade de cimento na composição, $w_c$	300 kg/m <sup>3</sup>
Saturação com água líquida em CNTP, $w_0$	100 kg/m <sup>3</sup>

As propriedades dependentes das variáveis primárias são apresentadas a seguir. A curva de sorção se dá por meio de relações semi-empíricas obtidas por Bažant como uma função definida em dois regimes distintos, a região na qual o concreto está insaturado de água (umidade relativa menor que 100%,  $h(P, T) \leq 0,96$ ) e a região super saturada ( $h(P, T) \geq 1.04$ ), além disso define-se

uma região de intervalo que interpola linearmente tais valores:

$$w(p_v, T) = \begin{cases} w_c \left( \frac{w_0}{w_c} h(p_v, T) \right)^{\frac{1}{m(T)}} & h(p_v, T) \leq 0,96 \\ w_{0,96} + (h(p_v, T) - 0,96) \frac{(w_{1,04} - w_{0,96})}{(1,04 - 0,96)} & 0,96 < h(p_v, T) < 1,04 \\ w_c \left[ 0,037(h - 0,96) + 0,3335 \left( 1 - \frac{T^2}{3,6 \cdot 10^5} \right) \right] & 1,04 \leq h(p_v, T) \end{cases} \quad (4.8)$$

onde na região insaturada ( $h(p_v, T) \leq 0,96$ ),  $w_c$  é a quantidade de cimento em  $\text{kg/m}^3$  de concreto,  $w_0$  é a quantidade inicial de água em  $\text{kg/m}^3$  de concreto e  $\frac{1}{m(T)}$  é uma correlação empírica que envolve a dependência da tensão superficial da água com a temperatura, bem como quaisquer erros experimentais das medidas e das simplificações realizadas.

Segundo Bažant, tal correlação foi obtida a partir de considerações termodinâmicas em um modelo simplificado de um concreto com poros de geometria constante e quantidade de água adsorvida negligenciável. Tal modelo indicou que a variação da quantidade de água livre nos concretos insaturados segue uma lei de potências até o ponto de saturação.

Na definição das curvas de sorção, no intervalo de saturação,  $w_{0,96}$  e  $w_{1,04}$  são funções da temperatura dos valores de água livre no sistema em umidades relativas,  $h(p_v, T)$ , iguais a 0,96 e 1,04, respectivamente. Observe que tal correlação garante apenas uma continuidade por partes das derivadas da curva de sorção. Tal ponto é abordado por outros autores que desenvolveram formas de forçar tanto a continuidade das curvas de sorção bem como de suas derivadas [8, 43, 13].

Por fim, na região super saturada, Gong et al. assume uma simplificação em relação à equação original de Bažant, utilizando parâmetros experimentais cujo sentido físico não é descrito em seus trabalhos, apenas sendo citado uma tese de doutorado [79]. Considerando a abordagem de Bažant, tal propriedade deve ser relacionada com a porosidade do material e a densidade de água [7].

Com relação a permeabilidade do concreto, Bažant a descreve a partir da condutividade hidráulica, que em baixas temperaturas (abaixo de  $95^\circ\text{C}$ ) é controlada pela energia de ativação para o fluxo de massa nas camadas de água

adsorvida na região de empescoçamento ( $f_2(T)$ ) e o próprio transporte de umidade nessa região ( $f_1(h)$ ), conforme apresentado na Equação 4.9.

$$K(P, T) = \begin{cases} K_0 f_1(h) f_2(T) & T \leq 95^\circ\text{C} \\ K_0 f_2(95) f_3(T) & T > 95^\circ\text{C} \end{cases} \quad (4.9)$$

onde,

$$f_1(p, T) = \begin{cases} \frac{1.28929 - 0.013571T}{1 + [4(1 - \phi(p, T))]^4} + 0.013571T - 0.28929 & (\phi(p, T) < 1) \\ 1 & (\phi(p, T) \geq 1) \end{cases} \quad (4.10)$$

e as constantes numéricas foram obtidas empiricamente e representam a largura das regiões de empescoçamento. Além disso, define-se  $f_2(T)$  como uma equação do tipo Arrhenius, com a energia de ativação  $Q = 22437$  J/mol e  $R$  a constante universal dos gases (8,314J/(mol K)):

$$f_2(T) = \exp \left[ \frac{Q}{R} \left( \frac{1}{T_0} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (4.11)$$

Em temperaturas superiores a  $95^\circ\text{C}$ , ainda considera-se o efeito da energia de ativação (para a temperatura de  $95^\circ\text{C}$ , isto é, o termo  $f_2(95^\circ\text{C})$  na Equação 4.9) e uma função que resulte no aumento de duas ordens de grandeza na permeabilidade, decorrente da transição do regime comandado pela energia de ativação do transporte de água adsorvida na região do pescoço, para um controlado pela viscosidade da mistura de água líquida e vapor de água conforme descreve  $f_3(T)$ :

$$f_3(T) = \exp \left( \frac{T - 95}{0.881 + 0.214 (T - 95)} \right) \quad (4.12)$$

onde as constantes numéricas foram determinadas pela interpolação de dados experimentais.

Em seguida, a massa de água liberada pela decomposição dos hidratos (a água quimicamente ligada) é representada pela Equação 4.13, a qual foi obtida a partir da interpolação de resultados experimentais de termogravimetria de uma amostra de concreto previamente seca. Os valores dos coeficientes são descri-

tos na Tabela 4.2.

$$w_d(T) = A_1 + (A_2 - A_1)/(1 + \exp((T - T_0)/dT)) + A_3 T \quad (4.13)$$

Tabela 4.2: Coeficientes usados para a interpolação da água de desidratação  $w_d$ , i.e. Equação 4.13.

$A_1$	$A_2$	$A_3$	$T_0$	$dT$
18.49	-0.57	0.0073	267.85	17.34

Por último, a entalpia de evaporação da água que só possui sentido físico até a temperatura crítica da água, 374.15 °C é descrita pela Equação 4.14

$$\Delta H_e(T) = \begin{cases} 3.5 \times 10^5 (374.15 - T)^{1/3} & (T \leq 374.15 \text{ °C}) \\ 0 & T > 374.15 \text{ °C} \end{cases} \quad (4.14)$$

As condições iniciais utilizadas são temperatura inicial ambiente de 25 °C e pressão de vapor inicial de 2850 Pa, equivalente à assumir uma umidade relativa de 90% no interior da amostra.

Por fim, as condições de contorno variam entre cada um dos quatro casos reproduzidos e são listadas na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Condições de contorno dos 4 casos apresentados propostos por Gong et al. [79].

Caso	Face Quente		Face fria
	Condição de Contorno de Massa	Condição de Contorno de Massa	Condição de Contorno de Temperatura
1	Impermeável	Permeável	Convecção
2	Permeável	Impermeável	Convecção
3	Permeável	Impermeável	Adiabático
4	Permeável	Permeável	Convecção

Sendo que impermeável e adiabático correspondem às Equações 4.15 e 4.16, respectivamente. Já os casos “permeável” e “convecção natural” são representados pelas Equações 4.17 e 4.18. Considerando que em todos os casos a face quente é sujeita a curva de aquecimento descrita por Gong e colegas [79],

onde se tem três regimes sucessivos, um primeiro com taxa de aquecimento de 30°C/h durante 5.83h, o segundo, sendo um patamar de 10h sem aquecimento e o terceiro um aquecimento de 30°C/h durante 14.17h. Em todas as condições escolhidas os coeficientes de película de temperatura e massa são  $\alpha = 1 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$  e  $\beta = 10^{-6} \text{ s/m}$ , respectivamente.

$$-\frac{\kappa}{g} \nabla p_v \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ em } \Gamma_I \quad (4.15)$$

$$-\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ em } \Gamma_A \quad (4.16)$$

$$-\frac{\kappa}{g} \nabla p_v \cdot \mathbf{n} = \beta (p_v - p_{v,\infty}) \text{ em } \Gamma_P \quad (4.17)$$

$$-\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n} = \alpha (T - T_\infty) \text{ em } \Gamma_C \quad (4.18)$$

O domínio simulado é um intervalo unidimensional, com 20cm de comprimento e discretizado com 200 elementos. A implementação utilizando a ferramenta FEniCS considerou elementos lineares do tipo P1. O intervalo de tempo para discretização temporal usado foi de 30s.

### 4.3 Equações Constitutivas, Condições Iniciais e de Contorno de Fey

A presente seção tem como objetivo apresentar as principais equações constitutivas e condições iniciais e de contorno do modelo descrito por Fey. Devido ao grande número de propriedades consideradas nesse modelo, apenas as descrições das principais propriedades do concreto refratário reportado por Fey serão apresentadas. Para os parâmetros físicos amplamente conhecidos (como a densidade da água em função da temperatura, seu calor específico, viscosidade, entre outras), o leitor é referenciado ao trabalho original [13]. Esta estratégia também será adotada na seção a seguir, na descrição das equações constitutivas do modelo de Dal Pont.

O modelo de Fey é multifásico e, portanto, a fase gasosa é descrita explicitamente como uma mistura entre ar seco e vapor de água. Ambos são con-

siderados gases perfeitos, correlacionando assim sua densidade com a pressão parcial de cada fase. O transporte desta mistura de gases se dá tanto por difusão (seguindo a lei de De Groot) quanto ao gradiente de pressão (a lei de Darcy).

Para este último mecanismo, a permeabilidade efetiva da fase gasosa é dada por três componentes, a permeabilidade intrínseca (dependente apenas da temperatura e com unidade de  $m^2$ ), a permeabilidade relativa ao gás (uma função da temperatura e da saturação com água líquida, adimensional, variando entre 0 e 1) e o fator de correção de Klinkenberg.

No trabalho de Fey et al. [13], dois concretos refratários são apresentados, um concreto fictício chamado de “Concreto R” e um concreto real que foi parcialmente caracterizado, referenciado como “Concreto A”. No presente trabalho, a fim de validar a implementação do modelo de Fey, apenas o Concreto R será implementado e, portanto, as propriedades apresentadas se referem a este material. A permeabilidade intrínseca é descrita na Equação 4.19 e a relativa ao gás na 4.20.

$$K(T) = \begin{cases} K_1, & \text{se } T < 185^\circ\text{C} \\ K_1 + \frac{K_2 - K_1}{250 - 185} K_1 (T - 185), & \text{se } 185^\circ\text{C} \leq T \leq 250^\circ\text{C} \\ (K_1 + (K_2 - K_1) K_1) + \frac{K_3 - K_2}{300 - 250} K_2 (T - 250), & \text{se } T > 250^\circ\text{C} \end{cases} \quad (4.19)$$

onde  $K_1 = 4,5 \times 10^{-17} m^2$ ,  $K_2 = 2,5 \times 10^{-16} m^2$  e  $K_3 = 8 \times 10^{-16} m^2$  e a temperatura é dada em graus Celsius.

$$K_{rg}(T, p_v) = (1 - S_l(T, p_v))^n \cdot (1 - S_l(T, p_v)^{1/m})^{2m} \quad (4.20)$$

onde os parâmetros adimensionais usados foram  $m = 0,56$  e  $n = 5,5$ .

Já o fator de correção de Klinkenberg é apresentado na Equação 4.21, com o parâmetro  $b = 0,156\text{MPa}$ .

$$K_k(p_v, p_a) = \left( 1 + \frac{b}{p_g(p_v, p_a)} \right) \quad (4.21)$$

O transporte por líquido é definido por dois mecanismos, o transporte pelo

gradiente de pressão e a partir da difusão de água na camada adsorvida (dada a partir do gradiente da saturação de água adsorvida). Para o fluxo Darciniano, a permeabilidade segue uma formulação similar ao do gás, substituindo-se a permeabilidade relativa do gás pela do líquido, apresentada na Equação 4.22 e com os mesmos parâmetros adimensionais  $m$  e  $n$ .

$$K_{rl}(T, p_v) = (S_l(T, p_v))^n \cdot \left(1 - \left(1 - S_l(T, p_v)^{1/m}\right)^m\right)^2 \quad (4.22)$$

A curva de sorção isotérmica descrita por Fey também é dada como uma função da temperatura e umidade relativa, porém, diferentemente da abordagem adotada por Bažant et al, esta não é definida para valores de umidade relativa maior do que 100%. A sua forma matemática é dada pela Equação 4.23.

$$w(p_v, T) = \begin{cases} (A h^3 + B h^2 + C h) \cdot \frac{\phi(T) \cdot \rho_l(T)}{183,6} & \text{se } h(p_v, T) \leq 0,90 \\ \text{Transição Contínua} & \text{se } 0,90 < h(p_v, T) < 1,00 \\ 0,99 \cdot \phi(T) \cdot \rho_l(T) & \text{se } h(p_v, T) = 1,00 \end{cases} \quad (4.23)$$

onde  $A = 2,42 \times 10^{-4}$ ,  $B = -3,0 \times 10^{-2}$  e  $C = 1,45$  e a “Transição Contínua” é a solução de um sistema linear de 4 equações originadas pela imposição de igualdade dos valores da função e de sua derivada nos extremos ( $h = 0,9$  e  $h = 1,0$ ) por meio de um polinômio de terceiro grau a fim de garantir que a função da sorção seja contínua e apresente derivadas também contínuas.

A condutividade térmica usada é definida a partir da saturação do meio com água líquida e é descrita pela Equação 4.24.

$$\lambda(p_v, T) = \begin{cases} 3 & \text{se } S_l(p_v, T) \leq 0,05 \\ \frac{9-3}{0,475-0,05} (S_l(p_v, T) - 0,05) & \text{se } 0,90 < S_l(p_v, T) < 1,00 \\ 9 & \text{se } S_l(p_v, T) > 0,475 \end{cases} \quad (4.24)$$

A densidade do material é variável e dependente da porosidade. Esta, por sua vez, está relacionada à massa de desidratação do material. Todas estas

correlações estão detalhadas no trabalho original de Fey [13]. Dessa forma, em seguida é apresentado as condições iniciais e de contorno.

Uma vez que as variáveis independentes do modelo de Fey são a temperatura, a pressão de vapor e a pressão do ar, as condições iniciais e de contorno estão relacionadas a estas grandezas. Para o caso da simulação de Fey do Concreto R, a temperatura inicial é de 20 °C, e a pressão parcial de vapor é 2254 Pa (o equivalente para resultar em uma quantidade de água evaporável de 60 Kg/m<sup>3</sup>) e a pressão parcial de ar seco igual a (101325 - 2254) Pa, isto é, o complementar para que a pressão de gás inicial no concreto refratário seja equivalente a uma atmosfera.

Na simulação do Concreto R, o domínio é unidimensional com 15cm de comprimento, e na face esquerda, a temperatura é imposta de acordo com uma curva de secagem com uma taxa de aquecimento de 20 °C por hora durante 24h e um patamar de uma hora em 500 °C. Na face fria, o material é resfriado por convecção natural, conforme descrito pela equação 4.18.

Em ambas as bordas, condições de contorno impostas (do tipo de Dirichlet) são aplicadas para a pressão de vapor e do ar. O valor fixado de pressão de vapor é escolhido a fim de se ter uma umidade relativa de 70% na face, e a pressão do ar seco é o complementar do valor da pressão de vapor a fim de garantir uma atmosfera de pressão de gás nas bordas da amostra.

O caso simulado era composto por 600 elementos lineares do tipo P1, e a discretização temporal empregava intervalos de tempo de 30s.

#### 4.4 Equações Constitutivas, Condições Iniciais e de Contorno de Dal Pont

O modelo de Dal Pont aplicado para a simulação do resultado experimental de Kalifa et al. [80] considera a permeabilidade intrínseca do material como dependente da pressão de gás e da temperatura, conforme descrito na Equação 4.25.

$$K = K_0 \cdot 10^{A_T(T-T_0)} \left( \frac{p_g}{p_{atm}} \right)^{A_p} \quad (4.25)$$

onde  $K_0 = 1 \times 10^{-20} \text{ m}^2$  é a permeabilidade intrínseca em condições ambiente,  $T_0 = 20^\circ\text{C}$ ,  $P_{atm} = 101325 \text{ Pa}$ , e  $A_T = 0.005$  e  $A_p = 0.368$  são constantes determinadas empiricamente.

Na versão que engloba os aspectos termomecânicos, um termo adicional referente ao aumento da permeabilidade com o dano é adicionado. As equações de permeabilidade relativa ao gás e líquido são descritas pelas Equações 4.20 e 4.22, com os parâmetros  $m = 0.6$  e  $n = 0.5$ .

A curva de saturação de Dal Pont não é descrita de maneira implícita, isto é, sua descrição se dá a partir da saturação de líquido,  $S_l$ , multiplicada pela porosidade do material,  $\phi$ , e pela densidade da água  $\rho_l$ . A saturação de líquido do concreto é descrita pelas curvas de retenção medidas experimentalmente da mesma maneira que as curvas de sorção. Matematicamente, as curvas de retenção e de sorção isotérmica são relacionadas pela Equação 4.26.

$$w(p_v, T) = \phi(T) \rho_l(T) S_l(p_v, T) \quad (4.26)$$

Para o caso da simulação do concreto avaliado por Kalifa, as curvas de retenção são semi-empíricas e modeladas pela Equação 4.27.

$$S_l = \left( \left( \frac{E(T)}{a(T)} p_c \right)^{\frac{b}{b-1}} + 1 \right)^{-1/b} \quad (4.27)$$

onde  $E(T)$  representa a influência da temperatura na tensão superficial e é apresentado na Equação 4.28 e  $a(T)$  as mudanças na microestrutura do material com seu aquecimento, Equação 4.29, e  $b = 2.27$  é um parâmetro obtido experimentalmente.

$$E(T) = \begin{cases} \left[ \frac{T_{crit} - T_0}{T_{crit} - T} \right]^N & \text{se } T < 374.15^\circ\text{C} \\ \frac{N}{z} E_0 T + \left[ E_0 - \frac{N}{z} E_0 (T_{crit} - z) \right] & \text{se } T \geq 374.15^\circ\text{C} \end{cases} \quad (4.28)$$

com  $N = 1.2$ ,  $z = 5$  e  $E_0 = 1$  constantes adimensionais empíricas.

$$a(T) = \begin{cases} a_0 & \text{se } T < 100^\circ\text{C} \\ (a_0 - a_1) \left( 1 + 2 \left( \frac{T-100}{T_{cr}-100} \right)^3 - 3 \left( \frac{T-100}{T_{cr}-100} \right)^2 \right) & \text{se } T \geq 100^\circ\text{C} \end{cases} \quad (4.29)$$

onde  $a_0 = 18.62\text{MPa}$  e  $a_1 = 7\text{MPa}$  valores determinados experimentalmente.

A condutividade térmica do material é definida como uma função da temperatura e da saturação, conforme apresentado na Equação 4.30.

$$\lambda(p_v, T) = \lambda_T(T) \left( 1 + 4 \frac{S_l(p_v, T) \phi(T) \rho_l(T)}{(1 - \phi(T)) \rho_s(T)} \right) \quad (4.30)$$

onde a dependência com a temperatura é descrita a partir da Equação 4.31.

$$\lambda_T(T) = \lambda_0 [1 + A_\lambda (T - T_0)] \quad (4.31)$$

Outros parâmetros como a difusividade, as equações que descrevem a desidratação em função da temperatura, a porosidade do material são claramente descritas no trabalho original de Dauti et al. [11]. Considerando as condições iniciais para a reprodução do ensaio realizado por Kalifa, a temperatura inicial é de  $20^\circ\text{C}$ , enquanto que a pressão do gás é  $101325\text{ Pa}$  e a pressão capilar é escolhida a fim de que a umidade relativa no interior do material seja de 50%.

Com relação às condições de contorno, o modelo unidimensional contempla um aquecimento por radiação e convecção com a temperatura da fonte quente dependente do tempo conforme descrito na Equação 4.32. A condição de contorno é dada pela Equação 4.33

$$T_{rad}(t) = \begin{cases} t \left( \frac{460-400}{130} \right) + 400 & \text{se } t \leq 130\text{min} \\ 460 & \text{se } t > 130\text{min} \end{cases} \quad (4.32)$$

onde a temperatura é dada em graus Celsius e o tempo em minutos.

$$\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n} = -h_T (T - T_\infty) - \epsilon \sigma (T^4 - T_\infty^4) \quad \text{em } \Gamma_{hot} \quad (4.33)$$

A face fria da amostra é resfriada por convecção natural e também é descrita

pela Equação 4.18. A pressão do gás em ambas as faces é fixada por meio da imposição do valor de 101325 Pa, utilizando a condição de Dirichlet.

Por fim, na equação de conservação de massa de umidade, se aplica a condição de contorno referente a pressão capilar (a terceira e última variável primária do modelo de Dal Pont). Neste caso, a fim de se utilizar uma grandeza física com claro sentido físico (uma vez que não é possível atribuir sentido físico à pressão capilar na atmosfera ambiente), a condição ambiente é definida por meio da densidade do vapor de água, conforme apresentado na Equação 4.34

$$-m_v \mathbf{v}_{v-s} \cdot \mathbf{n} = \bar{q}_v - h_g (\rho_v - \rho_v^\infty) \quad \text{em } \Gamma_{perm}. \quad (4.34)$$

O domínio simulado foi aproximado por um intervalo unidimensional de 12cm com 240 elementos lineares do tipo P1. O intervalo de tempo usado foi de 30s.

#### 4.5 Visualização dos Resultados

A visualização dos resultados foi feita por meio de duas ferramentas. Para geometrias unidimensionais ou bidimensionais muito simples, scripts em Python [59] foram elaborados para a geração das figuras. Em se tratando de geometrias bidimensionais mais complexas ou ainda tridimensionais, a ferramenta Paraview foi empregada [81].

Focando no caso unidimensional, que é o mais simples possível, cabe se discutir sobre as possibilidades de apresentação dos resultados. A forma mais comum na literatura consiste em apresentar gráficos mostrando os perfis de temperatura e pressão em diferentes instantes de tempo. Entretanto, essa representação dos resultados pode perder momentos cruciais onde pressões máximas não são observadas, pois, escolheu-se traçar perfis antes e/ou após estes momentos. Essa natureza decorre do fato de que o problema é transiente e mesmo que unidimensional no espaço, seu resultado é também dependente do tempo, além de se ter um campo de temperatura e outro de pressão.

Assim, outra possível maneira de apresentação utilizada foi a partir de gráficos de evolução temporal em posições específicas. Nesse caso, perde-se a resolução espacial em favor da resolução temporal (o contrário do que ocorre ao

se apresentar os perfis em diferentes tempos fixos).

Há ainda a possibilidade de se mostrar a evolução temporal da pressão máxima dentro do material (independentemente da posição onde esta ocorre). Tal procedimento pode ser importante para comparar o aspecto de sollicitação mecânica da estrutura como um todo, ou ainda analisar os diferentes casos simulados (como curvas de secagem distintas ou materiais com propriedades diferentes).

Adicionalmente, gráficos de contorno e mapas de calor (cores representando o campo escalar - temperatura ou pressão - e os dois eixos cartesianos relacionados com posição e tempo), gráficos tridimensionais (não escolhidos no presente trabalho dado a dificuldade de interpretação de tais figuras), e animações, amplamente utilizadas em meios digitais (como na defesa desta dissertação) são outras formas de se apresentar os dados obtidos nas simulações.

Por fim, todas essas estratégias podem ser utilizadas para reportar não só os campos escalares das variáveis independentes como também ilustrar quantias intermediárias como a curva de sorção (quantidade de água evaporável presente no sistema), permeabilidade (caso dependa de pressão e temperatura), campos vetoriais dos fluxos, curvas de massa liberada por desidratação, entre outros.

Assim, destaca-se o cuidado em se avaliar o presente fenômeno. Mesmo no caso mais simples (geometria unidimensional), múltiplas formas de visualização de vários parâmetros podem ser adotadas e a análise precisa ser pautada por diversos gráficos distintos, cuidadosamente selecionados, uma vez que o excesso de informação também dificulta interpretações claras dos resultados obtidos.

#### **4.6 *Data Mining***

A revisão sistêmica da literatura pode ser dividida em duas partes distintas. A primeira, usada para a redação da seção Revisão Bibliográfica (Seção 3) do presente projeto de dissertação, é a revisão individual de trabalhos relevantes. Esta etapa foi contínua e foi efetuada até o final do mestrado. Para tanto, as buscas de artigos científicos foram realizadas a partir de termos chave, bem como por citações dos artigos já realizados pelo grupo de pesquisa GEMM na área de secagem.

Além disso, durante toda a duração do mestrado, um alerta automático do Go-

ogle Scholar foi criado a partir de uma busca dos termos relevantes, bem como citações e novas publicações dos autores mais proeminentes de tal área. O objetivo desta etapa da revisão da literatura é o mesmo do proposto em qualquer dissertação de mestrado, ou seja, descrever o estado da arte sobre determinado tópico, identificar potenciais avanços e certificar que a proposta do projeto de dissertação atende uma demanda científica de determinada área do conhecimento.

Já a segunda etapa da revisão sistêmica se deu a partir do uso de ferramentas de bibliometria para poder avaliar um número de trabalhos que seria impossível de ser analisado sem o auxílio de ferramentas computacionais. Para tanto, foi proposto um estudo de *data mining* com o objetivo de auxiliar no entendimento do estado da arte, bem como traçar tendências futuras da área de simulação de concretos (refratários ou civil, uma vez que trabalhos relacionados a ambos foram encontrados).

Assim, a primeira etapa consistiu em coletar as informações bibliográficas dos trabalhos encontrados a partir de uma busca na plataforma Scopus [58]. O termo de busca é apresentado no Código 1 e os resultados obtidos foram exportados para documentos .csv para o pós-processamento por meio da linguagem de programação Python [59] e da ferramenta Gephi para a visualização dos grafos [82]. A identificação de sub-comunidades a partir da análise de modularidade (conforme descrito em Moreira et al. [83]) foi realizada, usando, também, o Gephi.

```
((TITLE-ABS (concrete)
  OR TITLE-ABS-KEY (refractory)
  OR TITLE-ABS-KEY (castable))
AND
(TITLE-ABS-KEY (model*)
  OR TITLE-ABS-KEY (simulation))
AND
(TITLE-ABS-KEY (spalling)
  OR TITLE-ABS-KEY (explosion)
  OR TITLE-ABS-KEY (fire)
  OR TITLE-ABS-KEY (heat*)
  OR TITLE-ABS-KEY (dry*)))
```

Código 1: Busca usada na plataforma Scopus.

O objetivo deste termo de busca foi obter documentos científicos indexados

pela plataforma Scopus que apresentassem os modelos de simulação (segundo bloco da busca) de concretos refratários ou de construção civil (primeiro bloco) sujeitos a incêndios, secagem, explosões e lascamentos (terceiro bloco).

A pesquisa retornou um total de 10.411 documentos com 47 colunas de informações bibliográficas como título, autores, afiliações, referências e etc. A maior parte das análises se concentrou nos resultados dos últimos 25 anos, uma vez que estes representavam 90% do banco de dados, facilitando a avaliação e garantindo que tais resultados ainda fossem relevantes.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1 *Datamining* da bibliografia

A presente seção apresenta os resultados da análise bibliométrica realizada por meio do *datamining* da plataforma Scopus. O objetivo foi identificar tendências recentes, relações entre palavras-chaves, e criar um panorama para pesquisadores iniciantes nessa área, evidenciando o que já foi feito e quais aspectos precisam de maior atenção.

Uma tendência geral das publicações científicas é o seu crescimento anual exponencial [83]. Isso, de fato, foi observado no comportamento da base de dados obtidas pela busca apresentada no Código 1, conforme evidenciado pela Figura 5.1 (a). Ainda assim, observou-se que alguns anos apresentaram uma queda no número de publicações.

A Figura 5.1 (b) apresenta a distribuição de tipos de documento encontrados na literatura. As categorias mais comuns são artigos e anais de congressos, que chegam a ser cinco vezes mais comuns do que os livros e capítulos de livros. Tal resultado é comum nas diversas áreas do conhecimento, uma vez que o principal produto do trabalho científico são artigos e os bancos de dados científicos são menos abrangentes em relação aos livros [84]. Entretanto, essa diferença tão evidente pode sugerir que essa área do conhecimento ainda não está totalmente consolidada, sendo ainda desenvolvida.

Outra informação relevante é a distribuição dos artigos científicos nos diferentes periódicos, uma vez que estes possuem diferentes objetivos e, consequentemente, diferentes públicos. A tendência geral observada é que a maioria dos periódicos são relacionados à construção civil ou a fenômenos de transporte. Jornais específicos voltados à pesquisa de incêndios sugerem que esta seja a aplicação mais comum.

Uma outra forma de avaliar os resultados é por meio da evolução da ocorrência de determinadas palavras-chave escolhidas pelos autores, conforme apresentado na Figura 5.2.

A Figura 5.2 (a) mostra os termos referentes às possíveis aplicação dos mo-

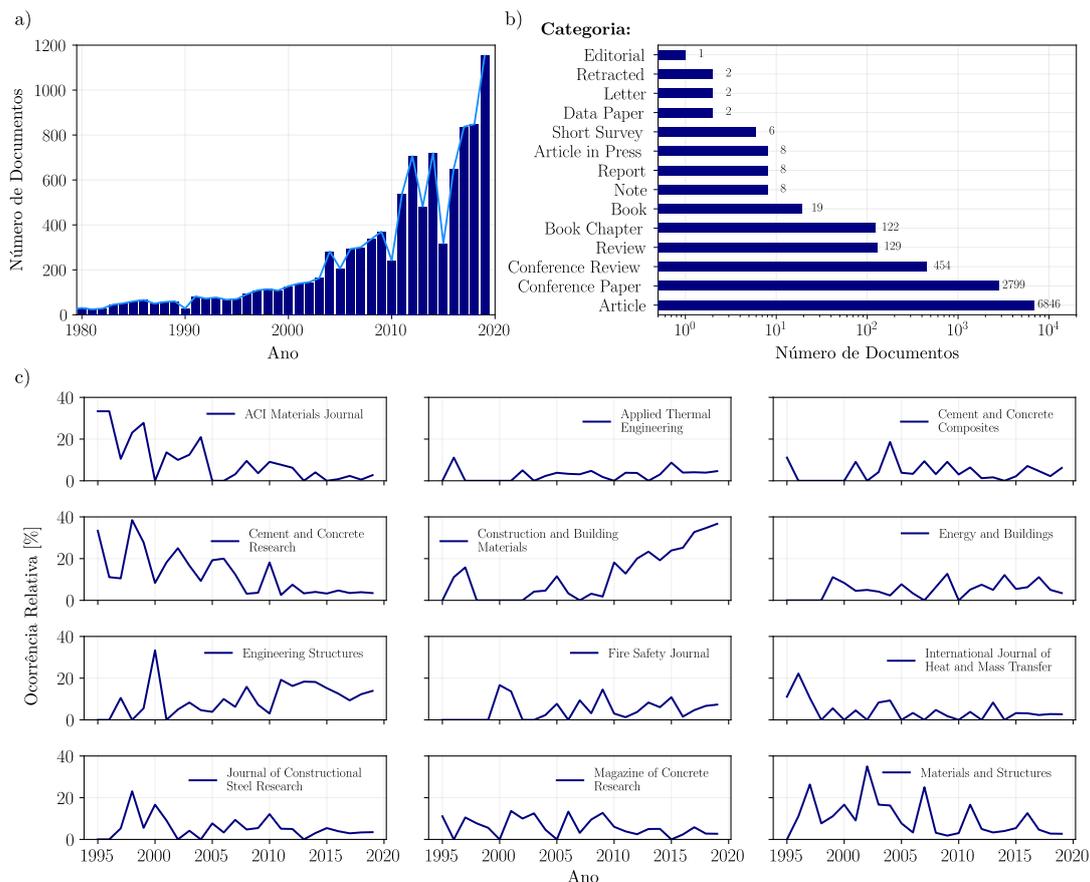


Figura 5.1: Panorama geral do banco de dados obtido a partir da busca descrita na Lista 1. A evolução no número de documentos por ano, e seu tipo são apresentados em (a) e (b), respectivamente. Em (c), lista-se as frequências relativas entre cada um dos doze principais periódicos.

delos. A palavra mais comum foi “Fire”, o que reforça a interpretação de que esta é a aplicação mais comum, especialmente ao se considerar que dos quatro modelos apresentados neste trabalho, três foram desenvolvidos para a simulação de concretos em cenários de incêndios. Os termos “dry” e “nuclear” seguem nesta ordem, demonstrando que o foco continua na simulação de incêndios. Entretanto é notável uma tendência crescente no uso do termo “dry” como palavra-chave.

Um outro aspecto importante é a complexidade do modelo (conforme discutido nas Seções 3.3 e 5.2), o que é diretamente relacionado com os fenômenos físicos considerados ou não nas simulações. A Figura 5.2 (b) indica que os aspectos térmicos são os mais comumente abordados, provavelmente dado sua simplicidade, tanto do ponto de vista de implementação numérica, quanto do ponto de vista de ensaios experimentais por meio do uso de termopares. Logo

em seguida, os aspectos mecânicos seguem como o segundo mais considerado, enquanto que os aspectos hídricos (relacionados ao transporte de massa de água) é o menos comum, o que pode ser explicado pelo elevado número de parâmetros de entrada necessários para sua simulação (ver Tabela 5.1).

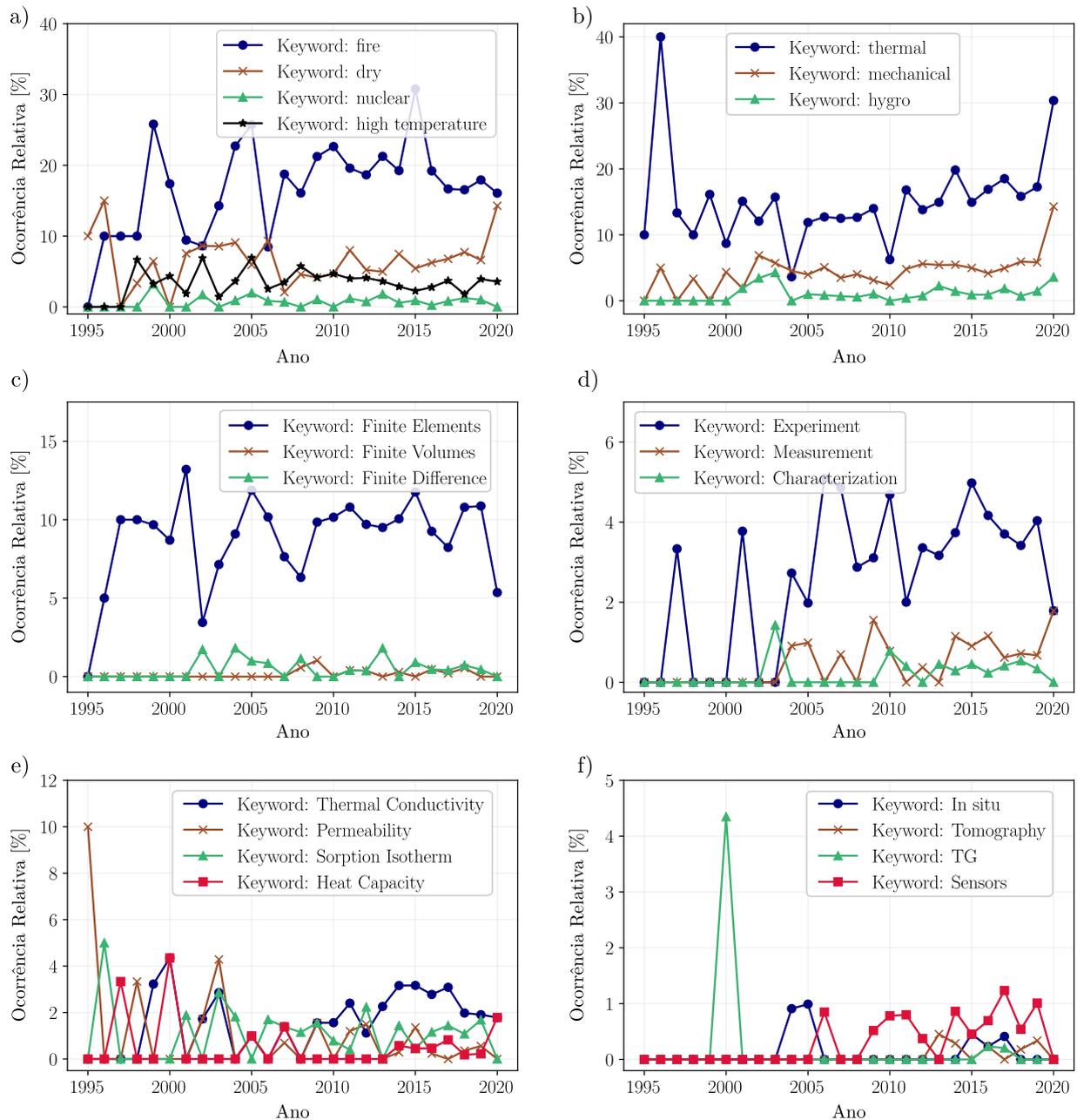


Figura 5.2: Evolução da ocorrência de grupos de palavras-chaves, (a), termos relacionados com a aplicação dos modelos, (b) com os fenômenos físicos considerados, (c), o modelamento numérico empregado, (d) os experimentos realizados ou referenciados, (e) propriedades do material, e (f) os ensaios utilizados. A ocorrência relativa é obtida pela razão entre o número de publicações com tal termo e o número total de publicações de cada ano.

A Figura 5.2 (c) também indica que os modelamentos são em sua maioria desenvolvidos a partir da metodologia de elementos finitos, com poucos casos apresentando o uso do método dos volumes e diferenças finitas. A existência de

diversos softwares para o desenvolvimento de simulações de FEM, aliado com motivações técnicas podem justificar tamanha discrepância.

A fim de avaliar os aspectos experimentais de tais trabalhos, a Figura 5.2 (d) apresenta termos relacionados com os experimentos. A ocorrência de tais termos é consideravelmente menor do que os outros grupos de palavras relacionadas com a simulação em si. Isto pode ser explicado pelos termos de busca empregado (i.e. o segundo bloco do Código 1). Ainda assim, a existência de tais termos mostram a importância de se mensurar de forma confiável e prática os parâmetros de entrada e a realização das metodologias de validação experimental.

Os parâmetros mais importantes resultantes de diversas análises de sensibilidade [85, 13, 12] são a condutividade térmica e a permeabilidade intrínseca do material. O número de estudos com palavras relacionadas a este último, porém, flutuou e atualmente é consideravelmente menor do que o primeiro, conforme apresentado na Figura 5.2 (e). As curvas de sorção isotérmica, que são um dos parâmetros de medida mais complexo, permaneceu constantemente com uma ocorrência relativa em torno de 2 %. Além disso, a popularidade do termo “heat capacity” pode ser explicado devido a presença de estudos de concreto massivo, o que será melhor explicado a seguir.

Finalmente, na Figura 5.2 (f) se apresenta os testes usados para avaliar o comportamento dos concretos e/ou refratários em altas temperaturas. O uso de sensores como termopares e transdutores de pressão foram comumente aplicados nas últimas duas décadas, dentro do ensaio PTM (aquecimento de prismas de concreto por uma de suas faces, onde se mede a pressão, temperatura e massa da amostra). É possível avaliar um pico de trabalhos usando termogravimetria (TGA) por volta dos anos 2000. Além disso, nos últimos 10 anos, estudos tomográficos começaram a ser empregados neste escopo, usando múltiplas técnicas distintas como Tomografia de Nêutrons [55, 24], de raios X [19] e ressonância magnética nuclear [19, 86, 87, 88].

Assim, de forma geral, pode-se concluir que, examinando a evolução da ocorrência dos termos chave, a aplicação mais comum destes modelos é na si-

mulação de incêndios, considerando principalmente aspectos termomecânicos, usando a técnica de FEM. Dessa forma, a comunidade de refratários, buscando estudar o comportamento da secagem de refratários monolíticos, pode se beneficiar de interações com pesquisadores da engenharia civil que modelam concretos a base de cimento Portland em altas temperaturas, dado o grande volume de trabalhos desse grupo e sua comprovada experiência em tal âmbito.

Adicionalmente, maiores esforços considerando os aspectos experimentais, tanto na caracterização quanto na validação dos modelos, são necessários, considerando o ponto de vista científico (fornecendo maiores detalhes nos mecanismos atuantes no processo de secagem) ou o prático (resolvendo desafios reais de parceiros industriais).

Além da evolução temporal da ocorrência de cada palavra-chave individual, uma outra fonte de informação fundamental é a conexão entre cada uma delas, o que pode identificar comunidades que utilizam determinada terminologia em comum, possíveis novas interações que ainda não estão sendo realizadas, e as aplicações específicas de tais modelos.

A análise foi realizada em todos os documentos da categoria “Article” e o campo “Author Key-Words” foi convertido em vetores contendo combinações de cada par de palavra-chave apresentada em determinado artigo. Isto gerou uma lista de arestas, i.e. conexões entre os termos chave, que são os nós do grafo resultante. Uma lista de palavras sem sentido semântico foi feita para filtragem, bem como foram retirados termos como “temperature”, “concrete” e “modelling” a fim de favorecer a análise a partir de terminologia com um conteúdo mais profundo.

A Figura 5.3 apresenta o grafo resultante, exibindo somente palavras que possuíam pelo menos 72 conexões para facilitar a interpretação. Por meio do uso da análise de modularidade do grafo, foi possível identificar 5 comunidades distintas.

A maior comunidade é a classe “Modularity Class 1”, representada em azul, onde a palavra mais comum é FEM (termos equivalentes como “Finite Element Method”, “Finite Element Analysis” e outros, foram combinados neste único nó).



dos concretos (ou refratários) em altas temperaturas

A terceira comunidade mais volumosa é apresentada em verde, a classe “Modularity Class 3”. Ela descreve dois diferentes fenômenos físicos, a corrosão de concreto e a secagem. Entretanto, deve ser salientado que há dois contextos distintos relacionados à secagem. O primeiro, é associado com tal processo em temperatura ambiente de concretos de construção civil (evidenciado por termos como “Hydration” e “Diffusion”), enquanto o segundo contexto é relacionado com a secagem de concretos refratários em seu primeiro aquecimento (indicado pelo termo “Refractory”). Como este termo é compartilhado em ambas as classes de materiais, essa comunidade engloba ambas as subáreas.

As últimas duas comunidades poderiam ser unidas, pois apresentam termos relacionados ao concreto do tipo “Mass Concrete” (concreto massivo), que é uma categoria de estruturas de concreto definida por suas dimensões muito grandes, onde o efeito do calor de hidratação requer medidas específicas [89]. Tais termos são “Hydration heat”, “Temperature field” e “Thermal stress”. A capacidade de simular a transferência de calor nesse contexto pode fornecer informações relevantes para a definição de estratégias de como processar e evitar danos em tais estruturas. Como a influência do transporte de massa no transporte de energia térmica é menor do que o efeito contrário, modelos mais simples de transferência de calor podem ser usados.

Dessa forma, conclui-se que há uma grande variabilidade na área de simulação de estruturas de concreto (ou refratários) em altas temperaturas, apresentando diversas sub-comunidades, onde diferentes aplicações, desafios e necessidades são observadas.

Por consequência, considerando o caso específico da secagem de concretos refratários, a interação com outras áreas de maior experiência na caracterização do material, na realização de ensaios experimentais e em modelamento é de importância enorme para o desenvolvimento de soluções realmente inovadoras baseadas em conhecimento teórico e com grande aplicabilidade no setor industrial.

Assim, a necessidade de se estudar os fenômenos de transporte envolvi-

dos na secagem dos concretos refratários e a pequena quantidade de trabalhos encontrados especificamente nesta área justificam novas investidas a fim de propor avanços científicos e inovações tecnológicas, considerando e tirando proveito das pesquisas já realizadas na área de construção civil e adaptando o modelo que melhor satisfaz a necessidade do presente estudo.

## **5.2 Análise Crítica dos Modelos Matemáticos**

A fim de se realizar uma análise crítica dos modelos matemáticos descritos na Seção 3.3, a presente seção apresenta o resultado da comparação das diferentes hipóteses assumidas por cada autor, suas vantagens, desvantagens, principais contribuições para esta área do conhecimento e as maiores discordâncias entre si. Isto se faz necessário uma vez que cada um deles apresenta diferentes níveis de complexidade, robustez teórica e possíveis resultados a serem avaliados.

Inicialmente, considera-se o modelo desenvolvido por Luikov et al [38] que foi baseado principalmente em metodologias de resolução analítica e de adimensionalização do sistema de equações, resultando em números adimensionais que poderiam ser medidos sistematicamente para diferentes casos de secagem. Assim, considerando as limitações referentes às metodologias de resolução analítica das equações, apenas geometrias simplificadas (como linhas unidimensionais, plano semi-infinitos ou cilindros infinitos) e condições de contorno restritas poderiam ser consideradas em tal modelamento.

A principal contribuição deste trabalho, entretanto, foi prover uma fundamentação teórica para os modelos futuros, sendo um desenvolvimento inovador uma vez que aplicava teorias termodinâmicas ainda recentes (a CIT, que ainda estava sendo consolidada) para o problema de secagem de materiais porosos parcialmente saturados.

Por fim, foi fundamental a percepção da importância das metodologias experimentais para garantir a aplicabilidade do modelo resultante, considerando as limitações das medidas práticas, e como tais restrições impactavam o modelo. Entretanto, durante muito tempo, na área de modelamento de concretos (ou refratários) em alta temperatura, este aspecto foi desconsiderado, até que

finalmente novas metodologias como tomografia de nêutrons e simulações computacionais fossem novamente consideradas de maneira completa por um único grupo de pesquisa [55].

Já avaliando as contribuições de Bažant et al., seu modelo de fase única é, ainda hoje, uma das metodologias mais comumente empregadas [25], devido a suas hipóteses que simplificam o transporte de massa como sendo uma única fase. Ainda assim, este necessita de relações constitutivas semi-empíricas, mas consegue reproduzir resultados de testes experimentais e fornecer a pressão máxima no poro com certa confiabilidade, o que é uma informação crucial para desenvolver o aquecimento inicial de refratários monolíticos, por exemplo.

Maiores informações relacionadas aos diversos mecanismos de transporte de massa e energia das múltiplas fases não podem ser obtidos por este modelo, limitando e até evitando seu uso para o entendimento de detalhes dos fenômenos físicos envolvidos. Por fim, o impacto de medidas imprecisas na caracterização do material de interesse pode ter um efeito mais pronunciado do que nos modelos multifásicos, uma vez que este depende de um menor número de parâmetros de entrada. Portanto, seu uso deve ser aliado com as melhores medidas possíveis, principalmente dos parâmetros de maior sensibilidade.

O modelo de Tenchev [8], que foi publicado após as contribuições de Gawin et al, [9], pode ser visto (fora da ordem cronológica) como uma ponte entre os modelos monofásicos e os termohigromecânicos multifásicos. Ele descreve a umidade por mais de uma fase, o que melhora sua acurácia da representação da física do problema. Ainda assim, sem as contribuições de Davie - que tornaram o modelamento mais robusto - [43], este ainda apresenta inconsistências termodinâmicas.

Em todo caso, ele é um modelo que foi validado com resultados experimentais que descreve os perfis de pressão no interior do material de maneira satisfatória (aqui deve-se ressaltar que Tenchev et al. não consideravam os possíveis erros de medida dos ensaios de PTM, conforme reportado por Dauti et al. [24]) [8, 45]. Este modelo ainda pode ser expandido a fim de englobar os aspectos termomecânicos [46], reproduzindo comportamentos experimentais observados que não

eram previstos por outros modelos do estado da arte (como trincas paralelas à direção de solicitação compressiva).

Adicionalmente, o modelo termohigromecânico desenvolvido por Gawin et al [25] tem uma melhor interpretação física de cada um de seus múltiplos parâmetros, podendo ser visto como o desenvolvimento matemático mais completo apresentado até agora. Este considera eventos complexos como a queda da rigidez decorrente da degradação térmica. Conseqüentemente, o número de parâmetros necessários é o maior, o que pode dificultar ou ainda inviabilizar sua aplicação tecnológica (ver Tabela 5.1).

Por fim, o modelo promissor em multiescala proposto por Dal Pont [11] pode ser de grande importância para o caso de estruturas com múltiplos componentes como agregados grandes, estruturas metálicas (concretos de construção civil) ou âncoras (refratários monolíticos), proporcionando uma ferramenta que pode ser adaptada em duas ou três dimensões. Por outro lado, o entendimento das interfaces entre os corpos ainda é um trabalho em andamento tanto experimentalmente quanto teoricamente, e futuros desenvolvimentos irão fornecer um melhor entendimento e descrições mais apropriadas dos fenômenos físicos envolvidos.

A fim de delinear a complexidade de cada modelo, a Tabela 5.1 resume as variáveis primárias e o número de quantidades físicas conhecidas (como propriedades tabuladas da água, do ar seco e do vapor de água) e parâmetros dos materiais (i.e. condutividade térmica de um concreto em específico, sua permeabilidade intrínseca, porosidade e propriedades similares) necessárias como input do modelo numérico.

É evidente que com o total de 9 parâmetros de entrada, o modelo de Bažant é o mais simples, uma consequência direta de se considerar o transporte de todas as fases como uma única fase representativa chamada de umidade. A maior parte dos parâmetros são relacionados ao transporte de massa (uma tendência também compartilhada pelos outros modelos), e apenas 6 deles são específicos ao material sendo simulado e necessitam ser caracterizadas. Isto revela seu apelo tecnológico uma vez que sua etapa de caracterização é mais simples.

Tabela 5.1: Resumo dos parâmetros de entrada e as variáveis primárias dos modelos numéricos. Termos marcados com \* são considerados como quantidades físicas conhecidas e possíveis de serem encontradas na literatura. Os outros itens são parâmetros dos materiais que necessitam ser mensurados para cada material simulado.

	Luikov [38]	Bazant [7]	Tenchev [8]	Gawin [25]	Dal Pont [55]
Propriedades Térmicas					
Condutividade térmica efetiva do concreto	✓	✓	✓	✓	✓
Condutividade térmica do agregado					✓
Calor específico efetivo do concreto	✓	✓	✓	✓	✓
Calor específico do agregado					✓
Densidade do concreto	✓	✓	✓	✓	✓
Densidade dos agregados					✓
Densidade da água líquida *			✓	✓	✓
Calor específico da água líquida *	✓	✓	✓	✓	✓
Calor específico do vapor de água *			✓	✓	✓
Calor específico do ar *			✓	✓	✓
Entalpia de evaporação	✓	✓	✓	✓	✓
Entalpia de desidratação			✓	✓	✓
Quantidades físicas conhecidas	2	2	5	5	5
Parâmetros dos materiais	3	3	4	4	7
Propriedades Hídricas					
Permeabilidade intrínseca	✓	✓	✓	✓	✓
Permeabilidade relativa ao gás			✓	✓	✓
Permeabilidade relativa ao líquido			✓	✓	✓
Difusividade mássica	✓				
Coefficiente de difusão do ar seco no vapor *			✓	✓	✓
Coefficiente do gradiente térmico	✓				
Coefficiente do gradiente de filtração	✓				
Sorção isotérmica		✓	✓	✓	✓
Massa de água de desidratação		✓	✓	✓	✓
Coefficiente de difusão da água adsorvida				✓	
Viscosidade dinâmica da água líquida *			✓	✓	✓
Viscosidade dinâmica do vapor de água *			✓	✓	✓
Viscosidade dinâmica do ar seco *			✓	✓	✓
Peso molecular da água *			✓	✓	✓
Peso molecular do ar *			✓	✓	✓
Porosidade			✓	✓	✓
Quantidades físicas conhecidas	0	0	4	5	5
Parâmetros dos materiais	4	3	7	8	7
Propriedades Mecânicas					
Módulo de Young				✓	✓
Tensão térmica transiente normalizada				✓	
Tensões termoquímicas				✓	
Dano termoquímico				✓	
Coefficiente de expansão linear efetivo				✓	
Resistência mecânica em compressão				✓	
Resistência mecânica em tração				✓	
Módulo volumétrico do meio poroso				✓	
Coefficiente de expansão linear da matriz					✓
Coefficiente de expansão linear dos agregados					✓
Coefficiente de expansão linear da água *				✓	
Aceleração da gravidade *	✓	✓		✓	✓
Quantidades físicas conhecidas	1	1	0	2	1
Parâmetros dos materiais	0	0	0	8	4
Resumo					
Total de quantidades físicas conhecidas	3	3	10	12	11
Total de parâmetros dos materiais	7	6	11	17	18
Variáveis Primárias	$T, p, U$	$T, p$	$T, P_g, \tilde{\rho}_v$	$T, p_g, p_c, \tilde{u}$	$T, p_g, p_c, \tilde{u}$

Entretanto, deve ser notado que a complexidade de tais medidas ainda é grande, especialmente para as curvas de sorção isotérmica e a permeabilidade

intrínseca em altas temperaturas, e que testes de sensibilidade podem ser efetuados para identificar a importância relativa de cada propriedade e quais parâmetros devem ser medidos, e quais podem ser referenciados da literatura.

Em contrapartida, os modelos mais completos e precisos teoricamente, de Gawin e de Dal Pont, demandam o maior número de parâmetros de entrada, necessitando de 29 propriedades, das quais 12 (ou 11, dependendo se é o modelo do contínuo homogenizado ou o modelo multiescala, respectivamente) são necessárias medições para caracterizar o material que estiver sendo avaliado (enquanto as outras 17 são quantidades físicas já conhecidas). Por fim, a Tabela 5.2, apresenta um resumo da comparação teórica entre os modelos.

Tabela 5.2: Resumo da comparação teórica entre os modelos de concretos em altas temperaturas.

Modelo	Aspectos Positivos	Aspectos Negativos
Luikov [38]	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Forneceu bases para a simulação usando a CIT</li> <li>• Considerou grupos adimensionais a fim de facilitar a aplicação tecnológica</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Limitado a geometrias simples</li> <li>• Poucos trabalhos recentes utilizam tal modelamento</li> </ul>
Bažant [7]	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo mais simples com menor número de parâmetros a serem medidos</li> <li>• Grande número de trabalhos e aplicações tecnológicas</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Não considera mudanças de fase de maneira explícita</li> <li>• Algumas propriedades físicas não possuem um claro sentido físico</li> </ul>
Tanchev [8]	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo multifásico de complexidade intermediária</li> <li>• Pode considerar aspectos termomecânicos</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Apresenta inconsistências teóricas ao não considerar o efeito da pressão capilar</li> </ul>
Gawin [25] e	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Modelo multifásico que considera o efeito da pressão capilar</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Demanda elevado número de propriedades dos materiais</li> </ul>
Dal Pont [55]	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Melhor representação dos fenômenos que ocorrem durante a secagem</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Difícil implementação</li> </ul>

### 5.3 Benchmark dos Modelos com os Trabalhos Originais

A presente seção tem como objetivo comparar as implementações do modelo de Gong (equivalente ao modelo de Bažant, apresentado na Seção 3.3.2), de Fey (similar ao do Tenchev, descrito na Seção 3.3.3, porém considerando o fluxo de massa de água adsorvida) e de Dal Pont (desprezando os efeitos termomecânicos do modelo abordado na Seção 3.3.4) a partir dos resultados apresentados nas publicações originais.

#### 5.3.1 Trabalho de Gong

A Figura 5.4 apresenta os perfis de pressão em diferentes tempos ao longo da simulação. A figura foi obtida a partir da sobreposição dos resultados apresentados em [79] e daqueles obtidos com o modelo em FEniCS. É possível observar que, em geral, nas primeiras 6 horas a concordância entre os resultados é elevada. A partir de então, diferenças de no máximo 30 °C podem ser observadas, enquanto que nos melhores casos e momentos, esta diferença não ultrapassa 3 °C.

Dado a curva de aquecimento aplicada, a qual apresenta um patamar entre 5.83h e 15.83h, pode-se propor que a diferença obtida decorre da condição de contorno térmico na face fria (Equação 4.18), que se difere da aplicada por Gong devido o termo referente a perda de energia térmica pelo transporte de massa ( $\Delta H_e \beta(p_v - p_{v,\infty})$ ). Este último termo foi ignorado uma vez que na literatura não foi encontrado uma explicação clara de seu sentido físico, e principalmente porque ao considerá-lo os resultados diferiram significativamente daqueles apresentados por Gong e colegas. Outra possível fonte da variação entre os valores obtidos no presente trabalho se dá a partir do método numérico empregado. Os autores de [79] utilizaram um método predictor-corretor com tolerâncias de 0.005. Já o método aqui implementado em FEniCS é baseado no método de Newton-Raphson com tolerâncias de  $10^{-8}$ .

Por fim, a Figura 5.5 traz os resultados dos perfis de pressão em diferentes momentos. É possível observar a mesma tendência vista nos resultados para temperatura, onde a concordância nas primeiras horas foi satisfatória. Como

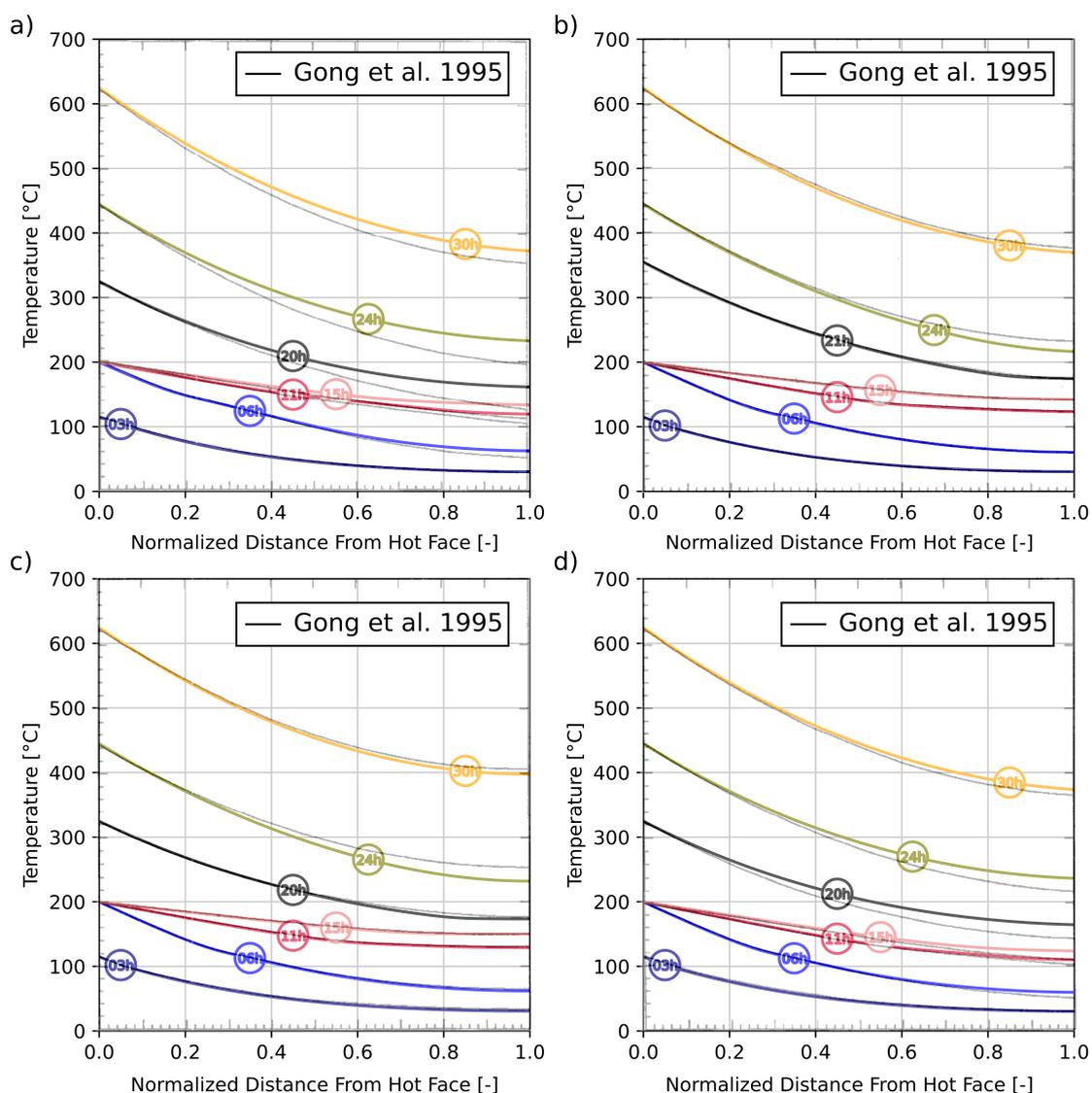


Figura 5.4: Perfis de temperatura ao longo da parede unidimensional em diferentes momentos. Os resultados em preto são os resultados apresentados em [79]. As condições de simulação apresentadas são (a) face quente impermeável e face fria permeável e convectiva, (b) face quente permeável e face fria impermeável e convectiva, (c) face quente permeável e face fria impermeável e adiabática e (d) face fria e quente permeável com face fria convectiva.

as equações são acopladas por meio da equação de estado (as curvas de sorção isotérmicas), tais resultados podem ser uma consequência direta dos perfis distintos de temperatura. Dos casos considerados, o quarto (todas as faces permeáveis com convecção natural na face fria) foi o que apresentou a melhor comparação.

Novamente a hipótese da condição de contorno ser responsável por tais dife-

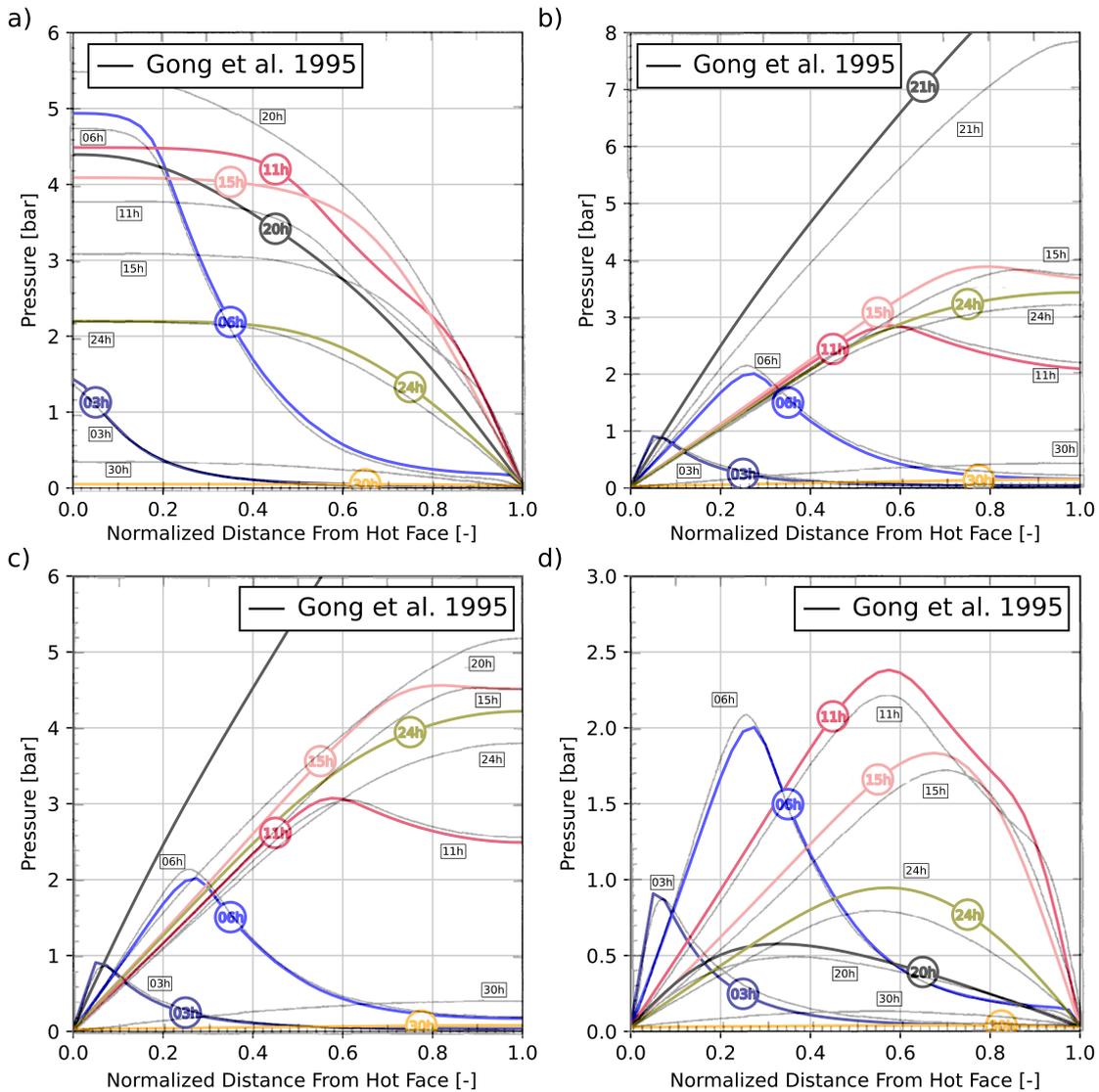


Figura 5.5: Perfis de pressão ao longo da parede unidimensional em diferentes momentos. Os resultados em preto são os resultados apresentados em [79]. As condições de simulação apresentadas são (a) face quente impermeável e face fria permeável e convectiva, (b) face quente permeável e face fria impermeável e convectiva, (c) face quente permeável e face fria impermeável e adiabática e (d) face fria e quente permeável com face fria convectiva.

renças se faz razoável. Observando o termo considerado por Gong e omitido no presente trabalho ( $\Delta H_e \beta(p_v - p_{v,\infty})$ ) é possível compreender que este termo é controlado pela diferença de pressão entre o ambiente e a face fria da amostra. Como o caso 4 é o que resulta na menor pressão (a água pode sair do corpo em ambos os lados), o efeito desta condição de contorno é menor e, portanto, os resultados do presente trabalho se aproximam daqueles apresentados em [79].

Dessa forma, acredita-se que a principal diferença não é decorrente de nenhum erro de implementação, mas sim de uma condição de contorno distinta, além do uso de uma metodologia numérica diferente.

### 5.3.2 Trabalho de Fey

A implementação do modelo de Fey et al. na plataforma FEniCS foi checada a partir da comparação dos resultados obtidos na simulação desenvolvida no presente projeto de mestrado com aqueles apresentados em [13].

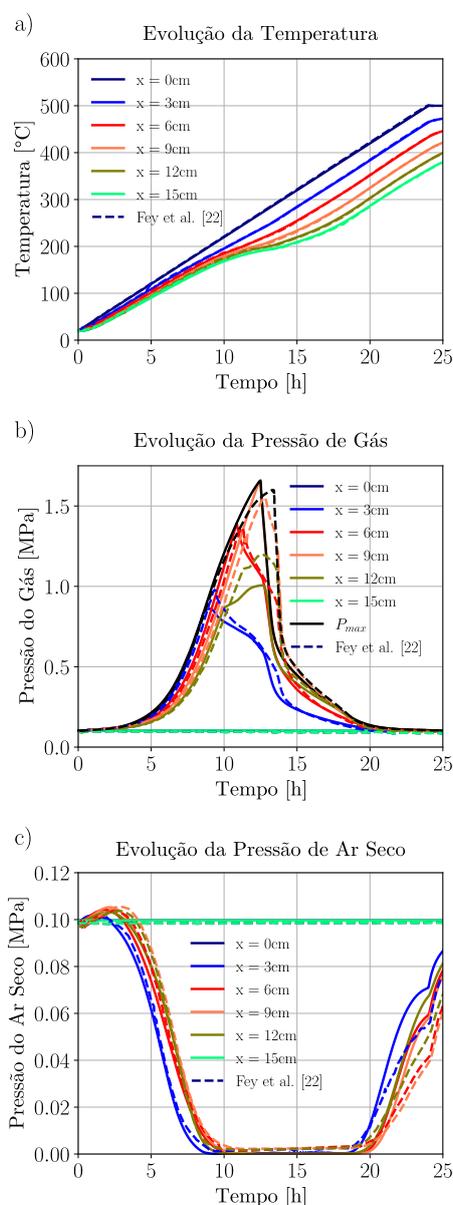


Figura 5.6: Comparação dos resultados obtidos pela implementação utilizando a plataforma FEniCS e aqueles reportados por Fey et al. [13]. Evolução da temperatura (a), evolução da pressão do gás no material, (b), e evolução da pressão de ar seco.

É possível observar total equivalência dos valores obtidos em termos da evolução de temperatura conforme descrito na Figura 5.6 (a), demonstrando que as propriedades térmicas e o modelamento do balanço de energia foram devidamente implementados.

A evolução da pressão de gás revela um comportamento significativamente similar àquele reportado por Fey et al., tanto em termos de valor da pressão máxima, como no momento no qual tais picos ocorrem, como visto na a Figura 5.6 (b). A maior diferença (de aproximadamente 0.2 MPa) ocorre na posição de 12cm distante da face quente, enquanto que na posição de 15cm (face fria) a pressão é constante e igual a pressão ambiente.

Por fim, na Figura 5.6 (c) o comportamento da pressão de ar seco é avaliado, nela pode-se observar uma boa concordância dos resultados até o instante 21h, a partir do qual a implementação em FEniCS prevê um aumento mais intenso nos valores de pressão.

É importante salientar que no trabalho original [13], as equações matemáticas resultantes foram resolvidas a partir do método de diferenças finitas (usando o esquema *upwind*), enquanto que no presente trabalho usou-se o método dos elementos finitos. Embora tais metodologias possam ser equivalentes para determinadas condições específicas (malhas simples, elementos lineares do tipo P1, diferentes do tipo P2 utilizado nesta pesquisa), esta estratégia de solução numérica diferente pode ser responsável pelas discrepâncias nos resultados finais. Além disso, possíveis erros das propriedades relatadas também podem ser cruciais para tais distinções, principalmente considerando que o trabalho original apresenta dois materiais distintos e numerosos parâmetros dependentes da temperatura [13].

Um exemplo deste tipo de problema é o caso da curva de sorção cuja descrição matemática discorda do gráfico apresentado no trabalho (comparando a Figura B31 e a Equação B17 do artigo original [13] é possível concluir que o limite superior da curva de sorção é 0,95 e não o valor dado na Equação B17, de 0,9). Em comunicações privadas com o autor correspondente alguns destes problemas foram resolvidos - como a utilização da permeabilidade correta (a Equação

4.19 não corresponde ao valor apresentado em Fey et al. [13]) - resultando nas curvas apresentadas na Figura 5.6.

Assim, pode-se concluir que as pequenas variações entre os resultados apresentados não estão relacionadas a erros conceituais na implementação do modelo na plataforma FEniCS, sendo estes explicados pela adoção de uma estratégia de resolução numérica distinta e possíveis falhas na publicação original, estando a presente implementação apropriada para as comparações diretas realizadas nas seções a seguir.

### 5.3.3 Trabalho de Dal Pont

Por fim, o modelo termohídrico proposto por Dal Pont et al. foi verificado a partir da comparação dos resultados obtidos pelo código utilizando a plataforma FEniCS e os valores presentes na publicação original, os quais representam o ensaio de pressão, temperatura e massa (PTM), de um concreto de construção civil reportado por Kalifa et al [80].

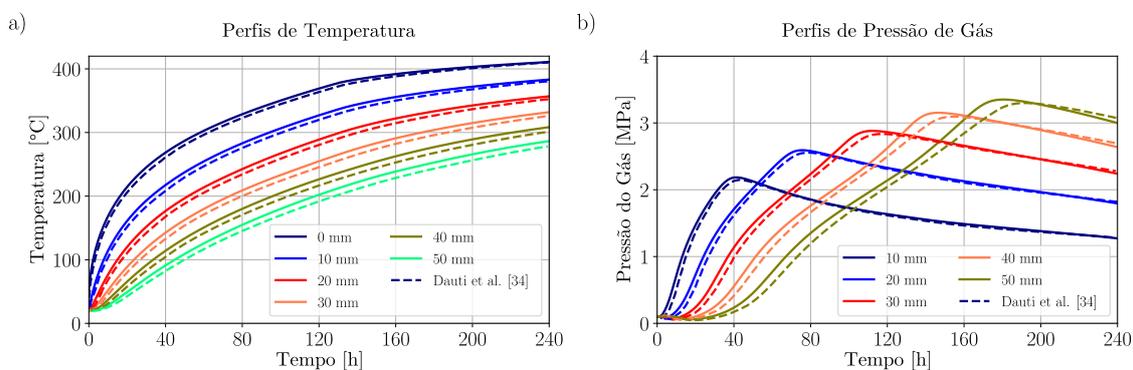


Figura 5.7: Comparação dos resultados obtidos pela implementação utilizando a plataforma FEniCS e os resultados reportados por Dauti et al. [11]. Evolução da temperatura (a) e evolução da pressão do gás no material, (b).

É possível observar na Figura 5.7 que os resultados concordam de maneira satisfatória tanto na temperatura quanto nos perfis de pressão de gás. As pequenas diferenças podem ser explicadas pelo uso de diferentes ferramentas de elementos finitos (Dauti e colaboradores utilizaram o software Cast3M). Outra possível fonte de erros são as casas decimais utilizadas para a descrição de certas propriedades críticas como a permeabilidade, curvas de retenção, e condutividade térmica.

Considerando a concordância dos resultados, conclui-se que todos os modelos foram devidamente implementados usando a plataforma *open source* FEniCS e as comparações entre as abordagens é representativa.

#### **5.4 Comparação Direta Entre os Modelos com Resultados Experimentais**

A presente seção tem como objetivo apresentar a comparação direta entre os três modelos selecionados, aqui referenciados como modelo monofásico (modelo de Bažant, introduzido na Seção 3.3.2), modelo multifásico desconsiderando a pressão capilar - DPC - (modelo de Fey, descrito na Seção 3.3.3 e considerando o fluxo de massa por difusão na camada adsorvida) e o modelo multifásico que considera a pressão capilar - CPC (modelo de Dal Pont, apresentado na Seção 3.3.4).

Esta comparação será realizada utilizando dois ensaios experimentais distintos, o de PTM e o de tomografia de nêutrons, ambos realizados em concretos de construção civil. Espera-se que a validade das conclusões aqui encontradas sejam as mesmas para os materiais refratários, uma vez que do ponto de vista fenomenológico, ambos são referentes ao transporte de massa devido ao aquecimento de meios porosos parcialmente saturados. Os parâmetros utilizados foram baseados no trabalho de Dauti [11] que utilizava o modelo multifásico CPC, e, portanto, a concordância dos resultados deste modelo com os experimentos já é esperada. A fim de avaliar apenas o efeito das diferentes hipóteses básicas dos modelos, o mesmo conjunto de propriedades será utilizado em todos os modelos. As equações constitutivas não serão apresentadas a fim de manter a presente dissertação concisa e todas as informações podem ser encontradas no trabalho de Dauti et al. [11].

##### **5.4.1 Ensaios PTM**

A Figura 5.8 apresenta a comparação entre a evolução da temperatura experimental e os valores previstos pelos modelos monofásico, multifásico desprezando a pressão capilar (DPC) e multifásico completo (CPC), em (a), (b) e (c), respectivamente. Os testes foram feitos em malhas unidimensionais de 12cm de comprimento, discretizadas em 240 elementos lineares do tipo P1 com intervalos

de tempo de 30s.

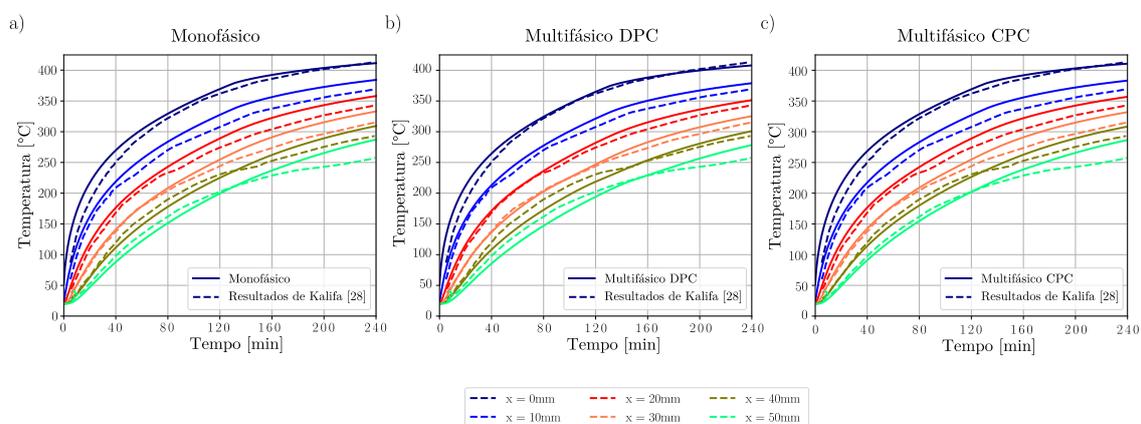


Figura 5.8: Comparação da evolução da temperatura prevista pelos modelos com os resultados experimentais do ensaio PTM descritos em [80]. Em (a) apresenta-se o modelo monofásico descrito na Seção 3.3.2, em (b) o modelo multifásico DPC se refere ao modelo que desconsidera a pressão capilar, conforme descrito na Seção 3.3.3, e em (c) o modelo multifásico CPC, equivale ao modelo completo que considera os efeitos de capilaridade, conforme apresentado na Seção 3.3.4.

Foi possível observar que o aumento da temperatura na face quente concorda com os valores previsto por todos os três modelos. Nas posições interiores (10mm, 20mm, 30mm, and 40mm) o formato da evolução é bem representado, sendo que a maior diferença ocorreu no final do experimento (após 240 minutos) e foi de aproximadamente 15 °C. A posição mais interna (50mm) é a que apresenta a maior diferença de temperatura (35 °C). O modelo que melhor representou os experimentos em termos do comportamento térmico foi o multifásico que desconsidera a pressão capilar, cuja maior diferença foi de aproximadamente 20 °C.

Na Figura 5.10 (a) é apresentada a evolução de temperatura de todos os modelos em um mesmo gráfico. A comparação revelou que as previsões são equivalentes, havendo a diferença de que o modelo multifásico DCP resultar em menores valores desta propriedade.

Considerando a evolução da pressão do gás, a Figura 5.9 apresenta a comparação entre os valores computados pela simulação e os resultados medidos experimentalmente. Cabe notar que como o modelo monofásico não considera a contribuição da pressão do ar seco de maneira explícita, o valor relatado neste

gráfico é a soma da pressão do vapor com a pressão atmosférica (101325 Pa). Baseado na Figura 5.9 (a) foi possível concluir que a evolução de pressão prevista nos instantes iniciais (início do pico) concorda com os valores mensurados para as posições mais próximas da face quente (10mm, 20mm and 30mm).

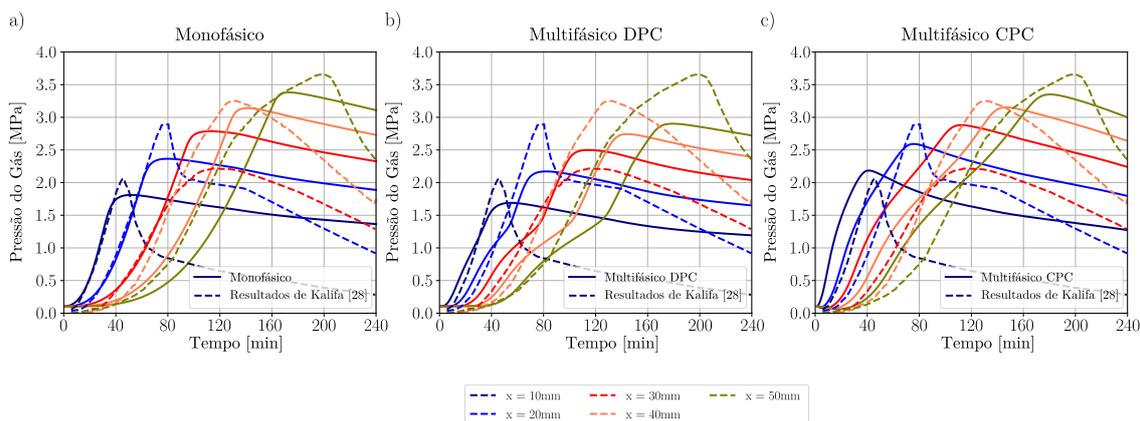


Figura 5.9: Comparação da evolução da pressão de gás prevista pelos modelos com os resultados experimentais do ensaio PTM descritos em [80]. Em (a) apresenta-se o modelo monofásico descrito na Seção 3.3.2, em (b) o modelo multifásico DPC se refere ao modelo que desconsidera a pressão capilar, conforme descrito na Seção 3.3.3, e em (c) o modelo multifásico CPC, equivale ao modelo completo que considera os efeitos de capilaridade, conforme apresentado na Seção 3.3.4.

Entretanto, observou-se que o pico de pressão calculado foi menor do que o obtido experimentalmente e, além disso, a queda da pressão após o pico não foi tão pronunciada quanto os valores medidos. Isto pode ser explicado pelo fato de que o efeito de aumento de permeabilidade devido aos danos mecânicos não é considerado [90, 11, 91]. Por fim, o momento no qual ocorre os picos de pressão é previsto de maneira satisfatória, apresentando apenas uma diferença para a posição de 50mm. Outra diferença se dá na evolução medida pelo sensor posicionado a 30mm da face quente, onde os valores experimentais são menores do que os previstos pelos modelos. Isto pode ser justificado devido a problemas neste sensor, conforme relatado por Kalifa et al. [80].

Considerando o modelo multifásico que desconsidera a pressão capilar, apresentado na Figura 5.9 (b), foi verificado novamente que os valores dos picos de pressão computados foram menores do que os medidos. A única exceção foi no caso dos resultados referentes à posição 30mm, que possui dados experi-

mentais não confiáveis devido a problemas no sensor desta posição. Por fim, notou-se também que durante os primeiros minutos, maiores valores foram previstos do que aqueles mensurados.

Finalmente, o modelo multifásico completo é o que melhor representou os valores experimentais, considerando tanto a posição do pico quanto o seu valor. Isto pode ser explicado uma vez que as propriedades utilizadas para este caso foram obtidas do trabalho de Dauti et al. [11], o qual usou o mesmo modelo multifásico CPC. Portanto, estes parâmetros foram previamente calibrados para este modelo e justificam seu melhor desempenho, além das possíveis explicações relacionadas à maior consistência teórica deste modelamento.

Comparando-se a evolução da pressão de gás de todos os modelos (Figura 5.10), observou-se que as diferenças entre os resultados foram menores do que 20% nos picos de pressão, indicando que embora as hipóteses básicas dos modelos diferirem consideravelmente, os resultados finais são próximos. Isto também pode ser visto na evolução da pressão máxima de gás.

Uma das possíveis explicações para estas diferenças está na consideração da pressão do ar seco, uma vez que esta quantidade é desconsiderada no modelo monofásico, é uma variável primária no modelo multifásico DPC e uma quantidade intermediária no modelo multifásico CPC. Além disso, a pressão de gás é dada pela soma das pressões de ar seco e de vapor ( $p_g = p_a + p_v$ ). Assim, a fim de checar uma quantidade calculada em todos os modelos, a Figura 5.11 apresenta a evolução da pressão de vapor.

A maior diferença ocorre nas posições próximas da face quente (10mm e 20mm) em momentos posteriores (após 40 minutos), onde já ocorreu a secagem do material e onde espera-se que o efeito da pressão capilar seja maior devido aos meniscos nas interfaces gás-líquido. Em outras posições e momentos, a diferença entre os modelos é desprezível.

Do ponto de vista de aplicação tecnológica (contexto ao qual o presente mesurado se insere), estas especificidades de cada modelo podem ser consideradas incapazes de justificar o uso de um de maior complexidade, principalmente ao se considerar que o número de propriedades de difícil caracterização necessárias

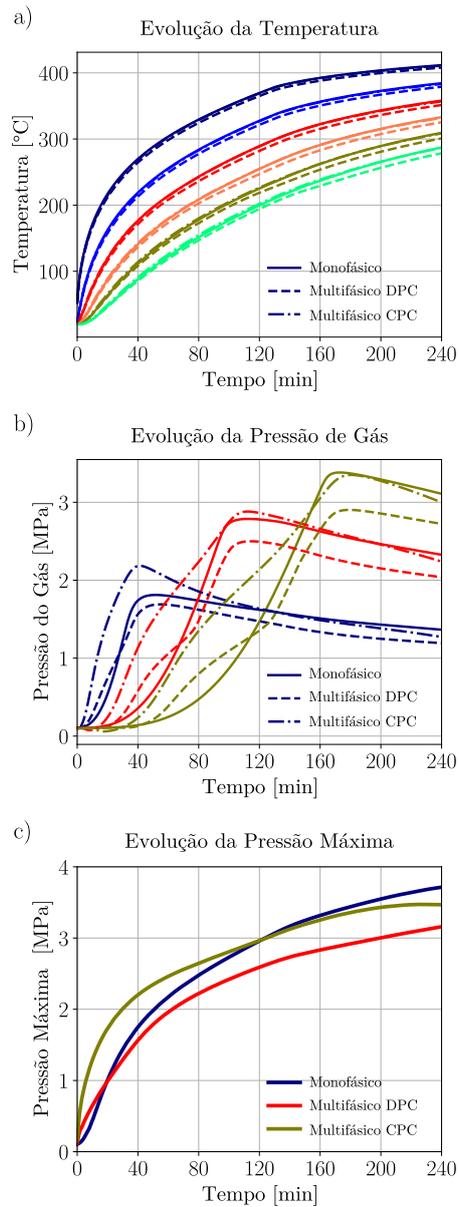


Figura 5.10: Resumo da comparação entre os três modelos para o caso de Kalifa, considerando a evolução da temperatura (a), do gás (b) e da pressão máxima.

para a aplicação de tais modelos é muito maior.

Levando em conta ainda as limitações dos ensaios PTM, a próxima seção visa realizar a comparação dos modelos usando os resultados dos campos de umidade no material os quais foram obtidos pela técnica de tomografia de nêutrons.

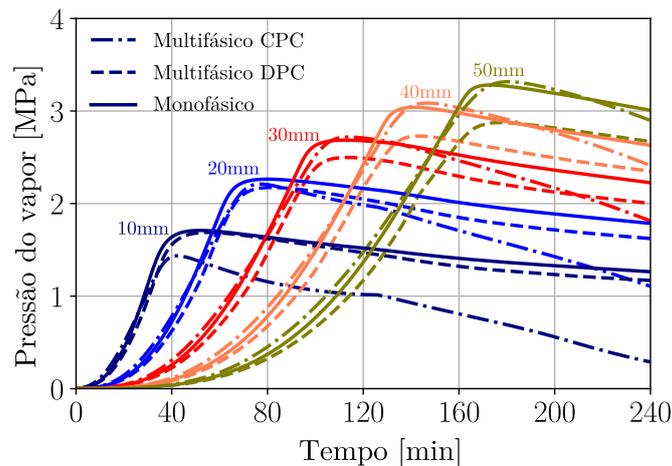


Figura 5.11: Evolução da pressão de vapor prevista pelos modelos no caso de Kalifa.

#### 5.4.2 Tomografia de Nêutrons

No ensaio de tomografia de nêutrons, apenas a quantidade de água na extensão da amostra é possível de ser obtida a partir da diferença de contraste entre zonas ricas e pobres em água. Entretanto, a evolução da temperatura na amostra pôde ser mensurada por meio do uso de termopares posicionados em diferentes regiões. A fim de não ter a influência destes sensores, os testes são realizados em amostras distintas, sendo que uma amostra é específica para a obtenção da evolução térmica e outra amostra sem termopares é utilizada para a avaliação da quantidade de água, conforme descrito por Dauti et al. [23, 11, 55]. As simulações realizadas consideraram uma malha bidimensional com as dimensões idênticas ao cilindro (6cm de diâmetro e 6 cm de altura) e com 20 elementos na direção radial e 40 na direção axial. Os elementos utilizados eram triangulares da classe P2. O passo de tempo utilizado foi 30s. A comparação dos valores previstos nas simulações com os dados experimentais é apresentada na Figura 5.12.

Foi possível observar que todas as três abordagens previram um mesmo comportamento geral, onde se detectou uma boa concordância nos primeiros 15 minutos para a posição de 3mm. No entanto, após este período, os modelos passaram a subestimar as temperaturas. A principal diferença ocorreu ao final do ensaio, onde se pode notar uma variação de aproximadamente 12°C entre

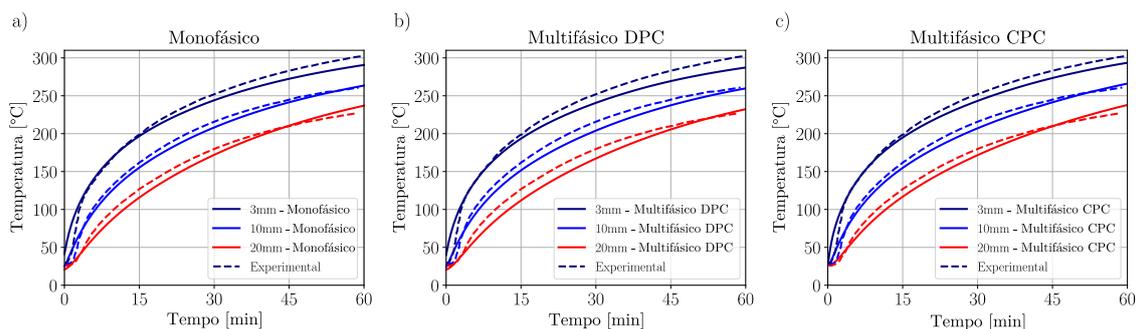


Figura 5.12: Comparação da evolução da temperatura prevista pelos modelos e dos dados experimentais obtidos com a amostra de tomografia de nêutrons relatados por Dauti et al. [11]. Em (a) apresenta-se o modelo monofásico descrito na Seção 3.3.2, em (b) o modelo multifásico DPC se refere ao modelo que desconsidera a pressão capilar, conforme descrito na Seção 3.3.3, e em (c) o modelo multifásico CPC, equivale ao modelo completo que considera os efeitos de capilaridade, conforme apresentado na Seção 3.3.4.

os valores medidos e calculados. Já a evolução nas posições 10mm e 20mm apresentou um comportamento oposto, no qual a correspondência entre os dados estimados e observados experimentalmente é melhor nos instantes finais do ensaio. Considerando este e os resultados anteriores da simulação do ensaio de PTM (Seção 5.4.1), é possível concluir que todas as três abordagens apresentam resultados térmicos equivalentes.

No trabalho apresentado por Dauti et al. [55, 11], foi concluído que o fenômeno de *beam hardening* (atuação da amostra como um filtro de seleção de feixes de nêutrons mais energéticos - para mais detalhes ver [23]) devido ao fluxo radial de massa afetava a obtenção da quantidade de água na amostra. Esforços para minimizar este efeito tem sido estudados recentemente [63], porém, até o presente momento, esta ainda é uma limitação desta técnica. Conseqüentemente, a comparação entre os modelos e os resultados será feita apenas de forma qualitativa. Para estudos quantitativos, novos ensaios nos quais seja possível impedir o fluxo radial de umidade (e assim, o efeito do *beam hardening*) necessitam ser realizados.

A Figura 5.13 apresenta a comparação da mudança relativa de quantidade de água prevista pelos modelos e a observada nos ensaios tomográficos. Esta quantidade é calculada utilizando-se as Equações 5.1 e 5.2, onde  $\phi$  é a porosi-

dade do concreto,  $S_l$  é a sua saturação com água líquida,  $\rho_l$  é a densidade da fase líquida da água,  $m_{dehyd}$  é a massa de água liberada por desidratação e  $w_i$  é o teor inicial de água (para esta composição de concreto,  $w_i = 189.1 \text{ Kg/m}^3$ )

$$w_{change} = (\phi S_l \rho_l)_0 - (\phi S_l \rho_l)_t + \Delta m_{dehyd} \quad (5.1)$$

$$\hat{w}_{change} = \frac{w_i - w_{change}}{w_i} \quad (5.2)$$

É possível observar que a frente de secagem possui a mesma velocidade (compare a posição da fronteira curva azul) para todos os três modelos, e que estes concordam com os resultados experimentais observados. Os resultados monofásicos e multifásicos DPC são bastante similares, sendo a única diferença a secagem na face quente prevista pelo primeiro modelo, a qual foi mais intensa.

A abordagem multifásica que contempla os efeitos capilares possui uma frente de secagem mais íngreme, tendo uma secagem lateral mais intensa do que o observado nos outros modelos, sendo tal comportamento explicado pelo efeito de capilaridade.

No geral, todos os três modelos resultaram em previsões equivalentes, e que concordam com o comportamento do concreto observado pela tomografia de nêutrons. Para análises quantitativas, o esquema experimental precisa ser ainda aprimorado, conforme descrito por Tengattini et al [63], assim, o presente trabalho não considerará tais aspectos.

Um outro ponto importante que deve ser avaliado é a sensibilidade dos modelos com relação a determinadas propriedades. Conforme será descrito nas seções futuras, observou-se que para o modelo monofásico a permeabilidade era a variável de maior importância. Esta também foi a conclusão de Fey et al. para o modelo multifásico DPC [13]. Assim, foi avaliado o efeito de ser usado diferentes permeabilidade intrínsecas iniciais,  $K_0$ , distintas, sendo  $K_0 = 10^{-19} \text{ m}^2$ ,  $K_0 = 10^{-20} \text{ m}^2$  (o valor usado inicialmente) e  $K_0 = 10^{-21} \text{ m}^2$ . Os resultados são apresentados na Figura 5.14.

É possível observar que a redução da permeabilidade intrínseca inicial reduz

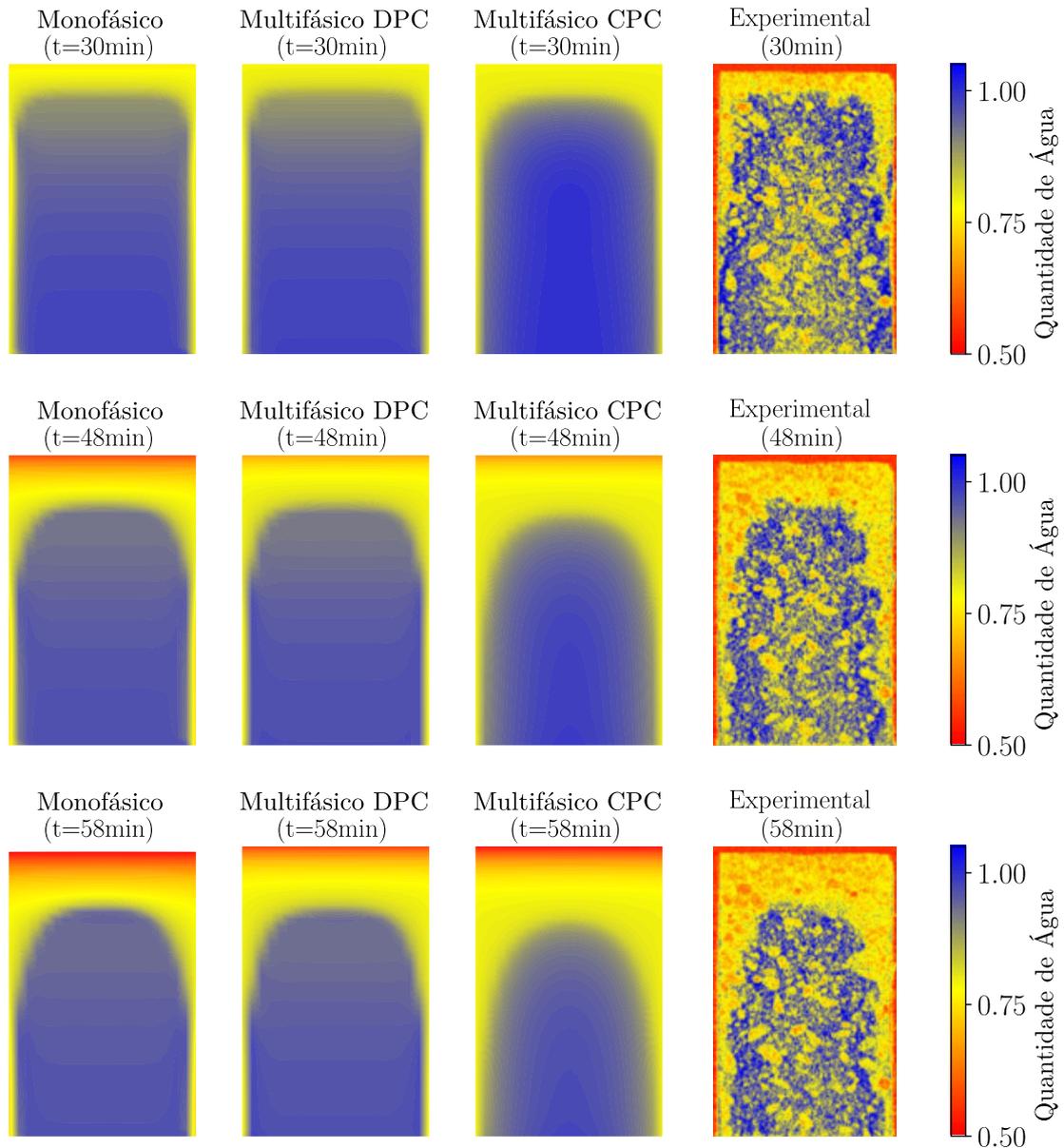


Figura 5.13: Comparação da mudança de quantidade de água relativa previsto pelos modelos com os resultados experimentais de tomografia de nêutrons reportados por [11].

a velocidade da frente de secagem (resultados na última fileira,  $K_0 = 10^{-21} \text{ m}^2$ ), enquanto que quando maiores valores deste parâmetro são empregados nos cálculos, maior a velocidade de remoção de água (resultados da primeira fileira,  $K_0 = 10^{-19} \text{ m}^2$ ). Essa tendência é compartilhada por todos os três modelos. Também é possível concluir que a permeabilidade intrínseca igual a  $10^{-20} \text{ m}^2$  é a que melhor representa os valores experimentais para este conjunto de parâmetros

empregados.

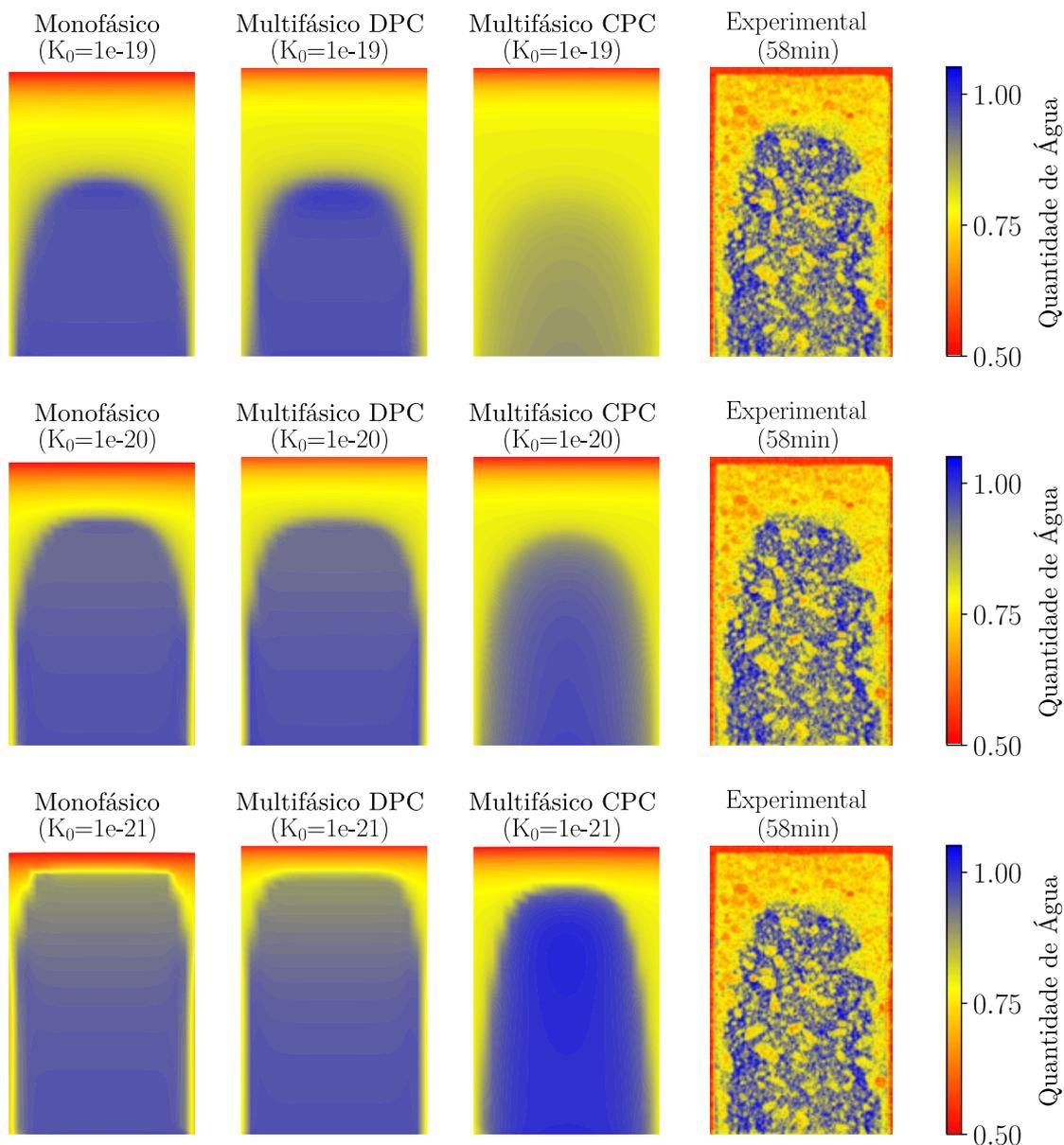


Figura 5.14: Comparação da sensibilidade dos modelos com relação a permeabilidade intrínseca inicial após 58 minutos de aquecimento, os resultados de tomografia de nêutrons reportados em [11] também são apresentados para comparação.

Comparando os modelos entre si, é possível observar novamente que os modelos monofásico e multifásico DPC são análogos, ambos com pequenas diferenças no acúmulo de água nas regiões mais frias da amostra entre os diferentes valores de permeabilidade. Isto é consideravelmente distinto do que é previsto pelo modelo multifásico CPC, no qual há um grande efeito da permeabilidade no

acúmulo de água em regiões posteriores à frente de secagem.

Por fim, uma última comparação foi feita utilizando uma malha em três dimensões simulando o mesmo caso da tomografia de nêutrons. O objetivo foi avaliar o custo computacional de tais abordagens em situações que demandam maior processamento, como no caso de uma malha tridimensional com 12.879 elementos tetraédricos e 2811 vértices, conforme apresentado na Figura 5.15.



Figura 5.15: Malha usada nas simulações em 3D.

A Figura 5.16 apresenta os resultados da quantidade de água em três dimensões ao final da simulação. Os valores são equivalentes às análises bidimensionais (Figura 5.13), sendo observado os mesmos comportamentos. Além disso, as diferenças entre as abordagens são as mesmas também.

A Tabela 5.3 apresenta o custo computacional (tempo de CPU) para cada simulação. Para estes testes foi utilizado um computador equipado com processador Intel Xeon E3-1225 (3.30GHz) e 16Gb RAM. Foi possível concluir que o modelo monofásico foi mais que três vezes mais rápido do que as outras abordagens. Este resultado era esperado uma vez que este contempla um menor número de graus de liberdade quando comparado com os multifásicos (dois terços do total), uma vez que apenas duas variáveis primárias são utilizadas ao invés da três. Com relação a diferença entre a consideração ou não do efeito da pressão capilar, é possível observar que não há vantagens referentes a eficiência numérica ao desconsiderar tal efeito, de fato, ao negligenciar tal contribuição,

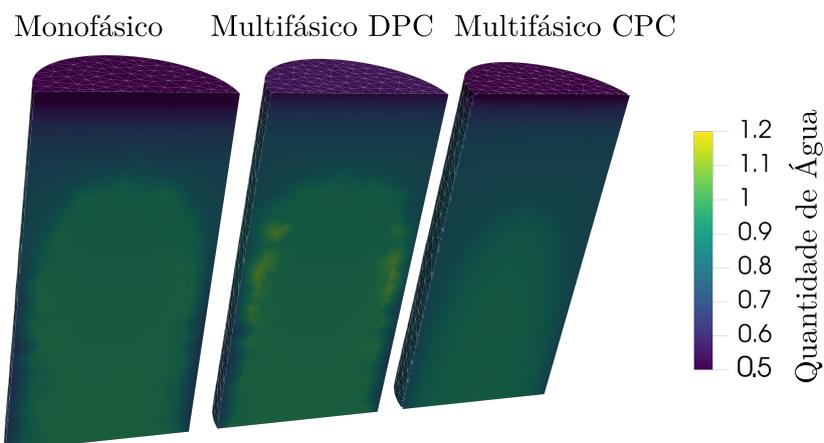


Figura 5.16: Quantidade de água ao final da simulação do ensaio tomográfico em três dimensões.

o modelo foi 10% mais lento.

Tabela 5.3: Comparação do custo computacional considerando o tempo de CPU para realizar as simulações tridimensionais do ensaio de tomografia de nêutrons. Todos os testes foram realizados com um computador equipado com um processador Intel Xeon E3-1225 (3.30GHz) e 16Gb RAM.

	Monofásico	Multifásico DPC	Multifásico CPC
Tempo de CPU	00:12:23.37	00:46:20.14	00:42:07.25

Consequentemente, no caso do uso destes modelos para a otimização de curvas de secagem, onde um grande número de simulações deve ser realizado (especialmente se forem utilizadas metodologias algorítmicas de otimização), o modelo monofásico pode ser de grande interesse, reafirmando a sua relação com a aplicação tecnológica. Como exemplo de procedimento, uma primeira filtragem poderia ser realizada com o modelo monofásico mais rápido, e as melhores curvas candidatas poderiam ser simuladas usando o modelo multifásico para se ter um maior nível de detalhamento dos mecanismos de transporte atuante em tais casos. Tal abordagem, porém, necessitaria do conhecimento de todas as propriedades necessárias para o modelo multifásico.

## 5.5 Convergência Numérica do Modelo de Gong

A convergência de uma simulação por elementos finitos é uma característica importante dos modelos, pois indica o quanto as simulações são precisas, especialmente quando o problema é não linear e não há garantias de que o mesmo é bem-posto. A análise de convergência consiste em inúmeras simulações com diferentes parâmetros de discretização. No presente trabalho, a discretização espacial e temporal foram estudadas para o modelo monofásico, visto que este foi capaz de representar os resultados de maneira similar aos modelos multifásicos, porém, com grandes vantagens do ponto de vista de implementação tecnológica.

Esta seção tem como objetivo avaliar tais convergências tanto na simulação de uma secagem de um concreto refratário (com a curva de aquecimento utilizada por Gong descrita na Seção 4.2), quanto na simulação de um aquecimento repentino (como um incêndio). Além do efeito do cenário de aquecimento, também foi avaliado as técnicas de implementação das curvas de sorção, Equação 4.8, especialmente no intervalo dos regimes saturados e não saturados.

A abordagem original de Bažant consistia em uma função definida por partes, que não apresentava continuidade em suas derivadas (seja com respeito à temperatura ou à pressão). Estas derivadas eram calculadas por métodos numéricos de diferenças finitas (estes resultados são referenciados como “Numérica”). Uma outra abordagem, consiste no uso de derivação analítica das derivadas parciais (referenciada como “Analítica”). Por fim, duas outras abordagens inspiradas na descrição da curva de sorção de Fey et al. [13], Equação 4.23, foram propostas, ao se usar um polinômio de terceiro grau para garantir que as derivadas parciais também fossem contínuas, sejam estas calculadas por diferenças finitas (“Contínua Numérica”) ou analiticamente (“Contínua”).

As normas utilizadas para o cálculo dos erros são as normas  $L^2$  e  $H^1$  dos erros relativos, tanto para a pressão quanto a temperatura ao final do ensaio, em comparação com a solução de uma análise obtida usando 8000 elementos finitos e um passo de tempo de  $\Delta t = 1$  s, i.e.,

$$e_p = \frac{\| p(t = t_f) - p_{\text{fine}}(t = t_f) \|_W}{\| p_{\text{fine}}(t = t_f) \|_W} \quad (5.3)$$

onde  $W$  significa  $L^2(\Omega)$  ou  $H^1(\Omega)$ . Uma expressão análoga é utilizada para os erros relativos à temperatura.

O problema numérico resolvido consistia em uma malha unidimensional representando uma parede de 20cm. A face da esquerda  $\Gamma_H$  ( $x = 0$ ) possuía a temperatura fixa  $T_\infty^H(t)$ , a qual segue a curva descrita por Gong et al. [79] e a curva ISO de simulação de incêndio [92], como mostrado na Equação 5.4. Em ambos os casos a face fria,  $\Gamma_C$ , é sujeita ao resfriamento por convecção natural e ambos os lados são permeáveis.

$$T_\infty(t) = 345 \log(8t/60 + 1) + 298.15 \quad (5.4)$$

Primeiramente, os resultados de convergência espacial relacionadas ao refinamento da malha são apresentados na Figura 5.17, referentes ao aquecimento de secagem, apresentando o erro nas normas  $L^2(\Omega)$  e  $H^1(\Omega)$  como função do tamanho do elemento,  $h_{max}$  para pressão, (a) e (b), e temperatura, (c) e (d).

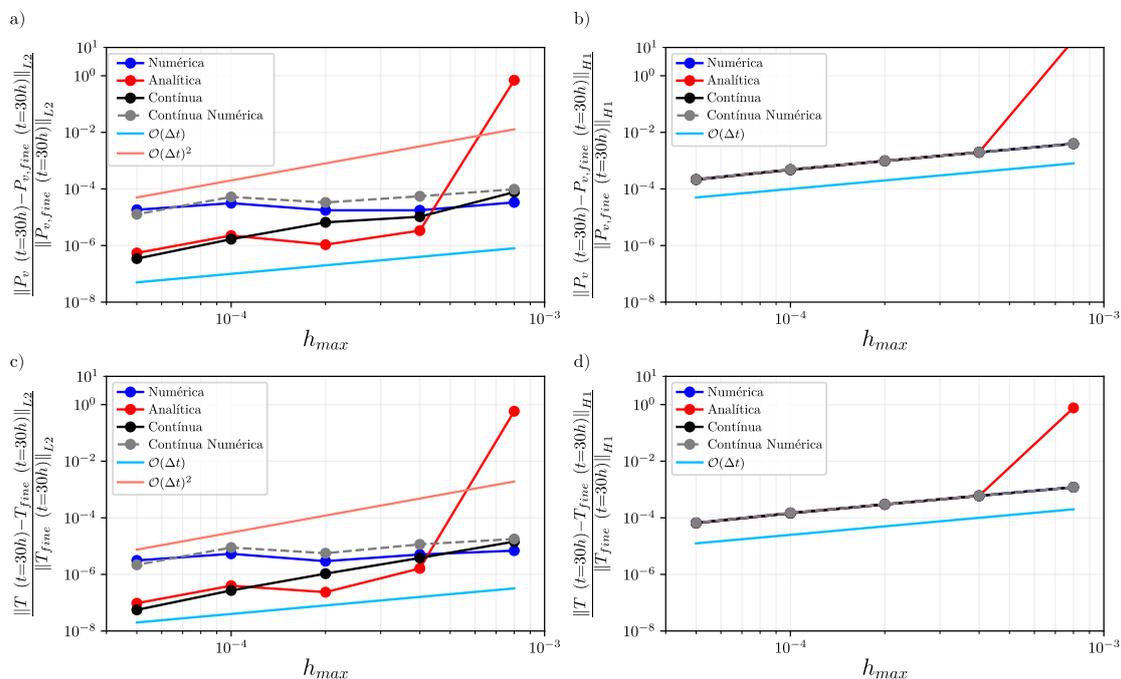


Figura 5.17: Convergência de malha dos campos de pressão, (a) e (b), e de temperatura, (c) e (e), para o cenário de secagem (aquecimento seguindo o procedimento descrito em Gong et al. [79] e na Seção 4.2).

Estes gráficos apresentam que todos os métodos de implementação da curva

de sorção são convergentes na malha, e de maneira geral a ordem varia entre  $\sim h_{\max}$  e  $\sim h_{\max}^2$ . Entretanto, considerando a norma  $L^2(\Omega)$ , a metodologia usando diferenciação numérica diminuiu a ordem de convergência tanto na pressão, Figura 5.17 (a), quanto na temperatura, Figura 5.17 (c).

Para a norma  $H^1$ , embora os erros relativos tenham uma ordem muito maior a taxa de convergência é similar independente da metodologia adotada para implementar a curva de sorção e possuem ordem  $\sim h_{\max}$ .

Já no cenário de aquecimento seguindo a curva ISO, embora as taxas de aquecimento sejam consideravelmente maiores, (ver Equação 5.4), tendências similares são observadas conforme evidenciado pela Figura 5.18.

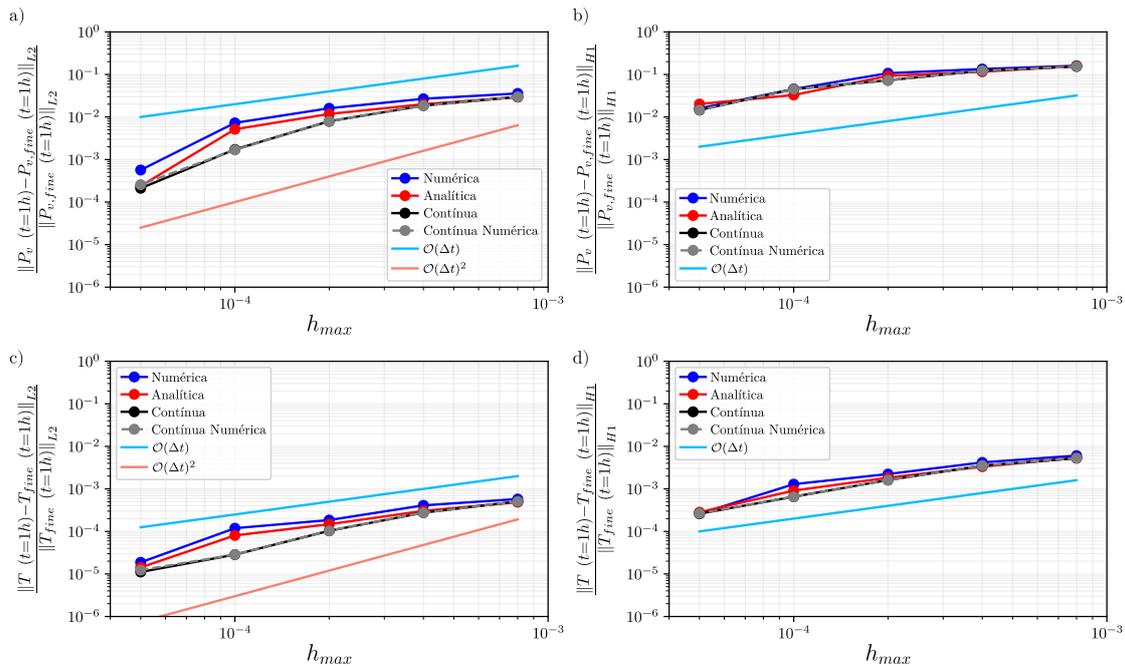


Figura 5.18: Convergência de malha dos campos de pressão, (a) e (b), e de temperatura, (c) e (e), para o cenário de incêndio (aquecimento de acordo com a Equação 5.4).

Uma característica única é que os resultados obtidos das normas dos erros relativos  $L^2$ , são menos sensíveis a metodologia de implementação das curvas de sorção. A principal conclusão obtida foi de que o uso da curva contínua com derivadas analítica (caso em preto, “Contínua”) apresenta uma maior ordem de convergência espacial em ambos os casos. Entretanto, se a facilidade de implementação for uma prioridade, os outros métodos apresentam convergência

também satisfatória e podem ser utilizados, ainda que apresentem erros numéricos relativamente maiores.

Uma vez considerada a ordem de convergência espacial para ambos os cenários de secagem e incêndio, o próximo passo é a análise da ordem de convergência temporal. A Figura 5.19 apresenta as normas  $L^2(\Omega)$  do erro relativo para a pressão e temperatura em função do tamanho do passo de tempo  $\Delta t$  para ambos os casos de aquecimento considerados. A primeira conclusão que pode ser retirada é que a convergência temporal do método é de primeira ordem (i.e.,  $\mathcal{O}(\Delta t)$ ). Entretanto, o comportamento assintótico só é observado para tamanhos de passo consideravelmente pequenos para o caso com aquecimento da curva de incêndio da ISO. Este resultado pode ser explicado pela maior taxa de aquecimento destes casos. Por fim, considerando as metodologias de implementação das curvas de sorção isotérmicas, é possível notar que os resultados apresentaram uma baixa sensibilidade com relação ao método escolhido.

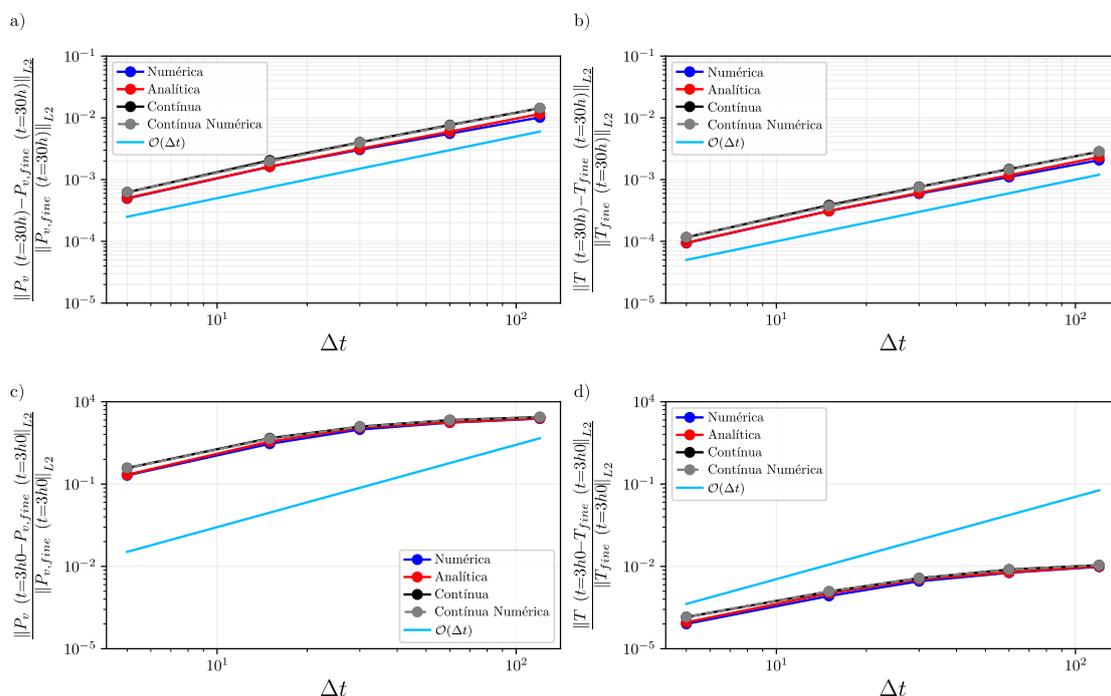


Figura 5.19: Convergência temporal considerando o cenário de secagem, (a-b), e o cenário de incêndio, (c-d).

Assim, pode ser concluído que o presente modelo apresenta convergência espacial e temporal, e que a escolha da implementação matemática das curvas

de sorção não afeta diretamente a estabilidade numérica do modelo monofásico. Assim, a escolha da metodologia pode ser feita com um balanço entre a acurácia da ferramenta computacional e a facilidade de implementação. Por fim, este resultado inédito na literatura, indica que esta abordagem é consistente e converge tanto no tempo quanto no espaço.

## 5.6 Análise de Sensibilidade do Modelo de Gong

Devido ao número de parâmetros de difícil caracterização necessários mesmo no modelo monofásico mais simples, uma análise de sensibilidade para estudar o efeito das propriedades nos resultados finais pode ser de grande interesse para revelar quais ensaios são importantes e demanda a coleta de dados experimentais precisos, e quais parâmetros podem ser obtidos da literatura. Além destes aspectos, possíveis erros experimentais associados às medidas também podem influenciar os resultados finais.

Assim, a condutividade térmica, a condutividade hidráulica inicial, e parâmetros que definem a curva de sorção foram avaliados, sendo variados em intervalos representativos dos materiais refratários. Os efeitos serão avaliados na evolução temporal do valor de pressão máxima, na temperatura na face fria e na quantidade de água evaporável presente no material. A malha unidimensional utilizada apresentava 200 elementos e o incremento temporal utilizado era de 30 segundos. As equações constitutivas características do material empregadas foram as mesmas definidas na Seção 4.2. A temperatura na face quente seguiu a curva de secagem apresentada por Gong et al., enquanto a face fria era resfriada por convecção. Ambos os lados eram permeáveis ao transporte de massa.

A condutividade térmica foi considerada constante e os valores testados variaram entre 1 e 20 W/(m K), valores passíveis de serem encontrados para materiais cerâmicos [13, 79, 9]. A condutividade hidráulica (relacionada à permeabilidade) utilizada é representada pela Equação 4.9, e a sensibilidade foi avaliada a partir do uso de diferentes valores de permeabilidade inicial,  $\kappa_0$  (medida em temperatura e pressão ambiente), variando entre  $10^{-14}$  m/s e  $10^{-10}$  m/s.

Por fim, o efeito da curva de sorção adotada (descrita pela Equação 4.8) pode ser avaliada pela porosidade inicial (a qual define a quantidade de água

para saturação do concreto após a sua cura),  $\psi$ , e a quantidade de cimento na composição,  $w_c$ . Os valores de porosidade inicial testados variavam entre 3% e 15% e da quantidade de cimento na composição entre 165 kg/m<sup>3</sup> (7.5 wt.%) e 330 kg/m<sup>3</sup> (15 wt.%).

Na Figura 5.20 (a) é apresentada a pressão máxima encontrada em toda a simulação (tanto no tempo quanto no espaço) em função da condutividade hidráulica inicial  $\kappa_0$  com diferentes valores fixos de condutividade térmica. Duas tendências foram observadas: (i) a diminuição da condutividade hidráulica resulta no aumento do valor máximo obtido durante a simulação, o que é uma consequência direta da lei de Darcy (ver a Equação 3.2); (ii) o aumento da condutividade térmica amplia a pressão máxima observada, o que é explicado pelo aumento da quantidade de energia térmica conduzida no material, implicando em maiores valores de temperatura para posições mais interiores da amostra, e assim, aumentando a temperatura e, por consequência, a pressão do vapor.

Já a Figura 5.20 (b) ilustra a relação entre o máximo valor de pressão obtido como função da porosidade inicial,  $\phi$ , em diferentes valores de massa de cimento utilizado,  $w_c$ . Foi possível concluir que o efeito do teor de cimento na amostra apresenta um efeito mínimo na pressão máxima calculada durante a simulação, enquanto a porosidade inicial, o que efetivamente controla a quantidade de água inicial, pode levar a mudanças de até 90% na pressão máxima calculada.

Como o valor máximo de pressão computado em toda a simulação não traz informações referentes à evolução temporal, e a fim de se obter um maior entendimento do efeito de tais propriedades, análises referentes a evolução temporal de diferentes quantidades, nominalmente a pressão máxima na extensão da amostra, a temperatura na face fria e a quantidade de água evaporável no material, foram também avaliadas.

A Figura 5.21 apresenta tais análises da seguinte maneira: na coluna da esquerda a condutividade hidráulica foi fixada em  $10^{-12}$  m/s e a condutividade térmica,  $\lambda_c$ , variou no intervalo [1,20] W/(m K), enquanto que na coluna da direita  $\kappa_0$  empregado estava entre [ $10^{-14}$ , $10^{-10}$ ] m/s e a condutividade térmica foi fixada em 4 W/(m K).

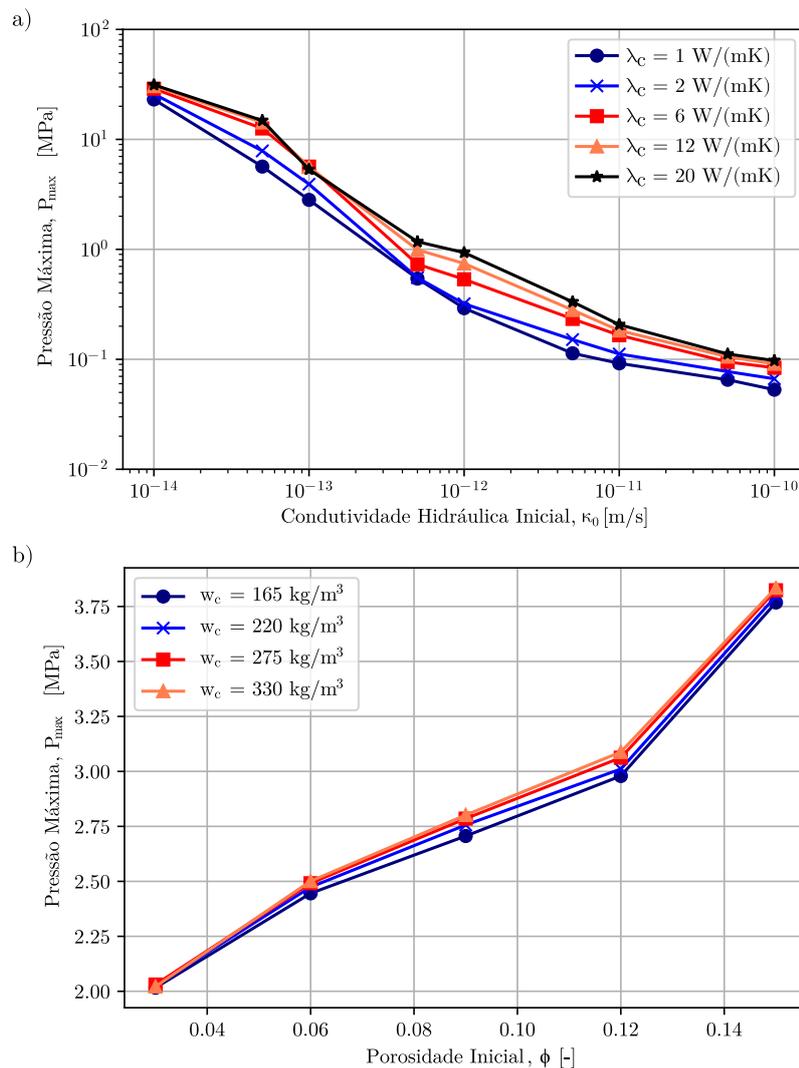


Figura 5.20: Maior valor de pressão de vapor encontrado em toda a simulação em função da (a) condutividade hidráulica inicial em diferentes valores de condutividade térmica constante e (b) porosidade inicial em diferentes valores de teor de cimento.

Conforme apresentado na Figura 5.21 (a), o aumento da condutividade térmica ampliou a pressão máxima obtida, como já evidenciado na Figura 5.20 (a). Além disso, o segundo pico de pressão decorrente da desidratação apresentou uma menor intensidade, porém este apresentou uma maior separação em relação ao primeiro pico. Este comportamento pode ser explicado pelo fato de que uma maior quantidade de água evaporável é removida quando os níveis de pressão são maiores (comportamento também possível de ser visualizado na Figura 5.21 (e)). Quando se reduz a condutividade, e a pressão do vapor é menor, a

quantidade de água evaporável ainda presente quando se inicia a desidratação é maior, e por isto ambos os picos se sobrepõe.

Na Figura 5.21 (b) é possível concluir que o decréscimo da permeabilidade (no caso a condutividade hidráulica) tem um efeito pronunciado na evolução da pressão. Para condutividades hidráulicas menores que  $10^{-13}$  m/s, o segundo pico se torna predominante em momentos mais tardios após um platô de pressão máxima. Este comportamento pode ser explicado pela limitação do fluxo de massa de água proveniente da evaporação devido a baixa permeabilidade até o momento no qual se inicia a desidratação e a pressurização ocorre de maneira repentina.

É possível observar nas Figuras 5.21 (c) e 5.21 (d) o efeito na temperatura da face fria. De maneira já esperada, a diminuição da condutividade térmica retarda o aumento de temperatura nesta região, enquanto o seu aumento promove um perfil muito similar ao da curva de aquecimento aplicada na face quente. Por outro lado, é possível observar que o efeito da permeabilidade é consideravelmente menor, limitando-se no intervalo de 5h a 25h.

A velocidade de remoção da água evaporável foi ampliada com o aumento da condutividade térmica, conforme revelado pela Figura 5.21 (e), justamente devido ao conseqüente aumento dos picos de pressão (e por conseqüência, do seu gradiente e, pela lei de Darcy, do fluxo) observado na Figura 5.21 (a). O efeito da condutividade hidráulica revela comportamento similar, indicando que menores valores iniciais reduzem a velocidade de remoção de água do material até a ocorrência do pico de pressão decorrente da desidratação (observar na coluna da direita, em torno de 25h tanto a Figura 5.21 (f) quanto a Figura 5.21 (b))

Estes resultados indicam que a permeabilidade intrínseca (diretamente relacionada com a condutividade hidráulica avaliada) foi, de fato, o parâmetro de maior impacto nos valores de pressão máxima e de quantidade de água evaporável no material, seguido pela condutividade térmica e a curva de sorção, reforçando as conclusões observadas por Guo e Fey que avaliaram tais aspectos em modelos multifásicos [85, 13].

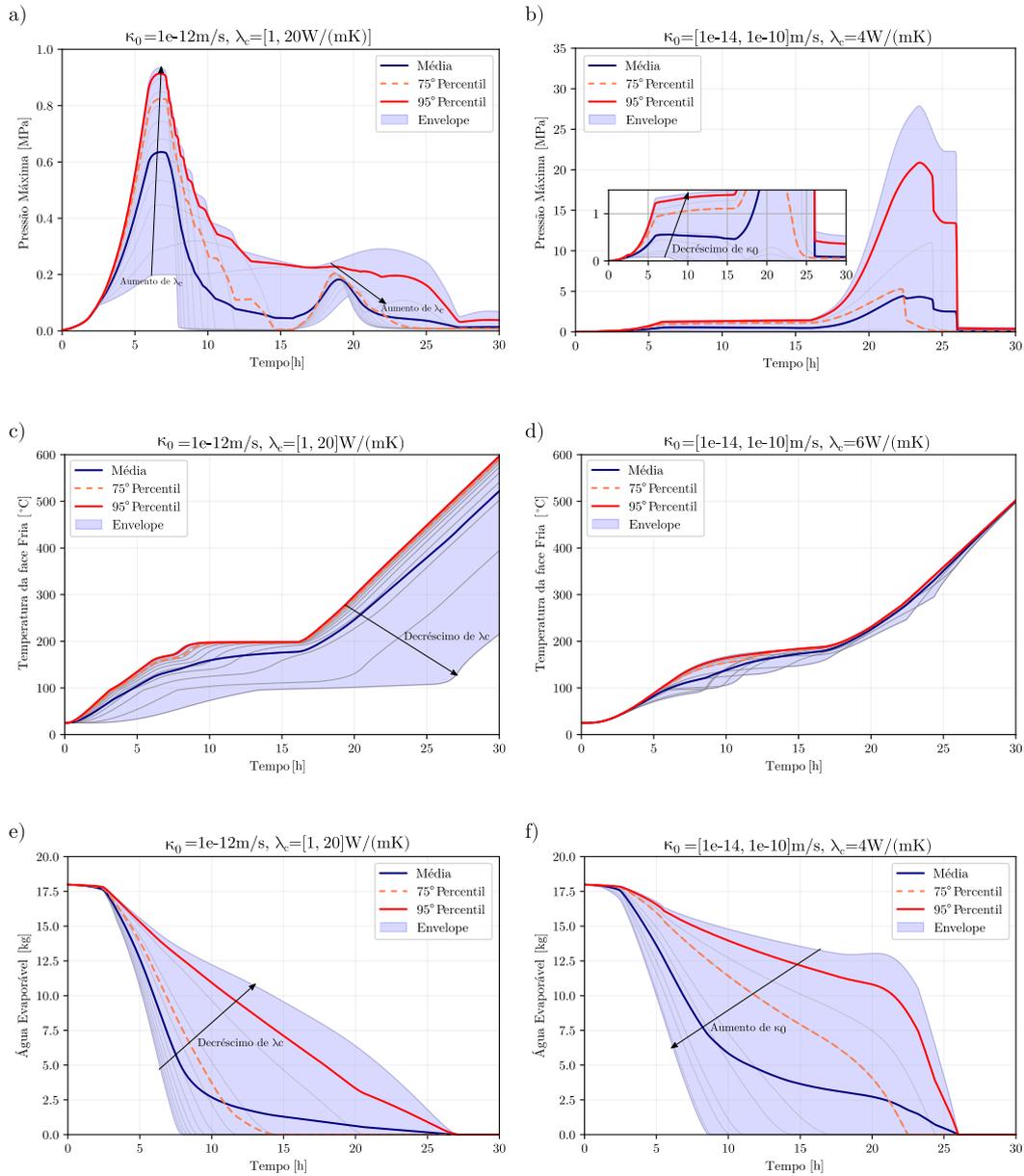


Figura 5.21: Evolução temporal da pressão máxima (a-b), da temperatura na face fria (c-d) e da quantidade de água evaporável (e-f), com valores fixos de permeabilidade inicial (a), (c) e (e), e com a condutividade térmica fixa (b), (d) e (f).

Assim, métodos para a obtenção precisa da permeabilidade durante as conversões de fase e mudanças microestruturais decorrentes do aquecimento, são de elevada importância para prever o comportamento durante a secagem. Estas conclusões fornecem informações importantes para pesquisadores tanto da área de secagem de materiais refratários quanto da área de estruturas de con-

creto de construção civil em incêndios, e justificam esforços para aperfeiçoar a medida destas propriedades.

### 5.7 Simulação de Fibras Poliméricas Utilizando Elementos Mistos

O último conjunto de resultados deste trabalho tem como objetivo apresentar o potencial do modelo monofásico, aprimorado pela abordagem de elementos mistos e implementado usando a plataforma FEniCS. Das diversas estratégias empregadas para aumentar a resistência de concretos de construção civil contra incêndios, ou ainda, para agilizar a secagem de materiais refratários monolíticos, a mais comum é o uso de fibras poliméricas. Estas atuam promovendo um aumento da permeabilidade intrínseca do material a partir de seu amolecimento, seguido de fusão e posterior decomposição. Conforme visto na Seção 5.6, tal aumento promove uma redução da pressão máxima observada [3, 4], sendo inclusive a permeabilidade a propriedade que mais afeta o comportamento durante a secagem.

Assim, o próximo exemplo abordou uma análise qualitativa do efeito do uso de fibras poliméricas como aditivos de aumento de permeabilidade, comparando a incorporação de fibras longas e curtas na composição dos refratários. A fim de realizar esta simulação, as seguintes suposições foram assumidas:

- Um domínio bidimensional, permeável em todos os lados e aquecido por uma de suas faces foi escolhido para representar uma peça de material refratário monolítico (conforme a Figura 5.22);
- As fibras poliméricas foram consideradas como subdomínios da malha com uma permeabilidade constante, seis ordens de magnitude superior do que a permeabilidade inicial do refratário, representando um caso onde a fibra já tenha sido eliminada gerando uma rede de poros interconectados que ampliam o fluxo de massa;
- As intersecções entre as fibras se dão devido a sua queima prévia;
- As propriedades térmicas dos vazios deixados pelas fibras foram assumidas como equivalentes àsquelas do ar ( $\lambda_f = 0,0262 \text{ W/(mK)}$ ,  $C_{p,f} = 1006$

$J/(Kg K)$  e  $\rho_f = 1,2754 Kg/m^3$ ;

- O aquecimento é realizado seguindo a curva de incêndio ISO 834. Embora o material que esteja sendo simulado seja um concreto refratário, este cenário foi escolhido como uma situação extrema, como a da falha do equipamento controlador de aquecimento dos concretos. Esta escolha também serviu para testar a formulação mista já que para taxas mais brandas a formulação primal (a formulação tradicional adotada pelos modelos mais comuns desenvolvidos para a secagem de concretos e/ou concretos da construção civil em incêndios) ainda funcionava. Por fim, essa escolha também torna os efeitos da presença das fibras mais evidente.

Um ponto fundamental que deve ser considerado é que para análises mais detalhadas e quantitativas, diversos aspectos precisam ser levados em consideração, como a simulação das transformações de fase das fibras, o valor correto da permeabilidade nestas regiões, e inclusive avaliar se a lei de Darcy é válida em condições tão específicas, ou se seria necessário o uso de um modelamento de Brinkman acoplando as leis de Darcy e de Stokes.

Para a geração dos subdomínios, um algoritmo em Python foi desenvolvido para espalhar de maneira randômica os subdomínios,  $\Omega_2$ , em todo o domínio,  $\Omega_1$ , o qual consiste em um quadrado com lados de 20cm. Duas categorias de fibras foram consideradas, (i) fibras longas, com comprimento de  $10.5 \pm 3.5$ cm e (ii) fibras curtas, com comprimento de  $5 \pm 2.5$ cm. Uso de fibras consideravelmente maiores do que àquelas encontradas na prática se justifica pelo fato de se objetivar comparar relativamente o uso de fibras grandes e pequenas e também porque fibras muito pequenass demandaria um grande número de pequenos elementos. A descrição total da configuração simulada é apresentada na Figura 5.22 e representa o aquecimento do bloco de refratário pela curva de incêndio ISO 834 [92, 78].

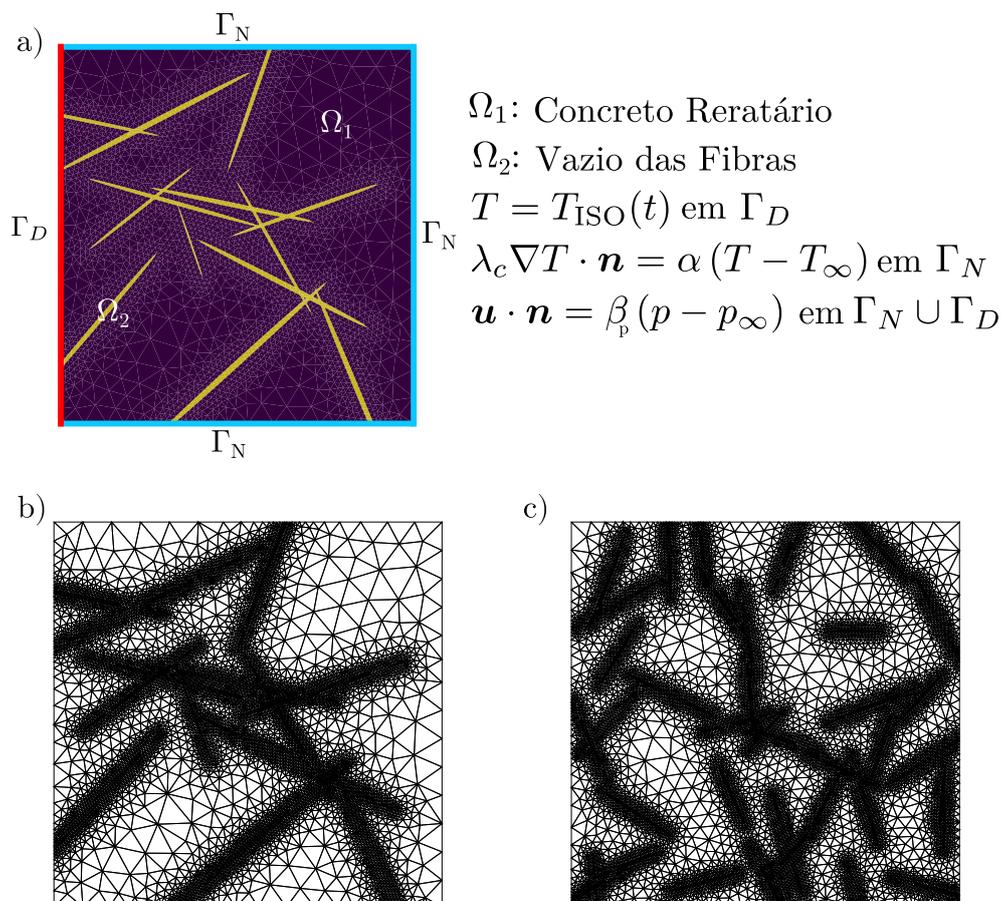


Figura 5.22: Descrição do caso simulado a fim de comparar o efeito de fibras longas e curtas na secagem de concretos refratários (a), malhas usadas para a fibra longa e curta, (b) e (c), respectivamente.

Esta curva de aquecimento foi escolhida pois a taxa de aumento de temperatura é bastante elevada e, conforme alguns estudos preliminares revelaram, em tais condições a formulação primal, resolvida pelo método de Newton-Raphson falhava. Este comportamento pode ser explicado pelo fato da formulação primal não ser localmente conservativa, podendo apresentar oscilações espúrias de massa nas soluções [93]. Enquanto a formulação mista (que ao conhecimento do mestrando, não foi previamente empregada para esta aplicação) foi capaz de reproduzir de maneira correta tais condições tão severas.

As simulações foram realizadas com incrementos de tempo  $\Delta t = 1\text{s}$  e o tempo total simulado foi de 1h. A Figura 5.23 apresenta os resultados bidimensionais de temperatura, pressão e quantidade de água evaporável presente no material (calculada a partir da curva de sorção isotérmica, Equação 4.8).

Nas Figuras 5.23 (a) e (b) é possível observar que as fibras atuaram como barreiras ao fluxo de calor, apresentando regiões mais frias à sua direita. Este comportamento pode ser explicado pelo fato de que as regiões pertencentes ao subdomínio  $\Omega_2$  apresentavam condutividade térmica menor do que a do refratário (o valor utilizado foi o do ar). Isto também explica o porquê a temperatura da face fria permanece baixa mesmo após uma hora do intenso aquecimento. Em todo caso, é necessário se considerar que o cenário bidimensional analisado é extremo uma vez que numa situação real (em três dimensões) o fluxo térmico poderia desviar e passar ao redor do vazio deixado pelas fibras, reduzindo, assim, o efeito observado.

Além disso, quando comparado os tipos de fibra (longas e curtas), é necessário levar em consideração que os domínios randomizados possuem a mesma porosidade aparente (isto é, a razão entre a área das fibras e a área total do domínio), entretanto, as fibras curtas ficaram orientadas perpendicular ao fluxo de calor (para este caso específico) e, portanto, atuaram como uma barreira térmica, reduzindo ainda mais o aquecimento da face fria.

Com relação à pressão de vapor nos poros, as Figuras 5.23 (c) e (d) mostram que as fibras mais longas foram mais eficientes em reduzir a pressão máxima observada no centro da amostra. Novamente deve-se considerar que este efeito é potencializado para a análise bidimensional empregada neste trabalho. Para resultados qualitativos seria necessário considerar toda a geometria em três dimensões, possivelmente se utilizando de resultados tomográficos para reproduzir a orientação das fibras e a sua configuração no espaço.

Em todo caso, estes resultados concordam com observações experimentais realizadas por pesquisadores prévios do grupo de pesquisa, como os resultados apresentados por Salomão et al., o qual reportou que fibras mais longas aumentaram a permeabilidade do material de maneira mais efetiva devido a sua eficiência em gerar interconexões dos poros entre a matriz densa e as regiões menos empacotadas próximas da interface agregado-matriz [94, 95, 96], conforme indicado na Figura 5.24.

Baseado nestes resultados, fibras mais longas podem aumentar a perme-

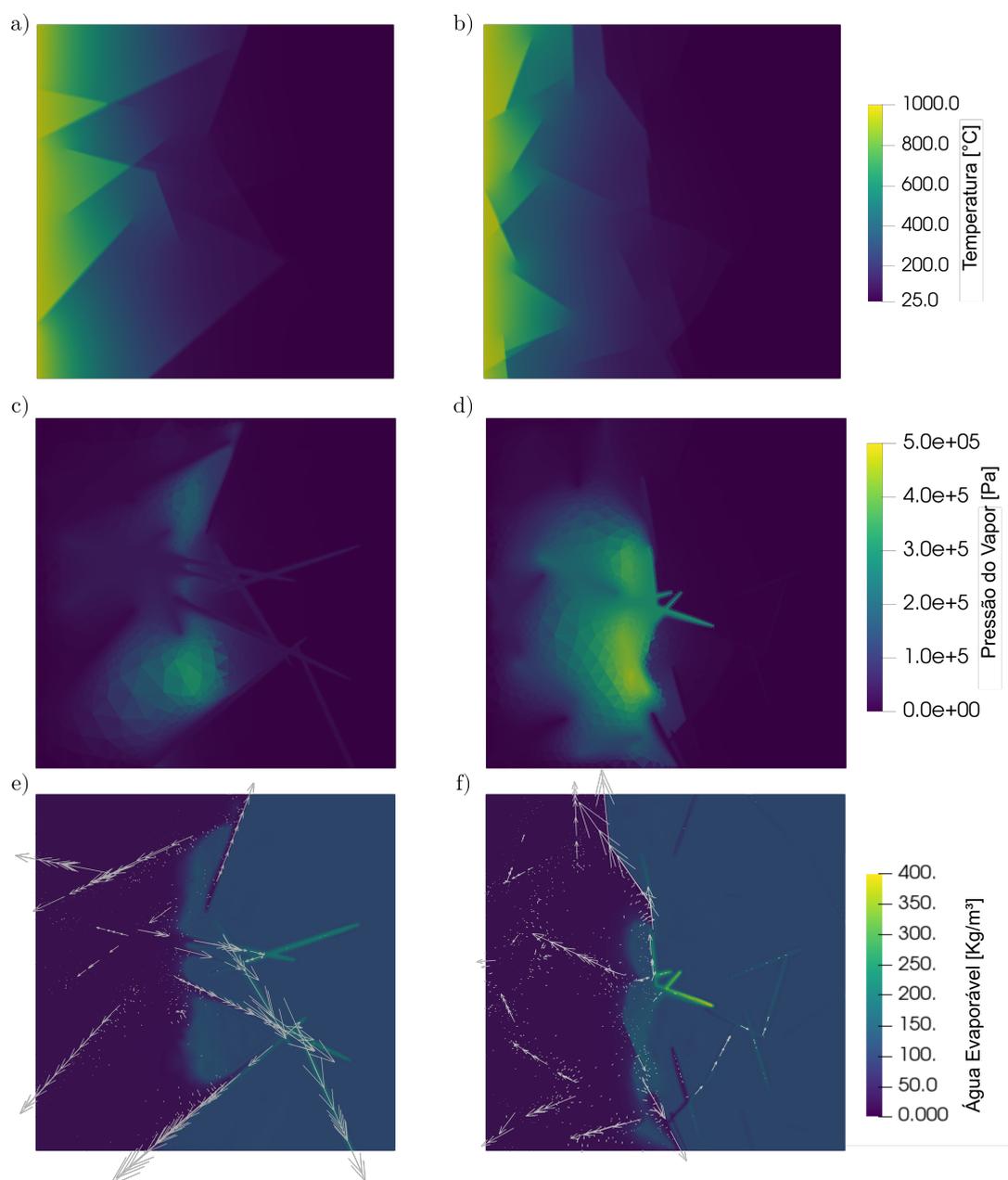


Figura 5.23: Resultados da simulação de fibras longas, (a), (c) e (e), e curtas, (b), (d) e (f), considerando a temperatura, (a) e (b), pressão, (c) e (d), e água evaporável, (e) e (f), após uma hora de aquecimento. Os vetores nas figuras (e) e (f) representam o fluxo de massa calculado diretamente na formulação mista.

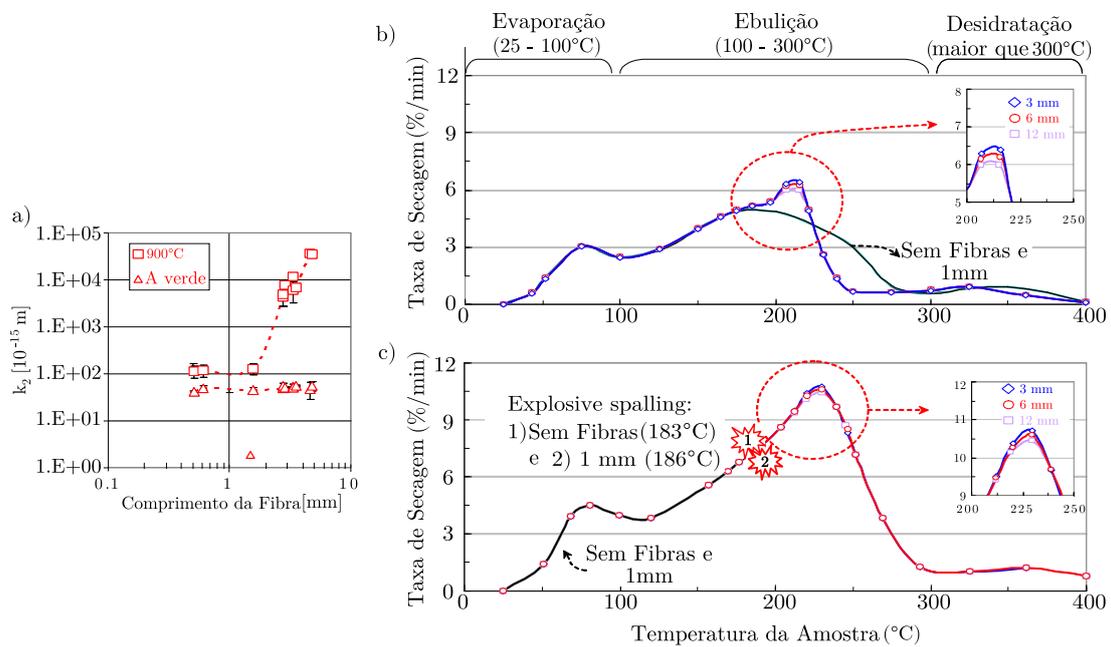


Figura 5.24: (a) Constante inercial de Forchheimer para uma composição refratária monolítica contendo fibras de polipropileno de diferentes comprimentos, tanto para amostras a verde quanto para amostras queimadas (900°C durante seis horas). Resultados de ensaios termogravimétricos de refratários monolíticos contendo fibras de diferentes espessuras, aquecidos com taxas de 10°C/min e 20°C/min, (b) e (c), respectivamente [94, 95].

abilidade em cerca de duas ordens de magnitude quando estas se decompõem durante o aquecimento (Figura 5.24 (a)). Este melhor desempenho amplia a resistência às explosões conforme indicado pelos testes termogravimétricos apresentados nas Figuras 5.24 (b) e (c), especialmente quando comparado com os casos sem fibras, ou fibras muito pequenas (1mm de comprimento), - que explodiram nos testes de TGA aquecidos a uma taxa de 20°C - com as fibras maiores que 6mm - que não explodiram.

Finalmente, em se tratando dos resultados referentes a quantidade de água evaporável no material após uma hora de aquecimento, as Figuras 5.23 (e) e (f), indicam que as fibras mais longas foram mais efetivas para facilitar a remoção de água do material monolítico, o que pode ser observado experimentalmente também para as fibras maiores, com tamanhos entre 3mm e 12mm, conforme apresentado nas Figuras 5.24 (b) e (c).

Análises mais detalhadas precisam ainda serem realizadas para confirmar estas conclusões, tal como considerar o resultado de múltiplas disposições aleatórias obtidas pela rotina em Python tanto para os casos de fibras longas e curtas, ou ainda por meio de análises de um volume elementar representativo e da permeabilidade efetiva resultante destas geometrias distintas.

Assim, foi demonstrado que o modelo monofásico, além de mais simples do que as alternativas multifásicas, também pode ser expandido em formulações mistas que permitem análises em meso-escala, mesmo em condições extremas de aquecimento do material. Além disso, os resultados experimentais confirmaram as conclusões obtidas por meio dos cálculos da simulação, indicando que pelo menos de maneira qualitativa, o modelo foi validado.



## 6 CONCLUSÕES

A secagem de materiais é complexa e amplo objeto de estudo que por natureza exige abordagens interdisciplinares. Considerando apenas os aspectos do modelamento numérico e o foco em concretos, seja para aplicação civil ou refratária, o presente estudo abordou o assunto conforme descrito abaixo:

O estudo bibliométrico permitiu que mais de dez mil documentos distintos fossem analisados e suas conexões estudadas. Foi revelado que a vanguarda dos modelos numéricos reside na área de simulação de incêndios, a qual também tem proposto novos ensaios avançados, os quais permitem avaliar a secagem sem a introdução de sensores que alterem as propriedades locais dos materiais. Além disso, observou-se que o método dos elementos finitos é a principal ferramenta para conduzir tais cálculos e também foi identificado uma ausência de estudos que contabilizavam aspectos experimentais fundamentais associados ao modelamento computacional.

Após a consideração geral das possíveis ferramentas numéricas, a atenção foi dada a quatro modelos selecionados a partir dos quais a grande maioria dos trabalhos foram derivados, tanto no contexto da secagem de materiais refratários quanto na área de concreto a base de cimento Portland em situações de incêndio. Foi possível concluir que existem modelos analíticos pioneiros que lançaram o uso da matemática como ferramenta de análise da secagem de meios porosos, bem como modelos monofásicos que alcançaram ampla popularidade em aplicações tecnológicas e modelos multifásicos que contemplam maior detalhamento. Estes últimos podem ser separados de acordo com simplificações realizadas (como a consideração ou não do efeito da pressão capilar).

Como complementação desta análise teórica, experimentos numéricos foram realizados a partir de modelos implementados em ferramentas computacionais *open source* e que foram checados com os resultados dos trabalhos originais. Ensaios do tipo PTM e de tomografia de nêutrons foram considerados e em ambos notou-se que de maneira geral, o modelo monofásico apresentou resultados similares aos modelos multifásicos, além de possuir maior facilidade de imple-

mentação matemática, caracterização de parâmetros necessários e menor custo computacional.

Para análises mais detalhadas, observou-se a necessidade de considerar os efeitos capilares nos modelos multifásicos, a fim de se garantir a consistência teórica e a capacidade de representar fenômenos observados experimentalmente como o *moisture clogg*.

Devido a compatibilidade do caráter tecnológico da presente dissertação de mestrado com o modelamento monofásico, estudos numéricos detalhados foram realizados usando esta ferramenta, revelando que este modelo apresenta convergência numérica (uma descoberta inédita na literatura) e que as propriedades mais relevantes na tentativa de representar a realidade são a permeabilidade do material, seguida pela condutividade térmica e pela curva de sorção isotérmica.

Por fim, como prova de que o modelo monofásico pode ser utilizado para análises mais avançadas, um modelo baseado na formulação mista (inédito na aplicação de secagem de refratários monolíticos), foi proposto, sendo capaz de avaliar o efeito qualitativo de se utilizar fibras poliméricas, comparando dimensões longas e curtas. As conclusões obtidas deste modelamento concordaram com observações experimentais, indicando que o modelo obtido obteve resultados coerentes e confiáveis.

Em suma, pode-se considerar que todos os objetivos específicos foram alcançados, contemplando uma revisão bibliográfica sistêmica, a apresentação e comparação crítica dos principais modelos, suas implementações por meio da plataforma *open source* FEniCS, comparações diretas entre os cálculos e resultados experimentais, análise de convergência e de sensibilidade do modelo monofásico, e a expansão do modelo simplificado utilizando uma formulação mista. Consequentemente, o objetivo geral foi concluído, restando apenas as sugestões para trabalhos futuros.

## 7 SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Considerando o conhecimento adquirido durante o desenvolvimento do presente mestrado, pode-se listar as seguintes sugestões para futuros trabalhos:

- Acoplar o modelamento termomecânico ao modelo termohidrico de forma que o modelo seja capaz de prever além da pressão o dano no material;
- Propor novos e aprimorar os ensaios experimentais utilizados tanto para caracterização dos concretos refratários fornecendo parâmetros de entrada mais representativos, quanto para a validação destes modelos e o próprio entendimento do fenômeno;
- Realização de testes experimentais em amostras com dimensões mais próximas da escala industrial, com o objetivo de verificar se o comportamento observado em laboratório é representativo ou não e se há efeitos de volume que devem ser considerados na análise dos concretos refratários;
- Realizar o ensaio de tomografia de nêutrons e de raios X para amostras de concretos refratários a fim de se obter uma curva de sorção específica para esta classe de materiais;
- Utilizar os modelos desenvolvidos neste presente estudo para a simulação e subsequente otimização de curvas de secagem por métodos computacionais.



## 8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] SCHACHT, C. *Refractories Handbook*. CRC Press, 2004. (Mechanical engineering). ISBN 9780203026328. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=8ol2plVDQxUC>>.
- [2] C08 Committee. *Terminology Relating to Refractories*. [S.l.], 2018. Disponível em: <<http://www.astm.org/cgi-bin/resolver.cgi?C71-12R18>>.
- [3] LUZ, A. P. D.; BRAULIO, M. A. L.; PANDOLFELLI, V. C. *Refractory castable engineering*. Baden-Baden: Goller Verlag GmbH, 2015. 391-396 p.
- [4] JANSSON, R. *Fire spalling of concrete: theoretical and experimental studies*. Tese (Doutorado) — KTH Royal Institute of Technology, 2013.
- [5] PALMER, G.; COBOS, J.; HOWES, T. The accelerated drying of refractory concrete - part i : A review of current understanding. *Refractories Worldforum*, v. 6, n. 2, p. 75–83, 2014.
- [6] COBANE, I. *Explosive Spalling of Low Cement Castable Refractories - A Dryout Service Company's Experiences, Observations and Recommendations*. 2015. Disponível em: <[http://www.hotwork.com/wp-content/uploads/2015/12/Technical\\_Paper\\_IRE.pdf](http://www.hotwork.com/wp-content/uploads/2015/12/Technical_Paper_IRE.pdf)>. Acesso em: 17 de Março de 2019.
- [7] BAZANT, Z. P.; THONGUTHAI, W. Pore pressure and drying of concrete at high temperature. *ASCE J Eng Mech Div*, v. 104, n. 5, p. 1059–1079, 1978.
- [8] TENCHEV, R. T. et al. Finite element analysis of coupled heat and moisture transfer in concrete subjected to fire. *Numerical Heat Transfer: Part A: Applications*, Taylor & Francis, v. 39, n. 7, p. 685–710, 2001.
- [9] GAWIN, D.; MAJORANA, C.; SCHREFLER, B. Numerical analysis of hygro-thermal behaviour and damage of concrete at high temperature. *Mechanics of Cohesive-frictional Materials: An International Journal on Experiments, Modelling and Computation of Materials and Structures*, Wiley Online Library, v. 4, n. 1, p. 37–74, 1999.
- [10] PONT, S. D.; DURAND, S.; SCHREFLER, B. A multiphase thermo-hydro-mechanical model for concrete at high temperatures—Finite element implementation and validation under LOCA load. *Nuclear Engineering and Design*, Elsevier, v. 237, n. 22, p. 2137–2150, 2007.
- [11] DAUTI, D. *A combined experimental and numerical approach to spalling of high-performance concrete due to fire*. Tese (Theses) — Université Grenoble Alpes, set. 2018. Disponível em: <<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01950731>>.
- [12] GONG, Z.-X. X.; MUJUMDAR, A. S. Review of r&d in drying of refractories. *Drying Technology*, v. 25, n. 12, p. 1917–1925, 2007.

- [13] FEY, K. G. et al. Experimental and numerical investigation of the first heat-up of refractory concrete. *International Journal of Thermal Sciences*, Elsevier Masson SAS, v. 100, p. 108–125, 2016.
- [14] HALL, C. W. et al. *Dictionary of drying*. [S.l.]: Marcel Dekker, Inc., 1979. 100–110 p.
- [15] BAŽANT, Z. P. Analysis of pore pressure, thermal stress and fracture in rapidly heated concrete. In: NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY. *Proceedings International Workshop on Fire Performance of High-Strength Concrete*. [S.l.], 1997. v. 5, p. 155–164.
- [16] OZAWA, M. et al. Study of mechanisms of explosive spalling in high-strength concrete at high temperatures using acoustic emission. *Construction and Building Materials*, Elsevier Ltd, v. 37, p. 621–628, 2012.
- [17] BAŽANT, Z. Z. P.; JIRÁSEK, M. *Creep and hygrothermal effects in concrete structures*. [S.l.: s.n.], 2018. v. 225. ISBN 9789402411362.
- [18] ULM, F. J.; COUSSY, O.; BAŽANT, Z. P. The "chunnel" fire. i: Chemoplastic softening in rapidly heated concrete. *Journal of Engineering Mechanics*, v. 125, n. 3, p. 272–281, 1999.
- [19] STELZNER, L. et al. Thermally-induced moisture transport in high-performance concrete studied by X-ray-CT and <sup>1</sup>H-NMR. *Construction and Building Materials*, Elsevier Ltd, v. 224, p. 600–609, 2019.
- [20] LI, Y.; TAN, K. H.; YANG, E.-H. Synergistic effects of hybrid polypropylene and steel fibers on explosive spalling prevention of ultra-high performance concrete at elevated temperature. *Cement and Concrete Composites*, Elsevier, v. 96, p. 174–181, 2019.
- [21] LUZ, A. et al. Drying behavior optimization of dense refractory castables by adding a permeability enhancing active compound. *Ceramics International*, Elsevier, v. 45, n. 7, p. 9048–9060, 2019.
- [22] POWIERZA, B. et al. Water Migration in One-Side Heated Concrete: 4D In-Situ CT Monitoring of the Moisture-Clog-Effect. *Journal of Nondestructive Evaluation*, Springer US, v. 38, n. 1, 2019.
- [23] DAUTI, D. et al. Analysis of moisture migration in concrete at high temperature through in-situ neutron tomography. *Cement and Concrete Research*, Elsevier, v. 111, p. 41–55, 2018.
- [24] DAUTI, D. et al. Some observations on testing conditions of high-temperature experiments on concrete: An insight from neutron tomography. *Transport in Porous Media*, Springer, p. 1–12, 2020.
- [25] GAWIN, D.; PESAVENTO, F.; SCHREFLER, B. A. What physical phenomena can be neglected when modelling concrete at high temperature? A comparative

- study. Part 1: Physical phenomena and mathematical model. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier Ltd, v. 48, n. 13, p. 1945–1961, 2011.
- [26] HU, X.; DOUGLAS, C. C. An implementation of a coupled dual-porosity-stokes model with fenics. In: SPRINGER. *International Conference on Computational Science*. [S.l.], 2019. p. 60–73.
- [27] ZHANG, Z. A dual-permeability model for anomalous moisture transport in cement-based materials. *Preprints*, MDPI AG, 2019.
- [28] HASSANIZADEH, M.; GRAY, W. G. General conservation equations for multi-phase systems: 1. averaging procedure. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 2, p. 131–144, 1979.
- [29] HASSANIZADEH, M.; GRAY, W. G. General conservation equations for multi-phase systems: 2. mass, momenta, energy, and entropy equations. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 2, n. 4, p. 191–203, 1979.
- [30] HASSANIZADEH, M.; GRAY, W. G. General conservation equations for multi-phase systems: 3. constitutive theory for porous media flow. *Advances in Water Resources*, Elsevier, v. 3, n. 1, p. 25–40, 1980.
- [31] LEWIS, R. W.; SCHREFLER, B. A. *The finite element method in the static and dynamic deformation and consolidation of porous media*. [S.l.]: John Wiley, 1998. 9-68 p.
- [32] PONT, S. D. *Lien entre la perméabilité et l'endommagement dans les bétons à haute température*. Tese (Doutorado) — Marne-la-vallée, ENPC, 2004.
- [33] LEBON, G.; JOU, D.; CASAS-VÁZQUEZ, J. *Understanding non-equilibrium thermodynamics*. [S.l.]: Springer, 2008. v. 295. 37–68 p. ISBN 978-3-540-74252-4.
- [34] DANTAS, L.; ORLANDE, H.; COTTA, R. Estimation of dimensionless parameters of luikov's system for heat and mass transfer in capillary porous media. *International Journal of Thermal Sciences*, Elsevier, v. 41, n. 3, p. 217–227, 2002.
- [35] SMIRNOV, M. On a system of differential equations for highly intensive heat and mass transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 5, n. 6, p. 521–524, 1962.
- [36] CROSS, M.; GIBSON, R.; YOUNG, R. Pressure generation during the drying of a porous half-space. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 22, n. 1, p. 47–50, 1979.
- [37] HALL, C. W. Dimensionless numbers and groups for drying. *Drying Technology*, Taylor & Francis, v. 10, n. 4, p. 1081–1095, 1992.
- [38] LUIKOV, V. A. *Heat and Mass Transfer in Capillary-Porous Bodies*. Oxford: Pergamon Press, 1966. ISBN 9781483225685.

- [39] PALMER, G. et al. The accelerated drying of refractory concrete - part 2 numerical modelling. *Refractories Worldforum*, v. 6, n. 4, p. 89–97, 2014.
- [40] GAWIN, D.; PESAVENTO, F.; SCHREFLER, B. A. What physical phenomena can be neglected when modelling concrete at high temperature? a comparative study. part 2: Comparison between models. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier Ltd, v. 48, n. 13, p. 1945–1961, 2011.
- [41] BENEŠ, M.; ŠTEFAN, R.; ZEMAN, J. Analysis of coupled transport phenomena in concrete at elevated temperatures. *Applied Mathematics and Computation*, Elsevier, v. 219, n. 13, p. 7262–7274, 2013.
- [42] MEUNIER, P. et al. Industrial simulation for pore pressure prediction during the first drying of refractory castables. In: *57th International Colloquium on Refractories*. Aachen, Germany: Höhr-Grenzhausen, 2014. p. 58–62.
- [43] DAVIE, C. T.; PEARCE, C. J.; BIĆANIĆ, N. Coupled heat and moisture transport in concrete at elevated temperatures—effects of capillary pressure and adsorbed water. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, v. 49, n. 8, p. 733–763, 2006.
- [44] GAWIN, D.; PESAVENTO, F.; SCHREFLER, B. A. Comments to the paper “An application of a damage constitutive model to concrete at high temperature and prediction of spalling” by Rosen Tenchev and Phil Purnell [Int. J. Solids Struct. 42 (26)(2005) 6550–6565]. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier, v. 44, n. 11-12, p. 4234–4237, 2007.
- [45] TENCHEV, R.; PURNELL, P. Reply to comments to the paper “An application of a damage constitutive model to concrete at high temperature and prediction of spalling” by Rosen Tenchev and Phil Purnell [Int. J. Solids Struct. 42 (26)(2005) 6550–6565]. *International Journal of Solids and Structures*, Pergamon, v. 44, n. 11-12, p. 4238–4241, 2007.
- [46] TENCHEV, R.; PURNELL, P. An application of a damage constitutive model to concrete at high temperature and prediction of spalling. *International Journal of Solids and Structures*, Elsevier, v. 42, n. 26, p. 6550–6565, 2005.
- [47] ORTIZ, M. A constitutive theory for the inelastic behavior of concrete. *Mechanics of Materials*, Elsevier, v. 4, n. 1, p. 67–93, 1985.
- [48] GAWIN, D.; PESAVENTO, F.; SCHREFLER, B. Modelling of hygro-thermal behaviour and damage of concrete at temperature above the critical point of water. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Wiley Online Library, v. 26, n. 6, p. 537–562, 2002.
- [49] ZHOU, T. et al. Multiscale poromechanics of wet cement paste. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, National Acad Sciences, v. 116, n. 22, p. 10652–10657, 2019.

- [50] MASOERO, E. et al. Nanostructure and nanomechanics of cement: polydisperse colloidal packing. *Physical Review Letters*, APS, v. 109, n. 15, p. 155503, 2012.
- [51] MASOERO, E. et al. Nano-scale mechanics of colloidal C–S–H gels. *Soft matter*, Royal Society of Chemistry, v. 10, n. 3, p. 491–499, 2014.
- [52] SINKO, R.; BAŽANT, Z. P.; KETEN, S. A nanoscale perspective on the effects of transverse microprestress on drying creep of nanoporous solids. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 474, n. 2209, p. 20170570, 2018.
- [53] SINKO, R. et al. Transient effects of drying creep in nanoporous solids: understanding the effects of nanoscale energy barriers. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, The Royal Society Publishing, v. 472, n. 2191, p. 20160490, 2016.
- [54] VANDAMME, M.; BAŽANT, Z. P.; KETEN, S. Creep of lubricated layered nanoporous solids and application to cementitious materials. *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, American Society of Civil Engineers, v. 5, n. 4, p. 04015002, 2015.
- [55] DAUTI, D. et al. Modeling of 3D moisture distribution in heated concrete: From continuum towards mesoscopic approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier Ltd, v. 134, p. 1137–1152, 5 2019.
- [56] OKUBO, Y. Bibliometric indicators and analysis of research systems. *Technology and Industry Working Papers*, p. 8–10, 1997.
- [57] MOED, H. F.; GLÄNZEL, W.; SCHMOCH, U. Handbook of quantitative science and technology research. *Netherlands: Kluwer Academic*, Springer, p. 257–276, 2004.
- [58] ELSEVIER. *Scopus Doment Search*. 2020. <<https://www.scopus.com/home.uri>>. Acessado em: 01/03/2020.
- [59] ROSSUM, G. V.; DRAKE, F. L. *Python 3 Reference Manual*. Scotts Valley, CA: CreateSpace, 2009. ISBN 1441412697.
- [60] DUQUENNOY, M. et al. Développement de capteurs à ondes de surface HF, bas coûts, sur substrat piézoélectrique de type PZT pour le contrôle de structures. In: *Instrumentation et Interdisciplinarité*. [S.l.]: EDP Sciences, 2021. p. 15–26.
- [61] NDAO, S. et al. Sensitivity range optimization of surface acoustic wave humidity ultrasonic sensors incorporating a polyvinyl alcohol (PVA) layer. In: *IEEE. 2019 IEEE SENSORS*. [S.l.], 2019. p. 1–4.
- [62] HASSAN, G. A. et al. On the suitability of a 3D discrete element method to model the composite damage induced by thermal expansion mismatch. *Computational Particle Mechanics*, Springer, p. 1–20, 2019.

- [63] TENGATTINI, A. et al. Quantification of evolving moisture profiles in concrete samples subjected to temperature gradient by means of rapid neutron tomography: Influence of boundary conditions, hygro-thermal loading history and spalling mitigation additives. *Strain*, Wiley Online Library, p. e12371, 2020.
- [64] BERNARDI, P. et al. Simulation methodology for the assessment of the structural safety of concrete tunnel linings based on CFD fire–FE thermo-mechanical analysis: a case study. *Engineering Structures*, Elsevier, v. 225, p. 111193, 2020.
- [65] ALNÆS, M. S. et al. The FEniCS Project Version 1.5. *Archive of Numerical Software*, v. 3, n. 100, 2015.
- [66] LANGTANGEN, H. P.; MARDAL, K.-A. *Introduction to numerical methods for variational problems*. [S.l.]: Springer Nature, 2019. v. 21. 1-131 p.
- [67] ZAUDERER, E. *Partial differential equations of applied mathematics*. [S.l.]: Wiley-Interscience, 2006. 3-5 p. ISBN 9780471690733.
- [68] BENDER, C. M.; ORSZAG, S. A. *Advanced mathematical methods for scientists and engineers I: Asymptotic methods and perturbation theory*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. 146-204 p.
- [69] THOMÉE, V. *From finite differences to finite elements A short history of numerical analysis of partial differential equations*. [S.l.]: Elsevier, 2001. 361–414 p.
- [70] REDDY, J. N. *An introduction to the finite element method*. [S.l.]: McGraw-Hill New York, 1993. v. 2. 109-114 p.
- [71] ARNOLD, D. N.; LOGG, A. Periodic table of the finite elements. *SIAM News*, v. 47, n. 9, p. 212, 2014.
- [72] CUMMINGS, E. M. Modeling the cryosphere with FEniCS. *arXiv preprint arXiv:1609.02190*, 2016.
- [73] GEUZAINÉ, C.; REMACLE, J.-F. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. In: *Proceedings of the Second Workshop on Grid Generation for Numerical Computations, Tetrahedron II*. [S.l.: s.n.], 2007. p. 1309–1331.
- [74] SYSTEMS, D. *ABAQUS UNIFIED FEA*. 2020. <<https://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/>>. Acessado em: 10/07/2020.
- [75] LEBESGUE, H. Intégrale, longueur, aire. *Annali di Matematica Pura ed Applicata (1898-1922)*, Springer, v. 7, n. 1, p. 231–359, 1902.
- [76] JOHNSON, C. *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*. [S.l.]: Courier Corporation, 2012.
- [77] MOREIRA, M. H. et al. Towards a single-phase mixed formulation of refractory castables and structural concrete at high temperatures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. No prelo. 2021.

- [78] ISO/TC 92/SC 2 Fire containment. *Fire-resistance tests — Elements of building construction — Part 2: Requirements and recommendations for measuring furnace exposure on test samples*. [S.I.], 2019. Disponível em: <<https://www.iso.org/standard/75137.html>>.
- [79] GONG, Z. X.; MUJUMDAR, A. S. The influence of an impermeable surface on pore steam pressure during drying of refractory concrete slabs. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 38, n. 7, p. 1297–1303, 1995.
- [80] KALIFA, P.; MENNETEAU, F.-D.; QUENARD, D. Spalling and pore pressure in HPC at high temperatures. *Cement and concrete research*, Elsevier, v. 30, n. 12, p. 1915–1927, 2000.
- [81] AYACHIT, U. *The paraview guide: a parallel visualization application*. [S.I.]: Kitware, Inc., 2015.
- [82] BASTIAN, M.; HEYMANN, S.; JACOMY, M. Gephi: an open source software for exploring and manipulating networks. In: *Third international AAAI conference on weblogs and social media*. [s.n.], 2009. p. 361–362. Disponível em: <<http://www.aaai.org/ocs/index.php/ICWSM/09/paper/view/154>>.
- [83] MOREIRA, M. et al. Data mining on technical trends and international collaborations in the refractory ceramic area. *Ceramics International*, Elsevier, v. 43, n. 9, p. 6876–6884, 2017.
- [84] MINGERS, J.; LEYDESDORFF, L. A review of theory and practice in scientometrics. *European Journal of Operational Research*, Elsevier, v. 246, n. 1, p. 1–19, 2015.
- [85] GUO, F.; YUAN, Y.; MANG, H. A. Determination of the relative significance of material parameters for concrete exposed to fire. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Elsevier, v. 100, p. 191–198, 2016.
- [86] BARAKAT, A.; PEL, L.; ADAN, O. One-Dimensional NMR Imaging of High-Temperature First-Drying in Monolithics. *Applied Magnetic Resonance*, Springer, v. 49, n. 7, p. 739–753, 2018.
- [87] BARAKAT, A. J. et al. Direct observation of the moisture distribution in calcium aluminate cement and hydratable alumina-bonded castables during first-drying: An NMR study. *Journal of the American Ceramic Society*, Wiley Online Library, v. 103, n. 3, p. 2101–2113, 2020.
- [88] BARAKAT, A. et al. The effect of permeability enhancement on dry-out behavior of CA-and microsilica gel-bonded castables as determined by NMR. *Ceramics International*, Elsevier, v. 46, p. 13556–13568, 2020.
- [89] GAJDA, J.; VANGEEM, M. Controlling temperatures in mass concrete. *Concrete international*, v. 24, n. 1, p. 58–62, 2002.

- [90] DAVIE, C. T.; PEARCE, C. J.; BIĆANIĆ, N. A fully generalised, coupled, multi-phase, hygro-thermo-mechanical model for concrete. *Materials and structures*, Springer, v. 43, n. 1, p. 13–33, 2010.
- [91] WEBER, B.; DAUTI, D.; PONT, S. D. Comsol implementation of a porous media model for simulating pressure development in heated concrete. In: *Comsol Conference*. [S.l.: s.n.], 2016.
- [92] BENEŠ, M.; ŠTEFAN, R.; ZEMAN, J. Analysis of coupled transport phenomena in concrete at elevated temperatures. *Applied Mathematics and Computation*, v. 219, n. 13, p. 7262–7274, 2013. ISSN 00963003.
- [93] BREZZI, F.; MARINI, L. D.; PIETRA, P. Two-dimensional exponential fitting and applications to drift-diffusion models. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, SIAM, v. 26, n. 6, p. 1342–1355, 1989.
- [94] SALOMÃO, R.; BITTENCOURT, L.; PANDOLFELLI, V. Advances on the understanding of the role of polymeric fibers as drying additives for refractory castables. In: *Proceedings of the UNITECR*. [S.l.: s.n.], 2005. v. 5, p. 816–820.
- [95] INNOCENTINI, M. et al. Permeability of fiber-containing refractory castables. *American Ceramic Society Bulletin*, v. 81, n. 7, p. 34, 2002.
- [96] LI, Y. et al. Effects of geometry and fraction of polypropylene fibers on permeability of ultra-high performance concrete after heat exposure. *Cement and Concrete Research*, Elsevier, v. 116, p. 168–178, 2019.