

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ

---

FAKULTA STAVEBNÍ



Modelování vývinu hydratačního tepla na betonových  
konstrukcích

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Martin Kubík

Praha, Česká republika

2007

## Prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval samostatně za odborného vedení vedoucího diplomové práce a konzultantů. Dále prohlašuji, že použitá literatura a další podkladové materiály jsou uvedeny na konci diplomové práce v seznamu literatury.

V Praze, dne 12.1.2007

.....

Martin Kubík

## Abstrakt

V této práci je představeno modelování procesu hydratace cementu s použitím nejnovějších fyzikálně-chemických poznatků a numerických postupů. Cílem bylo ověřit správnost modelu simulujícího hydrataci cementové pasty pomocí víceúrovňového (multiscale) modelování, tak aby bylo možné modelovat množství uvolněného hydratačního tepla a tím průběh hydratace v rozsahu celé konstrukce.

Byla použita poslední dostupná verze programu CEMHYD3D v 3.0 vyvinutá pracovníky NISTu [1], jež simuluje průběh hydratace cementové pasty na úrovni mikrostruktury s rozlišením  $1 \mu\text{m}$ . Model hydratace byl implementován jako zdroj tepla pro program TRFEL modelující vedení tepla pomocí metody konečných prvků, vyvíjený na Fakultě Stavební ČVUT [30]. Za použití těchto open-source programů tak proběhlo modelování hydratace cementu pro různé hodnoty vstupů a okrajových podmínek, zejména pak šlo o srovnání vlivu zastoupení jednotlivých slínekových minerálů a průběhů jejich hydratace, vlivu různých hodnot vodního součinitele, jemnosti mletí, vodního režimu ošetřování či okolních teplot v průběhu hydratace, porovnání výsledků s reálně naměřenými hodnotami z experimentů, stejně jako ověřování přesnosti výsledků a rychlosti výpočtů při použití tohoto modelu.

V první části této práce je tak pojednáno o současném pohledu na průběh hydratace cementu a okolnostech které na ni mají vliv. Dále navazuje část představující programy CEMHYD3D a TRFEL včetně popisu teorie vedení tepla a způsobu jeho výpočtu pomocí metody konečných prvků. V další části pak následují výstupy ze simulací provedených s jedním zdrojem tepla, následují simulace provedené na konstrukcích za použití více zdrojů tepla. Jako příloha této práce jsou pak na CD uložena veškerá data z provedených simulací.

## **Abstract**

The object of this study is to model the process of cement hydration using latest physical and chemical knowledge and numerical procedures. The main aim was to verify the multiscale approach of cement hydration so it can be used for the simulations of heat evolution and therefore for simulation of hydration process at a scale of whole structure.

Latest version of CEMHYD3D v3.0 developed at NIST [1], simulating cement hydration on microstructure level with resolution of 1  $\mu\text{m}$ , was implemented as a source of heat for the TRFEL program. TRFEL models the heat transfer using finite element method and was developed at the Faculty of Civil Engineering in Prague [30]. Using these open-source programs, the process of cement hydration was simulated for variety of inputs. Particularly, there were studied following effects; the effects of mineralogical composition, water to cement ratio, fineness, water curing conditions, initial and external temperature as well as a scale of the model. These results were compared with the data from experiments and also the duration of calculation was discussed.

In the beginning of this work, the present knowledge of cement hydration is described together with factors that may affect it. Afterwards, an introduction of CEMHYD3D and TRFEL programs is described including the theory of heat transfer and principle of computing with finite element method. At the end, the results of simulations with one or more sources of heat are presented. A CD with all data from simulations is enclosed.

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod.....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Cementy .....</b>	<b>2</b>
2.1	Obecný popis cementů .....	2
2.2	Výroba a chemické složení cementů.....	3
2.3	Fyzikální a mechanické vlastnosti cementů, přísady a příměsi . .....	5
2.3.1	Fyzikální a mechanické vlastnosti cementů .....	5
2.3.2	Přísady .....	8
2.3.3	Příměsi.....	8
2.4	Hydratace cementu .....	9
2.4.1	Hydratace trikalcium silikátu – $C_3S$ .....	10
2.4.2	Hydratace dikalcium silikátu $\beta$ - $C_2S$ .....	11
2.4.3	Hydratace trikalcium aluminátu – $C_3A$ .....	11
2.4.4	Hydratace kalcium aluminátferitu – $C_4AF$ .....	13
2.4.5	Hydratace ostatních minerálů .....	13
2.4.6	Fáze hydratace .....	15
2.5	Faktory ovlivňující hydrataci .....	18
2.5.1	Měrný povrch cementu.....	18
2.5.2	Vodní součinitel a způsob ošetřování při hydrataci .....	19
2.5.3	Teplota cementové pasty v průběhu hydratace .....	20
2.5.4	Mineralogické složení slínku, přísady a příměsi .....	21
2.6	Složení a vlastnosti zhydratovaného cementu .....	22
2.6.1	C-S-H gel.....	22
2.6.2	Hydroxid vápenatý .....	23
2.6.3	Monosulfát (AFm), trisulfát (ettringit, AFt).....	24
2.6.4	Póry v cementovém kameni .....	25
2.6.5	Voda ve struktuře cementu.....	27

<b>3</b>	<b>Přístupy k modelování hydratace.....</b>	<b>30</b>
<b>4</b>	<b>Popis modelu s jedním zdrojem tepla – program.....</b>	<b>32</b>
	<b>CEMHYD3D verze 3.0 .....</b>	<b>32</b>
4.1	Úvod .....	32
4.2	Popis programu CEMHYD3D verze 3.0 .....	32
4.3	Reálný čas v modelu CEMHYD3D v 3.0 .....	35
4.4	Chemické reakce zahrnuté v CEMHYD3D v 3.0 .....	36
4.5	Modelování křivky zrnitosti cementu .....	37
4.6	Způsob výpočtu hydratačního tepla .....	38
4.7	Grafické výstupy .....	39
<b>5</b>	<b>Popis modelu s více zdroji tepla – program TRFEL.....</b>	<b>41</b>
5.1	Teorie vedení tepla .....	41
5.2	Výpočet vedení tepla pomocí metody konečných prvků.....	42
5.3	Způsob výpočtu pomocí programu TRFEL .....	44
<b>6</b>	<b>Simulace hydratace s jedním zdrojem tepla .....</b>	<b>47</b>
6.1	Úvod .....	47
6.2	Popis referenčního cementu .....	47
6.3	Kalibrace časového kroku .....	48
6.4	Vliv velikosti RVE .....	50
6.5	Simulace průběhu hydratace jednotlivých slínkových minerálů .....	52
6.6	Simulace pro různé vstupní a okrajové hodnoty.....	53
6.6.1	Srovnání hydratace běžného a rychlovazného portlandského cementu .....	53
6.6.2	Srovnání hydratace při různých hodnotách jemnosti mletí.....	55
6.6.3	Srovnání hydratace při saturovaném a uzavřeném vodním prostředí .....	56
6.6.4	Srovnání hydratace při různých počátečních teplotách.....	56

6.6.5	Srovnání hydratace s různými vodními součiniteli .....	57
<b>7</b>	<b>Simulace hydratace s více zdroji tepla .....</b>	<b>59</b>
7.1	Srovnání výsledků simulací s výsledky z experimentu .....	59
7.1.1	Srovnání se simulací s jedním zdrojem tepla .....	59
7.1.2	Srovnání se simulací s více zdroji tepla .....	60
7.2	Simulace hydratace mostní konstrukce pomocí více zdrojů..... tepla .....	62
7.2.1	Zadání a popis konstrukce .....	62
7.2.2	Způsob modelování konstrukce.....	63
7.2.3	Srovnání výsledků simulací hydratace běžného a rychlovazného cementu .....	65
7.2.4	Srovnání výsledků simulací hydratace cementů s různými jemnostmi mletí.....	68
7.2.5	Srovnání výsledků simulací hydratace při různých počátečních a okolních teplotách .....	69
7.2.6	Shrnutí výsledků simulace hydratace mostní konstrukce.....	71
7.2.7	Srovnání rychlosti a přesnosti výpočtů simulací mostní konstrukce . .....	72
<b>8</b>	<b>Závěr.....</b>	<b>74</b>
<b>9</b>	<b>Poděkování.....</b>	<b>76</b>
<b>10</b>	<b>Reference.....</b>	<b>76</b>

# 1 Úvod

Betonové konstrukce na bázi hydraulických cementových pojiv se ve stavební praxi používají přibližně již po dobu 2000 let (pravděpodobně od dob starověkého Říma). Dnes je beton jedním z nejpoužívanějších konstrukčních stavebních materiálů, jeho velkou výhodou z hlediska stavebních konstrukcí je univerzálnost použití stejně jako dobré mechanické vlastnosti v tlaku a možné spojení s ocelí. Další předností betonových konstrukcí ve srovnání s ostatními konstrukčními stavebními materiály je jejich relativně nižší výrobní energetická náročnost, například 2,5 MJ / kg spotřebovanými při výrobě betonu oproti 30 MJ / kg potřebných pro výrobu oceli nebo 6,3 MJ / m<sup>3</sup> v porovnání s 11,1 MJ / m<sup>3</sup> potřebných při výrobě pálených cihel [23]. Ač z technického hlediska ani mezi laickou veřejností není beton považován za nijak technicky náročný a vyspělý materiál, pravdou je, že pochopení a popis chování zejména pak pojiva, vycházející z chemických procesů na molekulární úrovni či mikroskopické úrovni není ještě ani dnes úplné a je předmětem vědeckého výzkumu [15]. Výroba materiálů, fungujících jako pojiva pro výrobu betonu, se začala výrazně zlepšovat a zkvalitňovat teprve od počátku průmyslové revoluce, zatímco modely popisující vlastnosti a hydrataci cementových pojiv na mikroskopické úrovni byly vytvářeny teprve v průběhu druhé poloviny 20. století. Výroba, chování a vlastnosti betonových konstrukcí se dají studovat v mnoha různých směrech, tato práce se bude dále zabývat především průběhem hydratace cementových pojiv a jejím modelováním pomocí výpočetní techniky [19].



## 2 Cementy

### 2.1 Obecný popis cementů

Cement je jemně mletá anorganická látka, která funguje jako hydraulické pojivo. Po smíchání s vodou vytváří cementovou pastu, která posléze tuhne a tvrdne. Po svém zatvrdnutí si i nadále zachovává svoji pevnost a to i ve vodě. Tento proces tvrdnutí a přeměny původních slínkových minerálů na cementový kámen se nazývá hydratace cementu a kromě vytváření pevné struktury při něm dochází k uvolňování tzv. hydratačního tepla. Druhy cementů používané v Evropě tak jak je upravuje evropská norma [4] jsou zobrazeny v Tab. 1.

Druh cementu	Označení	Obsah slínku [%]	Obsah složky [%]	Typ složky
I. portlandský	CEM I	100	-	-
II. portlandský směsný	CEM II/A-S	80 - 94	6 – 20	S
	CEM II/B-S	65 - 79	21 – 35	S
	CEM II/A-M	80 - 94	6 – 20	S, D, P, Q, V, W, T, L
	CEM II/B-M	65 - 79	21 – 35	S, P, Q, V, W, T, L
III. vysokopecní	CEM III/A	35 - 64	36 – 65	S
	CEM III/B	20 - 34	66 – 80	S
	CEM III/C	5 - 19	81 – 95	S
IV. pucolánový	CEM IV/A	65 - 89	11 – 35	D, P, Q, V
	CEM IV/B	45 - 64	36 – 55	D, P, Q, V
V. směsný	CEM V/A	82 - 70	18 – 30	S, P, Q, V
	CEM V/B	50 - 70	30 – 50	S, P, Q, V

Tabulka 1: Druhy a složení cementů dle evropské normy [4].

Použité zkratky u složek cementů jsou:

S = vysokopecní struska, D = křemičitý úlet, P = pucolán přírodní, Q = pucolán průmyslový, V = popílek křemičitý, W = popílek vápenatý, T = kalcinovaná břidlice, L = vápenec

Kromě cementů z Tab. 1 rozeznáváme ještě další druhy speciálních cementů, například cementy bílé, rozpínavé, síranovzdorné, silniční, s nízkým hydratačním teplem, hlinitanové či další, nicméně jejich složení, vlastnosti ani chování nebudou dále popisovány, jelikož jejich studium a simulace jejich hydratace nejsou předmětem této práce [21].

## 2.2 Výroba a chemické složení cementů

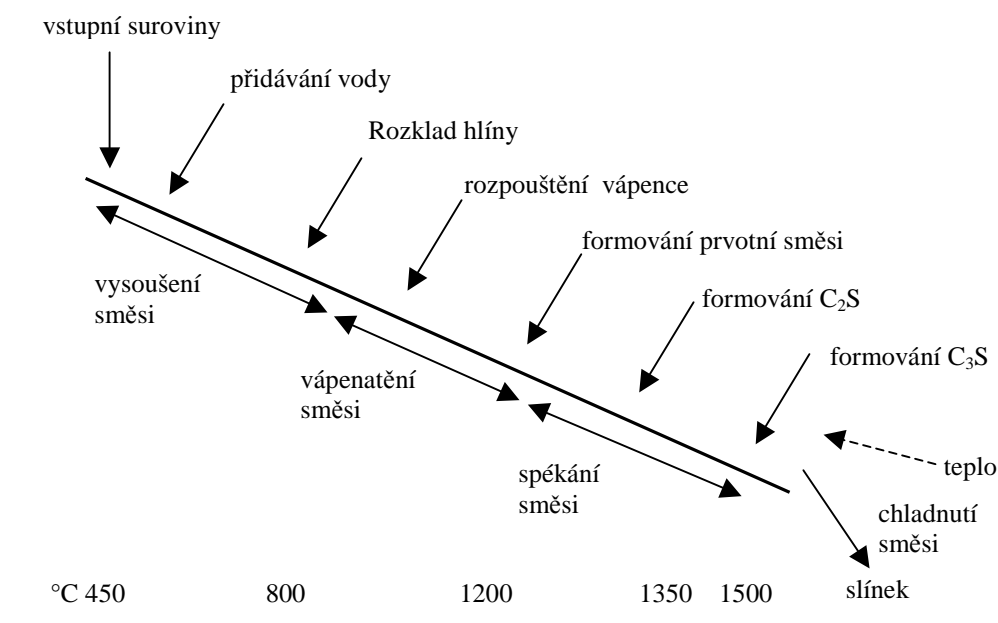
Pro zjednodušení zápisu chemických vzorců se u chemie cementu běžně používají následující zkratky, které budou nadále používány i v této práci: C=CaO, H=H<sub>2</sub>O, S=SiO<sub>2</sub>, F=Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, A=Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, S=SO<sub>3</sub>.

Výroba portlandských cementů probíhá pálením jemně mleté směsi surovin nejméně do jejich slinutí. Existují dvě varianty výroby, tzv. suchý a mokrý způsob, přičemž mokrý způsob je energeticky náročnější, výsledkem je však velmi dobře

Oxid	Obsah [%]
CaO	56 až 69
SiO <sub>2</sub>	16 až 26
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	4 až 8
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1 až 8
MgO	0 až 6
SO <sub>3</sub>	0,5 až 4,5

Tabulka 2: Chemické složení portlandských cementů [23].

zhomogenizovaná směs, zatímco suchý způsob představuje především úsporu energie. Chemické složení cementů je patrné z Tab. 2. Surovinami pro výrobu cementů jsou zejména vápenec a dále slín, hlíny, hlinité břidlice či bauxit [19], [21], [23], [29]. Při výrobě jsou pak tyto suroviny postupně ohřívány v rotačních pecích až na teplotu okolo 1500°C, poté následuje jejich rychlé ochlazení, čímž jako produkt výroby vzniká slínek obsahující tzv. slínkové minerály [19], [28], [29]. Princip výrobní linky je patrný z Obr. 1.



Obr. 1: Schéma výroby cementu [20].

Vzniklé slínkové minerály a jejich běžné zastoupení v portlandském slínku jsou popsány v Tab. 3 a jejich chování v průběhu hydratace je popsáno v kapitole 2.4. Zastoupení jednotlivých slínkových minerálů výrazně ovlivňuje vlastnosti a chování cementu v průběhu hydratace stejně jako konečné vlastnosti betonu při plné hydrataci. Jak je popsáno v kapitole 2.4, lze pomocí mineralogického složení upravovat výsledné pevnosti i jejich nárůsty v průběhu hydratace, časový průběh hydratace, množství uvolňovaného tepla, odolnost proti korozím atd. [6], [21], [28].

Minerál	Vzorec	Obsah ve slínku [% hmotnosti]	
		průměrně	min – max
trikalcium silikát (alit)	3 CaO.SiO <sub>2</sub> C <sub>3</sub> S	63	45-80
dikalcium silikát (belit)	2 CaO.SiO <sub>2</sub> C <sub>2</sub> S	20	5-32
trikalcium aluminát	3 CaO.Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> C <sub>3</sub> A	8	4-16
kalcium aluminát (ferit)	4 CaO.(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ,Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) C <sub>4</sub> AF	7	3-12
volné CaO	CaO	1	0,1-3
volné MgO	MgO	1,5	0,5-4,5

Tabulka 3: Obsah hlavních minerálů v portlandských cementech [21], [23], [28].

## 2.3 Fyzikální a mechanické vlastnosti cementů, přísady a příměsi

### 2.3.1 Fyzikální a mechanické vlastnosti cementů

Veličiny, běžně užívané pro popis cementů a betonových směsí, důležité z hlediska hydratace jsou následující:

- pevnost cementu v tlaku
- počátek a doba tuhnutí
- objemová stálost
- objemová a sypná hmotnost
- měrný povrch cementu
- množství uvolněného hydratačního tepla
- množství cementu v 1m<sup>3</sup> betonu
- vodní součinitel

Z hlediska pevnosti cementu v tlaku rozeznává evropská norma [4] 3 třídy normalizované pevnosti 32,5, 42,5 a 52,5 označované podle pevnosti v tlaku v MPa. Cementy s rychlým nárůstem pevností se označují písmenem R. Pro jednotlivé třídy cementů pak norma upravuje nárůst hodnot pevností v tlaku a to ve 2. nebo v 7. a 28. dni po smíchání s vodou. Zároveň stanovuje minimální dobu počátku tuhnutí od okamžiku smíchání s vodou. Ta nastává při běžných teplotách přibližně po 3-5 hodinách, minimální hodnoty dle normy [4] jsou 60, respektive 45 minut.

Cementová pasta je v průběhu hydratace relativně objemově stálá. S postupem hydratace většinou dochází k jejímu smršťování zejména vlivem chemického smrštění, smrštění je také způsobeno vysycháním cementové pasty. Následkem dochází ke smrštění cementového kamene přibližně o hodnotu 0,5 až 0,8 mm / 1m po 28 dnech od smíchání cementu s vodou. Norma [4] zároveň předepisuje maximální expanzi cementové pasty, k němuž však dochází pouze v případě že slínek obsahuje nadměrné množství volného CaO a MgO. Objemová hmotnost portlandských cementů se pohybuje od 3050 do 3150 kg / m<sup>3</sup>, ve volně loženém stavu má pak přibližně třetinovou hodnotu. Objemová hmotnost betonové směsi je pak pro běžné betony rovna přibližně 2500 kg /m<sup>3</sup>, ale je dosti odvislá od objemové hmotnosti použitého kameniva či použití provzdušňujících přísad a příměsí [21], [23].

Měrný povrch cementů se pohybuje v rozmezí 225 až 600 m<sup>2</sup> / kg dle Blaina, u běžných portlandských cementů se jeho hodnota obvykle pohybuje okolo 300 m<sup>2</sup> / kg [22]. Při tomto měrném povrchu je přibližně 17% zrn větších než 50 μm, 33% zrn v rozmezí 25 až 50 μm, 27% zrn v rozmezí 10 až 25 μm, a 23% zrn menších než 10 μm [23]. Cementy s vyšším měrným povrchem rychleji a úplněji hydratují, nicméně jejich výroba je energeticky náročnější a zároveň vykazují větší smrštění.

Množství uvolněného hydratačního tepla je odvislé od zastoupení jednotlivých

slínekových minerálů, potenciální hodnoty tepla uvolněné jednotlivými slínekovými minerály jsou patrné z Tab. 7. Obecně lze říci, že rychlovažné cementy a cementy s vyšší pevností vzhledem ke svému mineralogickému složení uvolňují více tepla a uvolňují ho intenzivněji. Pro běžné portlandské cementy uvádějí různí autoři hodnoty množství uvolněného potenciálního tepla  $Q_{pot}$  v rozmezí 430 až 500 J / g, viz. reference v [20].

Množství cementu v  $1\text{m}^3$  betonové směsi je určováno jednak požadavky na odolnost proti vnějším vlivům a jednak omezením hodnoty maximálního smrštění. Je udávána hodnota přibližně 100 kg cementu do  $1\text{m}^3$  betonové směsi aby došlo ke vzájemnému spojení všech zrn kameniva. Aby prostý beton odolával povětrnostním vlivům, měl by obsahovat alespoň 200 kg cementu, pokud se jedná o železobeton měla by tato hodnota být rovna nejméně 240 kg. Pro zajištění odolnosti železobetonu proti účinkům mrazu by pak měla betonová směs obsahovat minimálně 240 až 265 kg cementu na  $1\text{m}^3$  betonu. Naopak, z hlediska smršťování cementové pasty se u vodostavebních betonů neodporčuje dávka cementů větší než 320 až 400 kg cementu, jako maximální hranice je pro dávku cementu obecně udávána hodnota 500 kg na  $1\text{m}^3$  betonové směsi [21], [23].

	1 nm			1 $\mu\text{m}$			1 mm	1 cm	1 dm
Tuhé látky							písek	štěrka	
						kamenná moučka			
				SiO <sub>2</sub> úlety		cement		ocelová vlákna	
						popílek			
				barevné pigmenty		skelná vlákna			
Póry	gelové póry	kapilární póry							
	$10^{-9}\text{m}$	$10^{-8}\text{m}$	$10^{-7}\text{m}$	$10^{-6}\text{m}$	$10^{-5}\text{m}$	$10^{-4}\text{m}$	$10^{-3}\text{m}$	$10^{-2}\text{m}$	$10^{-1}\text{m}$

Tabulka 4: Charakteristické velikosti složek betonu [23].

Zhydratovaný beton obsahuje útvary od velikostí menší než 1 nm až po částice veliké několik cm. Základní přehled velikostí jednotlivých složek betonu při plné hydrataci viz Tab. 4, detailnější popis viz kapitola 2.6.

### 2.3.2 Přísady

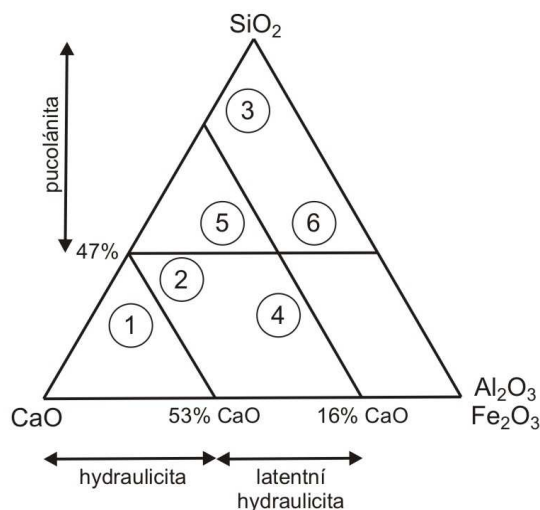
Přísady jsou chemické sloučeniny, které se přidávají do cementu většinou během míchání za účelem změny vlastností betonu při hydrataci nebo jeho finálních vlastností. Jedná se převážně o prášky nebo tekutiny, přičemž jejich hmotnost nepřekračuje 5 % hmotnosti cementu. Jejich účinnost je většinou tím vyšší čím větší je měrný povrch cementových částic a dle způsobu jakým modifikují vlastnosti cementu je lze rozdělit do dvou typů. Prvním typem jsou ty přísady, jež ovlivňují kinetiku hydratace tak, že rozpouštějí slínkové minerály avšak nevstupují s nimi do chemické reakce. Druhým typem jsou povrchově aktivní látky, které se adsorbují na povrchu zrn cementu a jsou buď hydrofilní nebo hydrofobní [21], [23]. Přísady dělíme podle účelu za jakým jsou do betonu přidávány na:

- Plastifikační (redukující vodu)
- Ztekující (velmi redukující vodu)
- Provzdušňující
- Stabilizační, hydrofobní a těsnící
- Zrychlující nebo zpomalující tuhnutí a tvrdnutí
- Protizmrazující

### 2.3.3 Příměsi

Jsou práškovité minerální látky, které se přidávají do cementové směsi při mletí slínku nebo do čerstvého betonu za podobným účelem jako příměsi. Jejich poměrné množství vůči cementu bývá obvykle větší než u přísad a podle způsobu reakce se slínkem se dají také rozdělit do dvou skupin. První skupinou jsou inertní příměsi mezi které řadíme mleté horniny, moučky (filery), a pigmenty. Druhou

skupinou jsou latentně hydraulické látky kam patří popílký, pálené hlíny, strusky, pucolány a křemičité úlety (silika). Pozice těchto hydraulických a pucolánových látek je patrná z Obr. 2 [21], [23].



Obr. 2: Pozice hydraulických a pucolánových látek v potrojném diagramu CaO – SiO<sub>2</sub> – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), 1 – portlandské cementy, 2 – vysokopecní cementy, 3 – křemičité úlety (silika), 4 – popílký bohaté na CaO, 5 – popílký bohaté na SiO<sub>2</sub>, 6 – pucolánové popílký [23].

V této diplomové práci nebudou již přísady a příměsi popisovány více do hloubky, vzhledem k tomu že zkoumání a modelování jejich vlivu na hydrataci vyžaduje další parametry, které by se musely získat kalibrací konkrétního betonu.

## 2.4 Hydratace cementu

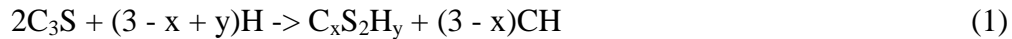
K hydrataci cementu dochází po smíchání slínku s vodou. V jejím průběhu pak postupně dochází ke vzniku jemných krystalů a pevných vazeb v cementové směsi a zároveň k uvolňování tepla. Základními slínkovými materiály jsou C<sub>3</sub>S, C<sub>2</sub>S, C<sub>4</sub>AF a C<sub>3</sub>A.

Současný pohled na reakci jednotlivých fází cementu je následující:



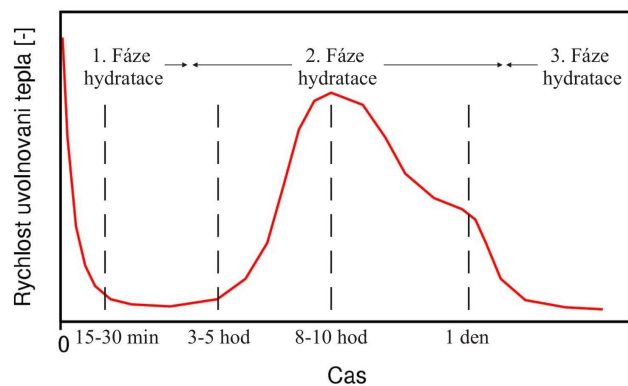
## 2.4.1 Hydratace trikalcium silikátu – C<sub>3</sub>S

Existuje více formulací rovnice hydratace C<sub>3</sub>S, nicméně tyto formulace se vždy liší pouze v poměrech množství zreagované vody a vzniklých produktů. V obecném tvaru se tak dá zapsat pomocí parametrů „x“ a „y“:



Produkty této hydratace jsou dva typy CSH gelu a Ca(OH)<sub>2</sub>. Typ vzniklého C-S-H gelu pak závisí na parametrech „x“ a „y“ dle [29] takto:

CSH (I), tj. destičkovité útvary, vzniká pokud se „x“ nachází v intervalu 0,5 až 1,5 a „y“ v intervalu 0,5 až 2,5. CSH (II), tj. vláknité struktury, vzniká pokud se „x“ nachází v intervalu 1,5 až 2,0 a „y“ v intervalu 1,0 až 4,0. C<sub>3</sub>S je díky svému největšímu objemovému zastoupení nejdůležitější složkou cementu, je nejvíce odpovědný za množství uvolněného hydratačního tepla, výsledné pevnosti cementu, jakož i dotvarování, smršťování a dalších vlastností cementu [6], [9], [29].



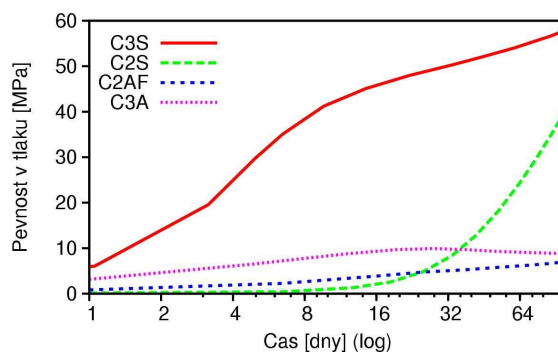
Obr. 3: Časový průběh množství uvolněného tepla v průběhu hydratace [23].

## 2.4.2 Hydratace dikalcium silikátu $\beta$ - $C_2S$

Stechiometricky se reakce hydratace  $\beta$  -  $C_2S$  (dále jen  $C_2S$ ) opět definuje nejlépe pomocí proměnné „x“:



Výsledné produkty této hydratace jsou obdobné jako u hydratace  $C_3S$ , hodnota „x“ se pohybuje nejčastěji okolo 4 a proto je vzniklý CSH gel vždy spíše typem (II), tj. vláknité struktury [23]. V porovnání s  $C_3S$  probíhá tato reakce mnohem pomaleji a tudíž má mnohem nižší intenzitu uvolňování hydratačního tepla. Po  $C_3S$  je  $C_2S$  druhou nejobsáhlejší složkou, z toho důvodu je po  $C_3S$  také druhý nejdůležitější z hlediska výsledné pevnosti, smršťování a dotvarování, na rozdíl od  $C_3S$  však přispívá díky své delší a pozdější hydrataci spíše do dlouhodobé pevnosti cementu [9], [23], [29].



Obr. 4: Vývoj pevnosti cementové pasty v závislosti na jednotlivých složkách.

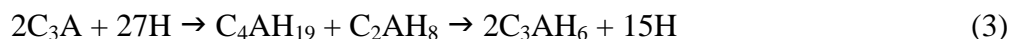
## 2.4.3 Hydratace trikalcium aluminátu – $C_3A$

Reakce  $C_3A$  je silně ovlivněna přítomností sádrovce. Výsledné produkty reakce v závislosti na poměru  $C_3A$  a sádrovce jsou patrné z Tab. 5.

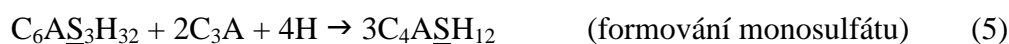
$\underline{C}\underline{S}\underline{H}_2 / \underline{C}_3\underline{A}$	produkt hydratace
> 3	trisulfát a sádrovec
3	trisulfát
1 – 3	trisulfát a monosulfát
1	monosulfát
< 1	monosulfát a $\underline{C}_4\underline{A}\underline{H}_{13}$ , $\underline{C}_2\underline{A}\underline{H}_8$ nebo $\underline{C}_3\underline{A}(\underline{C}\underline{S}, \underline{C}\underline{H})\underline{H}_{12}$
0	$\underline{C}_3\underline{A}\underline{H}_6$

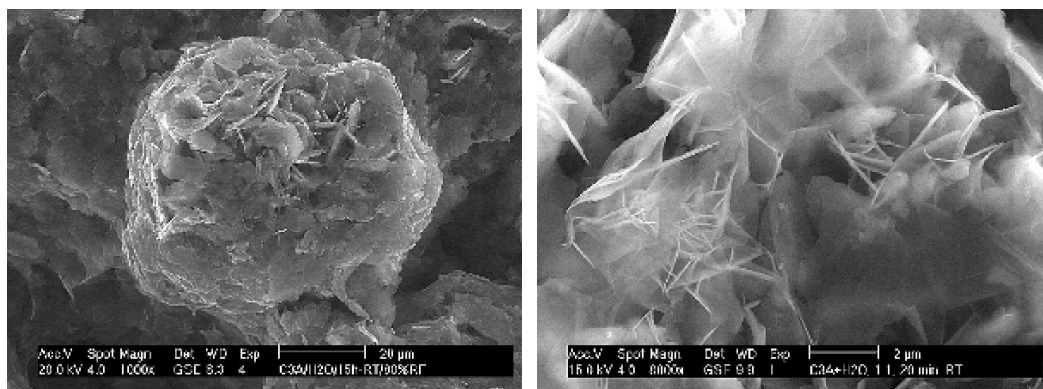
Tabulka 5: Závislost produktu hydratace na poměru sádrovec /  $\underline{C}_3\underline{A}$  [28].

Při hydrataci cementu bez obsahu sádrovce reaguje  $\underline{C}_3\underline{A}$  rychle a uvolňuje velmi mnoho hydratačního tepla. Hydratačními produkty jsou za teplot okolo 20°C nestabilní  $\underline{C}_4\underline{A}\underline{H}_{19}$  a  $\underline{C}_2\underline{A}\underline{H}_8$ , které se dále rozpadají a přeměňují se na  $\underline{C}_3\underline{A}\underline{H}_6$  a vodu, a které ve struktuře vytvářejí póry snižující výsledné mechanické vlastnosti cementu. Experimenty prokázaly, že při hydrataci kolem 80°C již nedochází k vytváření meziproductů a  $\underline{C}_3\underline{A}$  reaguje přímo na  $\underline{C}_3\underline{A}\underline{H}_6$  a vodu. Reakce bez přítomnosti sádrovce lze tedy popsat následovně:



Při reakci cementu s obsahem sádrovce dochází ke vzniku ettrignitu. V počátečních fázích reakce tak vzniká především trisulfát ( $\underline{C}_6\underline{A}\underline{S}_3\underline{H}_{32}$ ) označovaný jako AFt ve tvaru hexagonálních prismať. Ten se pak při dostatku  $\underline{C}_3\underline{A}$  přeměňuje v pozdní fázi hydratace na monosulfát ( $\underline{C}_4\underline{A}\underline{S}\underline{H}_{12}$ ) označovaný jako AFm mající tvar pseudohexagonálních destiček. Formování ettrignitu lze popsat následujícími reakcemi:



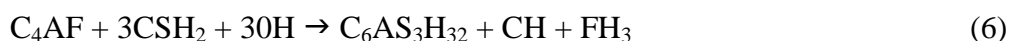


Obr. 5: Obrázek hydratujícího C3A bez přítomnosti sádrovce [26].

V případě nedostatku sádrovce v pozdějších fázích hydratace reaguje přebytečný C<sub>3</sub>A stejně jak bylo popsáno výše při hydrataci cementu bez obsahu sádrovce [9], [23], [27], [29].

#### 2.4.4 Hydratace kalcium aluminátferitu – C<sub>4</sub>AF

Reakce C<sub>4</sub>AF je mnohem pomalejší než reakce C<sub>3</sub>A a je výrazně ovlivněna množstvím železa. Podobně jako C<sub>3</sub>A vytváří i C<sub>4</sub>AF za přítomnosti sádrovce trisulfát, tuto reakci lze popsat následovně:



Tento vztah je platný pro pokojové teploty, při teplotě hydratace okolo 70°C se C<sub>4</sub>AF přeměňuje spíše na monosulfát [9], [23], [29].

#### 2.4.5 Hydratace ostatních minerálů

Jak bylo zmíněno výše, v cementu se nachází ještě volný oxid vápenatý a hořečnatý. Reakce při hydrataci oxidu vápenatého je shodná s hašením vápna, tedy:

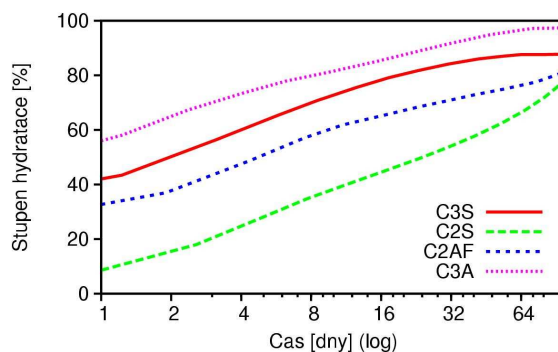


Reakce je však velmi pomalá [29]. Oxid hořečnatý pak reaguje ještě pomaleji a je spíše vázán ve struktuře  $C_3S$  a dalších slínekových minerálů. Způsobuje zároveň hořečnaté rozpínání a proto je jeho maximální množství omezeno evropskou normou [4] na 5%.

Jednotlivé slínekové minerály cementu reagují každý s různou intenzitou. Minerály tak lze seřadit do posloupnosti podle kinetiky reakce následovně [23]:



Výsledné produkty hydratace, vzniklé smícháním cementových zrn a vody, zabírají ve zhydratovaném stavu přibližně 2,2 násobek objemu, který zabírala cementová zrna před zamícháním s vodou. V průběhu hydratace cementový kámen postupně zvětšuje svůj objem do prostoru kde se nachází voda za jejího současného spotřebovávání. Ve chvíli, kdy dojde ke zhydratování cementových zrn, tak zbylá voda, buď přebytečná nebo ta, která už se nemůže dostat do prostoru nezhydratovaných částí zrn, zůstane uzavřená v tzv. kapilárních pórech, více viz. kapitola 2.6.4 [16].



Obr. 6: Časový průběh stupně hydratace jednotlivých slínekových minerálů [23].

Složka cementu	Vzorec	Hustota [kg / m <sup>3</sup> ]	Molární hmotnost [kg / mol]	Molární objem [10 <sup>-5</sup> m <sup>3</sup> / mol]
Alit	C <sub>3</sub> S	3.150	0,228	7,24
Belit	C <sub>2</sub> S	3.280	0,172	5,24
C <sub>3</sub> A	C <sub>3</sub> A	3.030	0,270	8,92
Ferit	C <sub>4</sub> AF	3.730	0,486	13,03
Voda	H	998	0,018	1,80
Sádrovec	CSH <sub>2</sub>	2.320	0,172	7,41
Hydroxid vápenatý	CH	2.240	0,074	3,31
AFm, saturovaný	C <sub>4</sub> ASH <sub>12</sub>	1.990	0,623	34,6
AFm, vysušený	C <sub>4</sub> ASH <sub>8</sub>	2.400	0,551	22,9
Aft, saturovaný	C <sub>6</sub> AS <sub>3</sub> H <sub>32</sub>	1.750	1,255	71,7
Aft, vysušený	C <sub>6</sub> AS <sub>3</sub> H <sub>7</sub>	2.380	0,805	33,8
C-S-H (I), vysušený	C <sub>3,4</sub> S <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1.440	0,365	25,2
C-S-H (II), vysušený	C <sub>3,4</sub> S <sub>2</sub> H <sub>3</sub>	1.750	0,365	21,1

Tabulka 6: Přehled základních složek cementu včetně jejich vlastností [10].

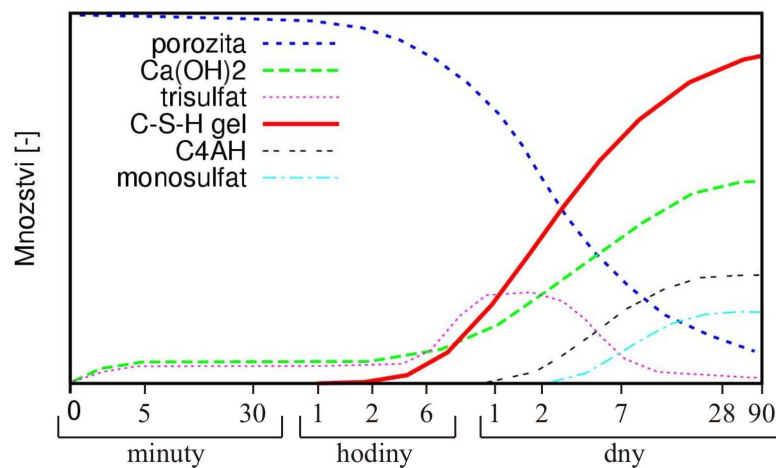
#### 2.4.6 Fáze hydratace

Hydrataci cementu lze rozdělit do tří fází. Každá z nich se vyznačuje určitým stupněm vývoje tepla, délkou trvání i probíhajícími reakcemi.

První fáze se nejčastěji nazývá indukční fáze a trvá přibližně 1 až 2 hodiny po smíchání slínku s vodou. Dělí se na dvě dílčí části. První (předindukční) část je velmi krátká, trvá přibližně 10-15 minut a probíhá v ní smáčení zrn cementu. Vyznačuje se vývojem hydratačního tepla které trvá krátkou dobu a při rozpuštění určitého množství C<sub>3</sub>A v ní dochází k rozpuštění aluminátů a síranů za vzniku Ca(OH)<sub>2</sub> a etringnit (AFt). Druhá část indukčního období (dormantní) již zdaleka neuvolňuje tolik tepla jako první část. I nadále se v ní utváří etringnit (AFt), začínají se rozpouštět první silikáty a vytvářet tak zárodky krystalů CH a C-S-H. Díky tomu se začíná zvyšovat viskozita cementového tmelu, jehož chování je však stále

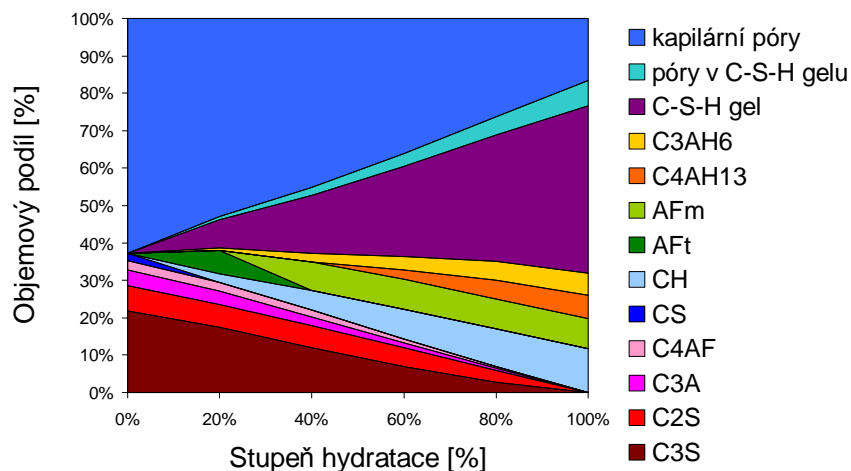
bližší viskózní kapalině [9], [23].

Druhá fáze hydratace (akcelerační) probíhá přibližně do 12 až 24 hodin po smíchání slínku a vody. V této fázi dochází k hydrataci  $C_3S$ , o něco později pak k hydrataci  $C_4AF$ , čímž dojde k vytvoření základů mikrostruktury cementového kamene. Výsledkem hydratace v této fázi je zejména dlouhovláknitý C-S-H gel, jehož vláknitá struktura spojuje jednotlivá zrna cementu a jehož vznikem se výrazně zvyšuje měrný povrch. V průběhu této fáze také přetrvává formování etringnitu (AFt). Díky hydrataci zejména  $C_3S$  se tato fáze vyznačuje nejvýraznějším vývojem hydratačního tepla a po jejím skončení je cementová pasta již ve formě tuhé látky s pevností v tlaku až 20 MPa [9], [23].



Obr. 7: Množství jednotlivých složek cementu v průběhu hydratace [14], [23].

Třetí fáze hydratace (decelerační) pak může trvat i několik let a je možné jí rozdělit opět do dvou částí. První část trvá přibližně do 28 dnů od smíchání slínku s vodou a dochází v ní k několika dějům. Nastává hydratace  $C_2S$ , etringnit se postupně přeměňuje z formy AFt do formy AFm (monosulfát) a vznikají fáze drobnovláknitého C-S-H gelu. Společně s tím se postupně snižuje uvolňování hydratačního tepla. Ve druhé části, zhruba po 28 dnech, začíná cementová pasta „dozrávat“, což se vyznačuje rekrystalizací fází v prostoru mezi zrny cementu [9], [23].



Obr. 8: Objemové zastoupení jednotlivých složek cementu v závislosti na stupni hydratace [10].

Jak už bylo zmíněno výše, množství uvolněného hydratačního tepla se liší v různých fázích dosti výrazně. Zatímco  $C_3S$  uvolní během prvních 3 dnů hydratace přibližně 240 kJ / kg,  $C_2S$  hydratuje mnohem pomaleji a i v nejrychlejších fázích své hydratace neuvolní více než cca 5 kJ / kg / den.

Minerál	Potenciální hydratační teplo $Q_{pot}$ [kJ / kg]
$C_3S$	490 – 515
$C_2S$	225 – 250
$C_3A$	910 – 1 350
$C_4AF$	335 – 430

Tabulka 7: Potenciální množství hydratačního tepla jednotlivých slínekových minerálů. viz. reference v [20].

Uvolněné teplo je zároveň velmi odvislé od teploty při hydrataci, při 20°C uvolňují standardní portlandské cementy maximálně 10 kJ / kg / h, při 40°C již cca



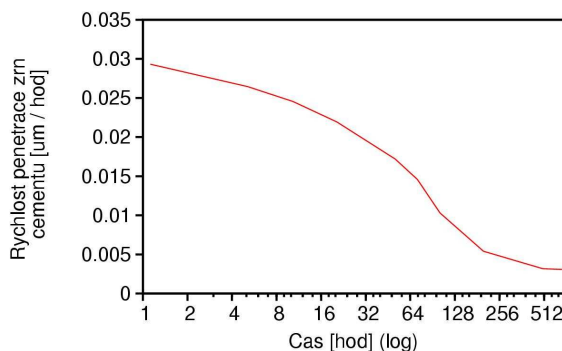
25 kJ / kg / h [23]. Potenciální hydratační teplo uvolněné jednotlivými minerály je patrné z Tab. 7.

## 2.5 Faktory ovlivňující hydrataci

Rychlost hydratace, uvolňování hydratačního tepla a výsledné mineralogické složení samozřejmě není pokaždé shodné, nýbrž závisí na mnoha faktorech. Primárním faktorem ovlivňujícím průběh hydratace je mineralogické složení slínku a jeho jemnost mletí, nicméně hydratace je významně ovlivněna i přítomným množstvím vody, teplotou při hydrataci a přísadami a příměsmi přítomnými ve slínku.

### 2.5.1 Měrný povrch cementu

Tento faktor výrazně ovlivňuje zejména rychlost hydratace a uvolňování hydratačního tepla, zároveň může mít vliv na výslednou strukturu zhydratovaného cementu. Hydratace cementových zrn probíhá od jejich povrchu, rychlost penetrace cementových zrn je pro druhou fázi uváděna v rozmezí  $0,02 \mu\text{m} / \text{h}$  pro



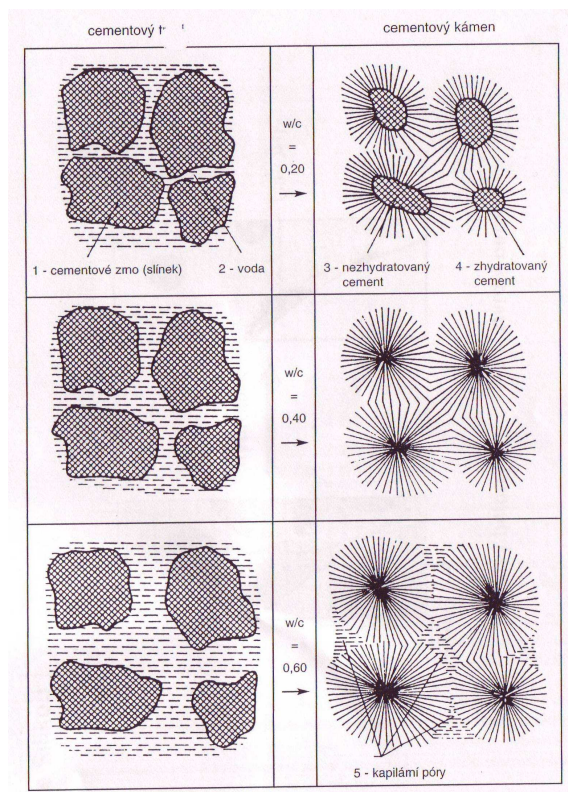
Obr. 9: Průměrná rychlost penetrace zrn cementu v průběhu hydratace [3].

cementy s vysokým zastoupením  $\text{C}_2\text{S}$  až po  $0,07 \mu\text{m} / \text{h}$  pro cementy s vyšším zastoupením  $\text{C}_3\text{S}$ . Ve třetí fázi hydratace je již rychlost velmi malá a její hodnota

je nižší než  $0,01 \mu\text{m} / \text{h}$  [3]. Celkově se uvádí že hloubka hydratace za 6 měsíců dosahuje od 3 až po  $15 \mu\text{m}$ , což vzhledem k velikosti zrn slínku až  $120 \mu\text{m}$  znamená, že největší zrna u hrubě mletých cementů vůbec nezhydratují celá a jejich jádra se stanou plnivem v cementovém kameni, čímž se snižuje pevnost zhydratovaného cementu. Jemnost mletí zároveň ovlivňuje rozložení pórů ve zhydratovaném cementu, čím větší jemnost mletí, tím více se zvyšuje poměrné zastoupení menších kapilárních pórů o velikosti  $10^{-7}$  až  $10^{-8}$  m, které nemají zásadní vliv na snížení výsledné pevnosti cementu [14], [23].

### **2.5.2 Vodní součinitel a způsob ošetřování při hydrataci**

Vodní součinitel ovlivňuje zejména výslednou strukturu zhydratovaného cementu, v menší míře ovlivňuje i rychlost hydratace. Pro úplnou hydrataci slínku je potřeba vodní součinitel přibližně 0,25, dalších přibližně 13% z hmotnosti cementu se spotřebuje na nevypařitelnou (non-evaporable) vodu vázanou ve vrstvách gelu. Proto při vodním součiniteli větším než přibližně 0,38 vznikají nadbytečné póry v cementovém kameni i při plné hydrataci. Tyto kapilární póry mají velikost řádově  $10^{-5}$  až  $10^{-8}$  m a snižují výslednou pevnost cementu. Pokud je vodní součinitel nižší než 0,38 nebo pokud není cement při hydrataci řádně ošetřován, dochází ke spotřebování vody ještě v průběhu hydratace. Jádra cementových zrn tak plně nezhydratují, od určité doby dochází ke zpomalení hydratace a výsledek je stejný jako u hrubě mletých cementů, tj. snížení pevnosti [14], [23].



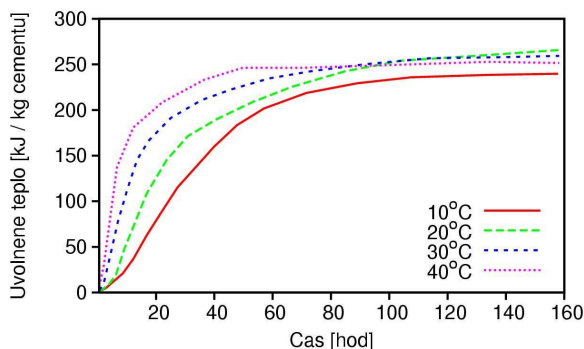
Obr. 10: Závislost struktury cementového kamene při úplné hydrataci na jemnosti mletí a vodním součiniteli [25].

### 2.5.3 Teplota cementové pasty v průběhu hydratace

Teplota během hydratace má vliv hlavně na rychlost hydratace. Při standardní teplotě okolo 20°C až 25°C dochází k vrcholu rychlosti hydratace ve druhé fázi zhruba po 12 hodinách od zamíchání slínku s vodou. Nicméně při teplotách hydratace více než 40°C se tento vrchol objevuje již po méně než 6 hodinách a naopak při teplotách okolo 10°C lze vrchol rychlosti hydratace pozorovat až po 24 hodinách od počátku hydratace. Při teplotách okolo 0°C se pak hydratace již téměř zastaví. Změnu v rychlosti hydratace v závislosti na teplotě popisuje Arrheniův zákon [11]:

$$\Delta a = \exp \left[ - \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \frac{E_a}{R} \right] \quad (8)$$

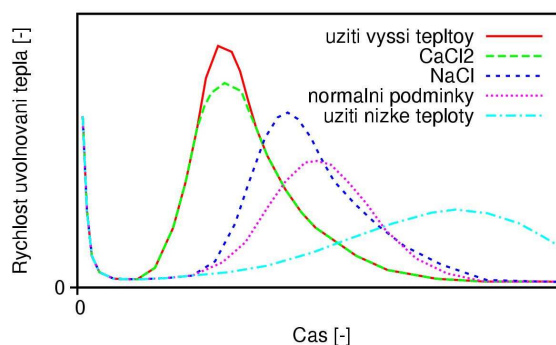
kde  $\Delta a$  je rychlost nárůstu stupně hydratace oproti referenční teplotě,  $E_a$  je aktivační energie cementu,  $R$  je molární plynová konstanta a  $T_1$  je referenční teplota a  $T_2$  je porovnávaná teplota při hydrataci. Zvyšování teploty cementu potažmo betonu při hydrataci lze použít pro urychlení hydratace, avšak způsobuje vznik hrubších krystalů ve struktuře cementu a tím vede ke snížení výsledné pevnosti v důsledku menších spojení mezi těmito krystaly. Ve struktuře zároveň vznikají tahová napětí v důsledku velkých teplotních gradientů a rozpínání vlhkého vzduchu, proto se při hydrataci nedoporučuje teplota vyšší než 60°C [3], [23].



Obr. 11: Experimentálně zjištěné množství uvolněného hydratačního tepla v závislosti na teplotě při hydrataci. [11].

#### 2.5.4 Mineralogické složení slínku, přísady a příměsi

Mineralogickým složením lze samozřejmě také výrazně usměrnit hydrataci cementu, poměrem  $C_3S$  a  $C_2S$  lze řídit uvolňování tepla a rychlost nárůstu pevností v jednotlivých fázích hydratace. Poměrem sádrovce a  $C_3A$  je možné řídit uvolněné množství hydratačního tepla v prvotních fázích hydratace a zároveň lze předejít vzniku nežádoucích pórů při nedostatku sádrovce [23]. Vliv přísad a příměsí byl pak již popsán v předchozích kapitolách.



Obr. 12: Časový průběh uvolňování hydratačního tepla v závislosti na působení různých činitelů [27].

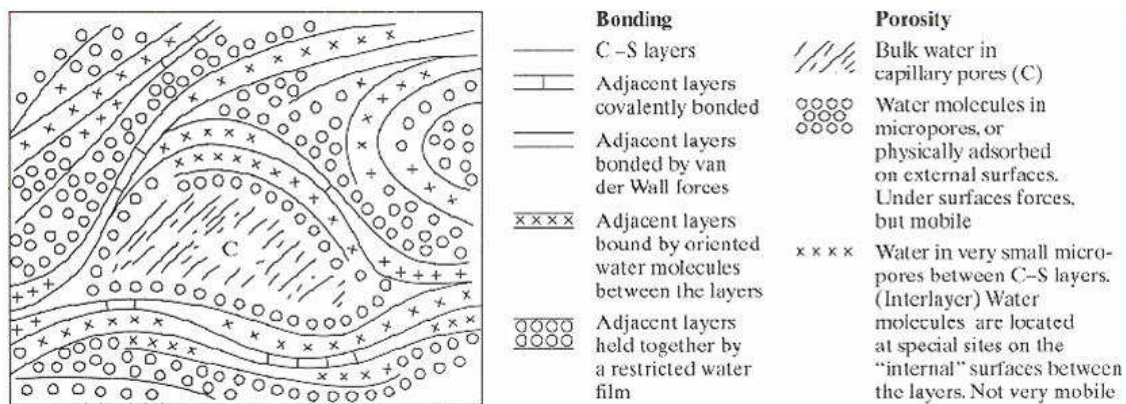
## 2.6 Složení a vlastnosti zhydratovaného cementu

Ve zhydratovaném cementu rozlišujeme 3 základní produkty hydratace, jimiž jsou C-S-H gel, hydroxid vápenatý a monosulfát. Dalším významným vznikajícím prvkem hydratace je AFt, který je však v jejím průběhu znovu spotřebován. Kromě těchto složek obsahuje většinou cementový kámen i při plné hydrataci ještě částice nezhydratovaného slínku a vodu.

### 2.6.1 C-S-H gel

Jedná se o složku nejvíce zastoupenou v rámci cementového kamene při plné hydrataci, která zabírá přibližně 50 až 60 % z objemu pevné fáze zhydratovaného cementového kamene. Tvoří jej souhrn hydratačních produktů obsahujících stejné složky, které jsou však v rámci jednotlivých typů gelů různě poměrově zastoupeny. V současné době rozpoznáváme přinejmenším 4 základní typy gelu [9], nicméně není vyloučeno že v budoucnu budou popsány i další. Gel vytváří velmi malé struktury, formující se ve tvaru od dlouhých jehliček až po síťovitou strukturu v závislosti na typu gelu. Více o jednotlivých typech viz. Tab. 8. Měrný povrch gelu má velmi vysokou hodnotu pohybující se v rozmezí od 100 až do 700

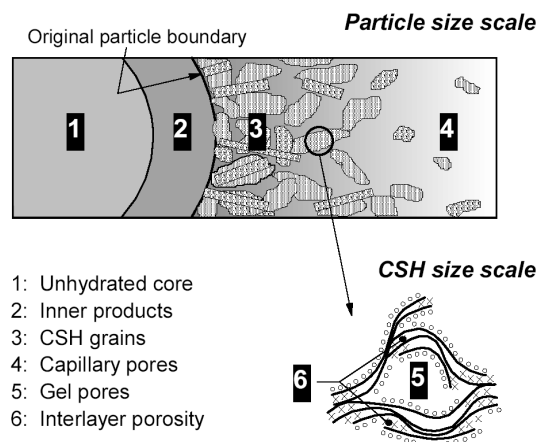
$\text{m}^2 / \text{g}$ , zároveň obsahuje tzv. gelové póry o velikosti od 0,5-2,5 nm, které obsahují vázanou vodu. Díky svým rozměrům a struktuře jsou proto pro chování a zejména pevnost gelu rozhodující van der Waalsovy síly, které způsobují, že C-S-H gel je rozhodujícím činitelem z hlediska celkové pevnosti cementového kamene [7], [16]. Model C-S-H dle Feldmana a Seredy je zachycen v Obr. 13.



Obr. 13: Model C-S-H gelu dle Feldman – Sereda [5].

## 2.6.2 Hydroxid vápenatý

Těž nazývaný jako portlandit, zabírá přibližně 20 až 25 % z objemu pevné fáze v plně zhydratovaném cementovém kameni. Na rozdíl od C-S-H gelu má jasně definovanou stechiometrii a jeho chemické složení lze tak vyjádřit jako  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ . Není porézní a v průběhu hydratace vytváří velké krystaly šestiúhelníkového tvaru, které se seskupují ve větších počtech a formují tak velké destičkovité útvary. Celková velikost i tvar těchto útvarů je však zároveň dosti ovlivněna velikostí volného prostoru a teplotou při hydrataci. Příspěvek hydroxidu vápenatého do celkové pevnosti cementového kamene není příliš vysoký právě díky jeho velikosti a tudíž malému měrnému povrchu [7], [9], [16].



Obr. 14: Schéma cementového zrna v průběhu hydratace. 1 - nezhydratované jádro cementového zrna, 2 - hydratující část zrna, 3 - C-S-H gel, 4 - kapilární pór, 5 - gelové póry, 6 - voda mezi jednotlivými vrstvami C-S-H gelu [15].

### 2.6.3 Monosulfát (AFm), trisulfát (ettringit, AFt)

Monosulfát (AFm) tvoří přibližně 15 až 20 % objemu z výsledné struktury cementového kamene. Jak už bylo zmíněno výše, trisulfát (ettringit, AFt) se ve zhydratovaném cementu již nevyskytuje, jelikož ještě v průběhu hydratace dojde k jeho přeměně na AFm. Oba mají jasný stechiometrický zápis, přičemž monosulfát vytváří destičky ve tvaru šestiúhelníku, zatímco trisulfát vytváří jehlicovité útvary. Ani jeden nemá větší vliv na celkovou pevnost cementového kamene, naopak jejich přítomnost snižuje odolnost cementu vůči síranové korozi [9], [16], [23].

Produkt	Měrná hmotnost [kg / m <sup>3</sup> ]	Charakteristická velikost [μm]	Podíl objemu [%]	Morfologie
C-S-H (I)	2 100 až 2 600	0,005	50 – 60	Jehličky až vlákna, 1 μm dlouhé, 0,1 μm v průměru, směřují z cementových zrn do prostoru vyplněného vodou
C-S-H (II)				Propletená síťová struktura, gel obklopuje nezhydratovaná cementová zrnka a ostatní produkty, nachází se pouze v C <sub>3</sub> S
C-S-H (III)				Malé nerovnoměrně rozmístěné zploštěné částičky, rozměry většinou do 0,3 μm napříč
C-S-H (IV)				Velmi hustá struktura gelu, většinou v prostoru původního zrnka cementu
CH	2 240	10-100	20 – 25	Krystalky, 10 až 100 μm dlouhé
AFm	1 950	0,1 – 1	15 – 20	Tenké hexagonální krystalky, rozměr přibližně 1 μm v průměru, 0,1 μm v průřezu
AFt	1 750	1 – 10	-	Jehličky, tyčinkové krystalky, rozměr 10 μm na délku, 0,5 μm v průměru

Tabulka 8: Přehled produktů hydratace [9], [23].

#### 2.6.4 Póry v cementovém kameni

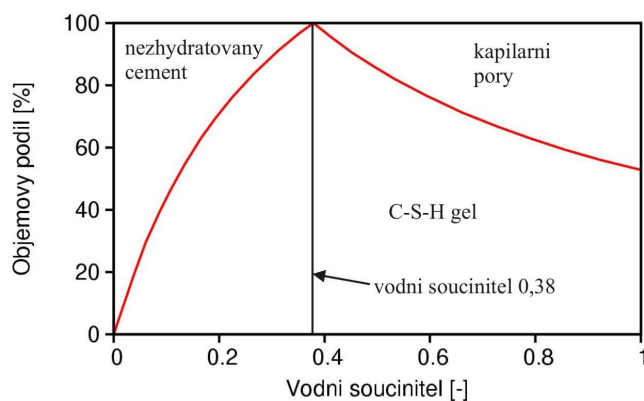
Cementový kámen i při plné hydrataci obsahuje mnoho pórů velikostí od 1 nm až po několik mm. Jejich počet a rozložení má významný vliv na vlastnosti a chování cementového kamene.

Nejmenšími póry ve struktuře cementového kamene jsou tzv. gelové póry. Nacházejí se mezi jednotlivými vrstvami C-S-H gelu a zabírají tak přibližně 28 % z jeho celkového objemu. Jejich velikost je řádově několik nm. Jsou tedy příliš malé na to, aby mohly způsobit snížení pevnosti cementového kamene, nicméně



pokud v nich dojde k vysušení vody, mají velký vliv zejména na smršťování a dotvarování [16], [23].

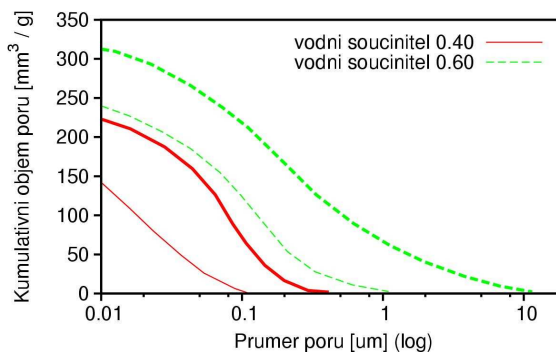
Dalším typem pórů, nacházejících se v cementovém kameni, jsou kapilární póry. Jejich počet a velikosti jsou silně odvislé od vodního součinitele a částečně od zrnitosti cementové směsi. V cementovém kameni se nacházejí v prostoru, který v průběhu hydratace zůstane nevyplněn produkty hydratace. Proto jsou u dobře zhydratovaného cementu s optimálním vodním součinitelem kapilární póry zhruba o velikostech mezi 10 nm až 1  $\mu\text{m}$ , nicméně v průběhu hydratace nebo u cementů s příliš vysokým vodním součinitelem mohou dosahovat velikostí až 5  $\mu\text{m}$ . Díky způsobu vzniku není jejich tvar pravidelný. Kapilární póry větší než 50 nm označujeme jako makropóry, jelikož svou přítomností ovlivňují spíše mechanické vlastnosti cementu, především jeho pevnost. Naopak póry menší než 50 nm označujeme jako mikropóry, a v souvislosti s jejich vysycháním ovlivňují smršťování cementového kamene a dotvarování betonu. Celkově lze tedy konstatovat, že vlastnosti cementového kamene ovlivňují kapilární póry spíše rozložením své velikosti než absolutním počtem [16], [23].



Obr. 15: Poměr objemového zastoupení C-S-H gelu, pórů a nehydratovaných částic ve struktuře cementu v závislosti na vodním součiniteli [9].

Posledním typem pórů, nacházejícím se ve struktuře cementového kamene, jsou

vzduchové póry. Jsou to póry se vzduchem lapeným do struktury cementu při jeho míchání s vodou, anebo při použití provzdušňujících přísad. Jsou řádově větší než kapilární póry, jejich velikost se obvykle pohybuje mezi 50 až 200  $\mu\text{m}$ , avšak někdy může dosahovat až 3 mm. Svým tvarem jsou vždy kulové a vzhledem ke své velikosti mají výrazný vliv na pevnost cementového kamene [16] , [23].



Obr. 16: Vývoj zastoupení a velikosti pórů v průběhu hydratace. Tlustá čára představuje zastoupení pórů po 3 dnech od počátku hydratace, tenká po 14 dnech [12].

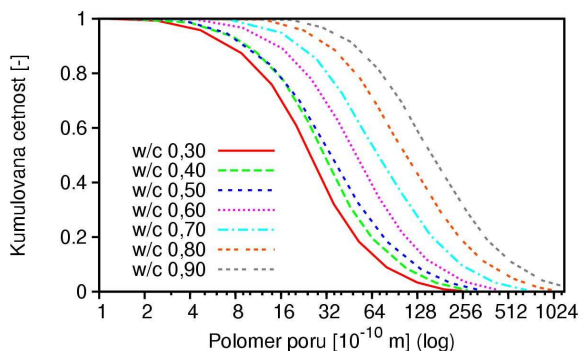
V rámci betonové směsi vzniká často ještě jeden druh pórů. Jsou nazývány technologické a sedimentační. V principu se opět jedná o vzduchové póry, nicméně velikost těchto pórů může být v některém směru až 1cm, a spíše než o póry v cementovém kameni se jedná o mezery mezi cementovým kamenem a kamenivem. Vznikají zejména v důsledku technologické nekázně v průběhu betonáže, např. špatným zhutněním nebo sedimentací jemných částic a samozřejmě velmi negativně ovlivňují pevnost betonu jako celku i jeho ostatní vlastnosti [23].

### 2.6.5 Voda ve struktuře cementu

Voda je v rámci cementového kamene vázána na několika úrovních.

Na nejvyšší úrovni se vyskytuje jako tzv. kapilární voda. Nachází se kapilárních

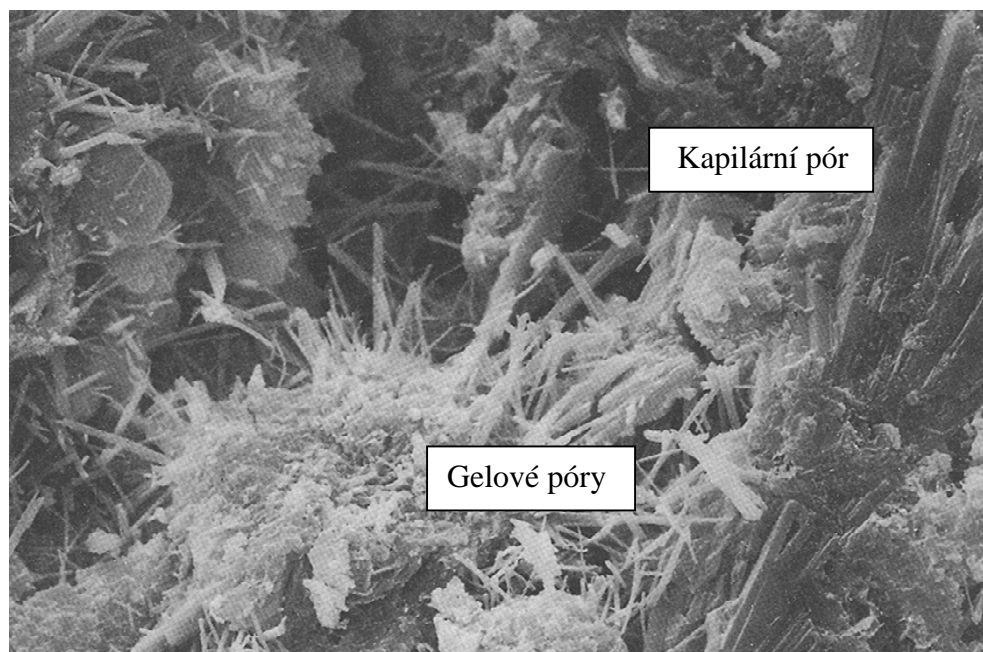
pórech o velikosti více než 5 nm, a proto není silně vázána přitažlivými silami k povrchu pevných částic. Z hlediska vlivu na cementový kámen při jejím odpařování ji lze rozdělit do dvou kategorií. První kategorie se nazývá volná voda. Ta se nachází v pórech větších než 50 nm, a při jejím odpaření nedochází ke smršťování cementového kamene. Naopak voda v kapilárách menších než 50 nm již při svém odpaření smršťování způsobuje [9], [16].



Obr. 17: Rozložení velikosti pórů v závislosti na vodním součiniteli [23].

Následující typ vody nacházející se ve struktuře cementu je voda adsorbovaná. Jedná se o vodu která je fyzikálně vázaná k povrchu pevných částic cementového kamene pomocí přitažlivých sil. Vzhledem k velikosti těchto sil se tato voda nachází v kapilárních pórech přibližně do vzdálenosti 6-ti molekul, tj. přibližně 1,5 nm od povrchu pevných částic. K jejímu odpaření dochází až při vysoušení cementového kamene na úroveň cca 30 % relativní vlhkosti vzduchu, a její odpaření způsobuje smršťování cementové pasty [9], [16].

Nejsilněji vázaná je voda nacházející se mezi jednotlivými vrstvami C-S-H gelu. Vzhledem k tomu, že mezi těmito vrstvami se nachází pouze několikomolekulová vrstva vody, je tato voda velmi silně vázaná pomocí přitažlivých sil k molekulám C-S-H gelu. K jejímu odpaření dochází až při velmi silném vysoušení, přibližně pod 10 % relativní vlhkosti vzduchu a její odstranění způsobuje velmi výrazné smršťování cementové pasty [9], [16].



Obr. 18: Fotka C-S-H gelu [26].

Posledním druhem vody, která je vlastní součástí C-S-H gelu, je voda chemicky vázaná. Nazývá se neodpařitelná (non-evaporable) a při jejím odstranění dochází k destrukci C-S-H gelu [9], [16].

### 3 Přístupy k modelování hydratace

V současné době existují 2 základní přístupy k modelování a předpovídání průběhu hydratace či k uvolňování hydratačního tepla. U prvního z nich je cementová pasta modelována na makroskopické úrovni jako celek, druhý přístup vychází přímo z modelu mikrostruktury cementové pasty, kdy z chování této mikrostruktury je následně modelována cementová pasta na makroskopickém měřítku [2], [14].

Makroskopické modely většinou vycházejí z experimentů a zkušeností z praxe, modelují cementovou pastu z makroskopického pohledu jako kontinuum a na této úrovni dále neuvažují chování jednotlivých složek cementu, ani průběhy či produkty jejich reakcí. Na základě experimentů a zkušeností z praxe jsou pak následně stanoveny křivky průběhu hydratace pro jednotlivé typy cementů, které se dále upravují v závislosti na podmínkách ošetřování, případně dalších vnějších vlivech. Speciálním přístupem je sledování průběhu hydratace jednotlivých cementů za přesně stanovených okolních podmínek, jakými mohou být například izotermální nebo adiabatické podmínky v průběhu hydratace [11]. Tyto výsledky nachází uplatnění ve stavební praxi, avšak jsou často používány i při ověření správnosti přesnějších modelů, které vycházejí z modelování mikrostruktury cementu [2], [14].

Mikroskopické modely simulují hydrataci cementové pasty na základě chování jednotlivých zrn cementu, většinou tedy modelují i reakce a chování jednotlivých složek cementu v průběhu hydratace. Z průběhu hydratace cementové pasty na mikroúrovni lze usuzovat na její chování v makroskopickém měřítku, čili průběh hydratace betonu lze aproximovat na úrovni pasty. Teplota konstrukce v určitém bodě může být následně určena například pomocí metody konečných prvků, jako sdužená úloha teplo-teplota. Tento typ modelování byl také použit v rámci této

diplomové práce, a je proto detailněji popsán v kapitolách 4 a 5. Oproti makroskopickým modelům jsou výstupy mikroskopických modelů obecně komplexnější, některé modely kromě hodnot uvolněného hydratačního tepla či průběhu stupně hydratace předpovídají i obraz mikrostruktury [14], [15]. Zároveň jsme pomocí mikroskopických modelů schopni simulovat širší škálu vstupních parametrů, což však někdy může být i jejich nevýhodou díky náročnosti určení těchto vstupních dat [2].

## **4 Popis modelu s jedním zdrojem tepla – program CEMHYD3D verze 3.0**

### **4.1 Úvod**

Pro účel modelování uvolňování hydratačního tepla, stupně hydratace, tepelné kapacity cementu, časového průběhu hydratace a dalších veličin popisujících hydrataci cementu byl použit program CEMHYD3D verze 3.0 [1]. Tento program byl vyvíjen a testován od 90. let v „National Institute of Standards and Technology“ (NIST), současná verze pochází z roku 2005, přičemž byl dále upravován na Fakultě Stavební ČVUT. Pro potřeby této diplomové práce byly v programu provedeny další změny s cílem zjednodušit zadávání vstupních dat a přizpůsobit výstupy pouze pro potřeby modelování hydratace cementu se zaměřením na hydratační teplo.

### **4.2 Popis programu CEMHYD3D verze 3.0**

Návrh programu vychází z modelování cementové pasty na úrovni mikrostruktury. Toto je výhodné zejména proto, že tak dokáže postihnout chemické reakce při hydrataci stejně jako složení cementové směsi právě na takové úrovni, která nejlépe vystihuje jev hydratace. Cementová pasta je modelována jako mikrostruktura o rozměrech  $A \times A \times A$  voxelů, kde jeden voxel představuje element o rozměru  $1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$ . Každý voxel tak reprezentuje určitou chemickou složku cementové pasty, např. slínkový minerál, vodu, portlandit apod. Tato mikrostruktura o rozměrech  $A \times A \times A$  voxelů je základem pro výpočet hydratačního tepla i všech ostatních sledovaných veličin, v dalším textu je nazývána RVE (Representative Volume Element) viz. např. Obr. 22 a Obr. 23. Rozměr  $A$  se při modelování pro účely zjištění hydratačního tepla pohybuje nejčastěji v rozmezí 10 až 100  $\mu\text{m}$ . RVE zachycuje reprezentativní objem

cementové pasty a vhodnou velikost RVE nelze dopředu obecně stanovit. Proto se často provádí analýza rozptylu uvažovaných hodnot při různých velikostech. Účelem je nalezení co možná nejmenší RVE, která hodnověrně zachycuje chování a umožňuje výrazně redukovat centimetrový rozměr betonu na několik desítek mikrometrů [1], [28].

Mikrostrukturu cementové pasty lze pomocí těchto voxelů vystihnout relativně velice přesně, jelikož CEMHYD3D dokáže zahrnout do modelu hydratace přítomnost kromě základních  $C_3S$ ,  $C_2S$ ,  $C_3A$  a  $C_4AF$  i sádrovce, anhydridu, pucolánové látky a například i aluminosilikátové sklo. Více o zadání těchto vstupů viz. manuál k programu CEMHYD3D v 3.0 [1].

Zjevnou nevýhodou RVE je omezení maximální velikosti cementového zrna, které je možno do RVE umístit. Tím dochází k narušení plynulé křivky zrnitosti a zejména malé RVE jsou náchylné k rychlejším reakcím z důvodu absence velkých cementových zrn. Aby se zamezilo nežádoucím jevům, které by nutně způsobovala existence hranice uzavřené modelované mikrostruktury, byly hraniční oblasti v principu z modelu odstraněny a RVE je periodická. Každá z „hraničních ploch“ modelované mikrostruktury ve výpočtu navazuje na protilehlou plochu na opačné straně mikrostruktury, a to jak při generování zrn do mikrostruktury RVE tak v kinetice reakcí. Tímto spojením protilehlých stran mikrostruktury je dosaženo, že RVE simuluje namísto otevřené mikrostruktury periodické kontinuum a není potřeba nijak speciálně ošetřovat okrajové podmínky [1].

Základními vstupními údaji pro CEMHYD3D v 3.0 jsou křivka zrnitosti cementové pasty, chemické složení cementu, vodní součinitel a vnější podmínky ošetřování [1]. Rozdělení cementových zrn, respektive křivka zrnitosti způsobuje však komplikace při menších rozměrech mikrostruktury RVE, jelikož v RVE chybí velká zrna.



Umístění cementových zrn do RVE probíhá ve dvou fázích. V první fázi dojde na základě křivky zrnitosti a vodního součinitele k umístění určitého počtu a velikostí sférických zrn cementu do RVE. Tím je RVE rozdělena na voxely, ve kterých se nachází voda a na ty, ve kterých se nachází zrnka cementu. Ve druhé fázi pak dojde v závislosti na chemickém složení cementu k rozdělení zrn cementu na jednotlivé slínkové minerály. Toto rozdělování probíhá na základě autokorelačních funkcí, které jsou stanoveny pro každý slínkový minerál a vyjadřují pravděpodobnost, že 2 různé voxely budou obsahovat shodný slínkový minerál v závislosti na vzdálenosti těchto voxelů. Při rozdělování zrn cementu na jednotlivé slínkové minerály tak program rozmisťuje stejný slínkový minerál do voxelů pomocí pravděpodobností stanovených v těchto funkcích [1], [28].

Obecně lze konstatovat, že model vystihuje relativně přesně chování cementů při hydrataci. Zároveň je schopen zahrnout do RVE některé běžně používané příměsi včetně jejich vlivu na hydrataci. Na druhou stranu není schopen zahrnout nebo popsat přímo vliv přísad, potažmo plastifikátorů, urychlovačů a zpomalovačů tuhnutí. Tyto vlivy je tak možno uvažovat za pomoci úpravy například časového kroku  $\beta$  (9) či upravením pravděpodobností rozpouštění slínkových minerálů [1].

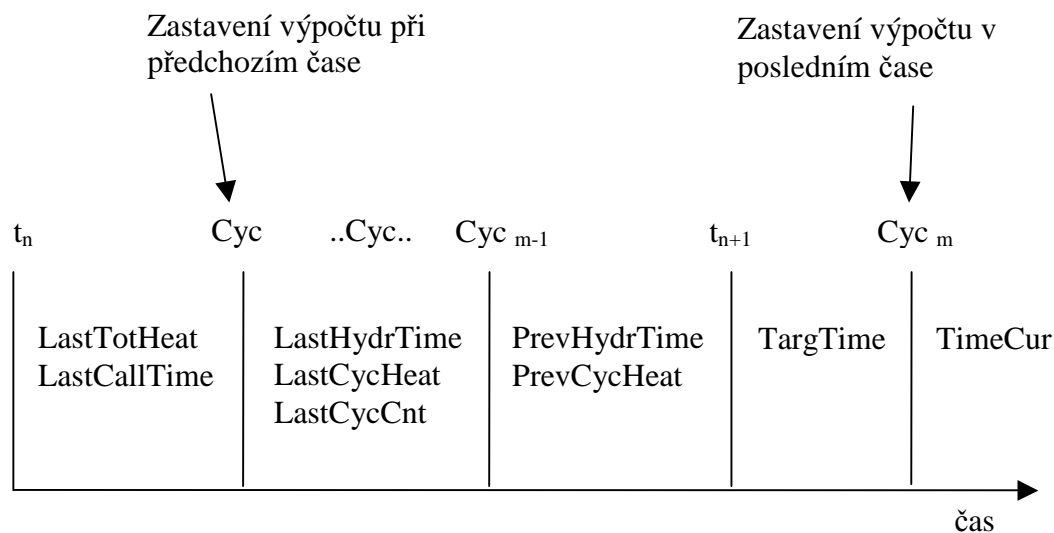
Při generování mikrostruktury, rozřazováním zrn cementu na slínkové minerály a chemických reakcí se používá náhodnosti. Pro tyto účely je v programu vestavěn generátor náhodných čísel, který začíná s explicitně zadanou hodnotou. Sekvence náhodných čísel je daná a umožňuje zopakovat náhodný proces. Jiná startovací hodnota pro generátor náhodných čísel vytváří obecně odlišnou mikrostrukturu. Pro statisticky homogenní materiál však nehraje náhodnost roli a odchylky jsou tím menší, čím větší je RVE, ověření viz kapitola 6.3 [1].

### 4.3 Reálný čas v modelu CEMHYD3D v 3.0

Samotný výpočet hydratace neprobíhá přímo v čase nýbrž v cyklech. Důvodem je, že chemické reakce a kinetika jsou řízeny stále stejnými rovnicemi, avšak tyto procesy se s průběhem hydratace v čase zpomalují (difúzní procesy). Cykly se proto následně mapují na čas pomocí konstanty  $\beta$  následujícím vztahem:

$$T = \beta \times \text{cyklus}^2 \quad (9)$$

Z tohoto důvodu známe uvolněné teplo i další hodnoty popisující hydrataci pouze v časech mezi jednotlivými cykly. V programu je proto zabudován mechanismus interpolující vypočtené hodnoty i do časových oblastí průběhu jednotlivých cyklů tak, že při zadání určitého času pro který chceme výstup, vypočte hodnoty výstupů v cyklech těsně před a těsně po daném časovém okamžiku a následně provede



Obr. 19: Schéma interpolací vypočtených hodnot v cyklech do hodnot ve volaném čase tak jak jsou počítány programem CEMHYD3D.

lineární interpolaci. Vzhledem k délce cyklů a celkové přesnosti výpočtů je interpolace dostačující. Schéma fungování těchto interpolací a vypočtených hodnot je patrné z Obr. 19, kde  $t_{n+1}$  je čas ve kterém chceme znát poslední hodnotu hydratačního tepla, čas  $t_n$  je předchozí čas, ve kterém byla hodnota hydratačního tepla zjišťována.  $C_{yc_{m-1}}$  a  $C_{yc_m}$  jsou poslední předcházející respektive první následující cyklus po čase  $t_{n+1}$  ve kterém chceme znát poslední hodnotu uvolněného hydratačního tepla. Uvedenou interpolací se nemění celkové uvolněné teplo při libovolném počtu volání funkce, která vrací uvolněné teplo.

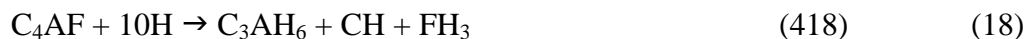
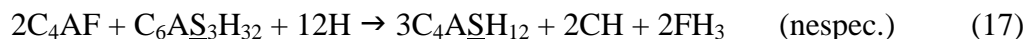
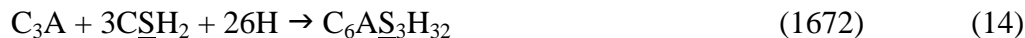
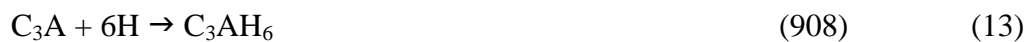
#### 4.4 Chemické reakce zahrnuté v CEMHYD3D v 3.0

V modelu CEMHYD3D jsou zahrnuty následující reakce, v závorce je uvedena hodnota tepla které uvolní jednotlivá reakce v J / g slínkového minerálu tak jak je uvažována v programu CEMHYD3D:

Silikátové reakce:



Aluminátové reakce:



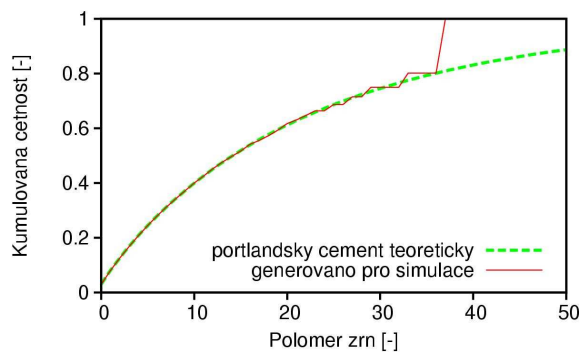
Model v sobě dále zahrnuje možnost hydratace jak za podmínek izotermálních tak adiabatických, či s řízenou teplotou pro každý cyklus. Tyto podmínky umožňují

provádět hydrataci za saturovaného stavu, uzavřeného či s řízeným přidáváním nebo odebíráním vody. Jak je patrné z předchozích rovnic, zahrnuje model i přechodné vytváření etringitu [1], [28].

Všechny reakce jsou z časových kroků na reálný čas převáděny tak jak je uvedeno v kapitole 4.3 pro referenční teplotu, která je v programu CEMHYD3D rovna 25°C. V případě, že jako vstupní hodnota je zadána jiná teplota než referenční, je rychlost všech reakcí přepočítávána pomocí Arrheniova zákona (8) [1].

#### 4.5 Modelování křivky zrnitosti cementu

Důležité pro vstupní data je zároveň popsat průběh křivky zrnitosti cementových zrn v závislosti na velikosti vzorku hydratovaného cementu. Jak už bylo zmíněno výše, největší zrnka cementu mohou mít velikost až 120  $\mu\text{m}$ , i když taková velikost bývá spíše výjimkou. Zároveň velikost vstupního vzorku bývá někdy výrazně menší, v některých případech až 10 voxelů, čili 10  $\mu\text{m}$ . Z toho vyplývá, že zvláště u těchto menších prvků mívá křivka zrnitosti, zvláště pak v oblasti větších zrn, skokový průběh a zároveň jsou menší RVE limitovány maximální velikostí zrna, což u nich způsobuje rychlejší průběh hydratace.

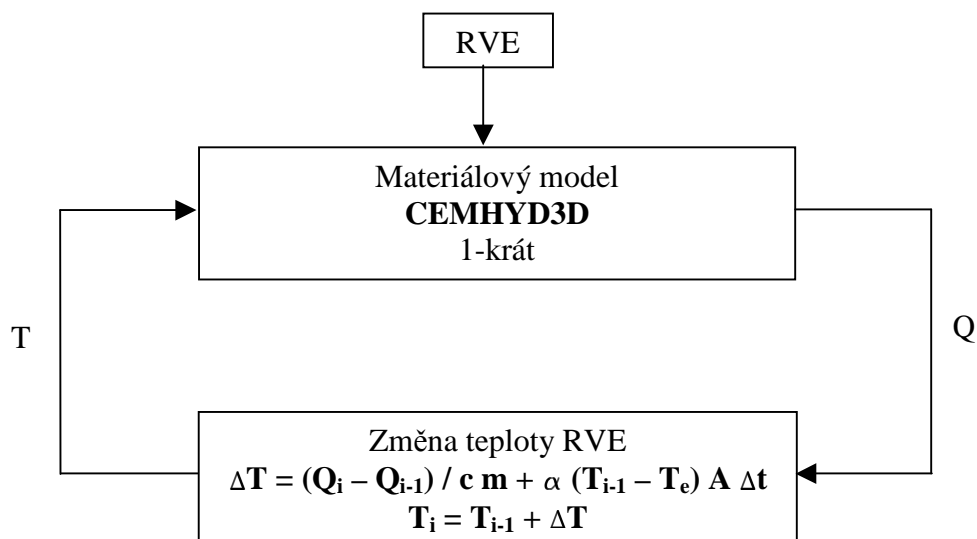


Obr. 20: Srovnání průběhu teoretické křivky zrnitosti a křivky zrnitosti tak jak je generována do RVE.

U větších vzorků již skokový průběh křivky zrnitosti nezpůsobuje výraznější komplikace. Srovnání teoretické křivky zrnitosti a skutečné tak, jak je generována do simulací je zobrazen v Obr. 20.

#### 4.6 Způsob výpočtu hydratačního tepla

Princip modelování hydratace s jedním zdrojem tepla je patrný v Obr. 21. Od tepla uvolněného při každém časovém kroku byly odečteny ztráty do okolí a o tento rozdíl byla změněna teplota, která byla dále použita jako vstup pro další krok do programu CEMHYD3D. Při simulacích adiabatických dějů byla  $\alpha$  rovna 0, při izotermálních simulacích byla vstupní teplota uvažována stále konstantní a uvolněné hydratační nesloužilo jako vstup do dalšího kroku.



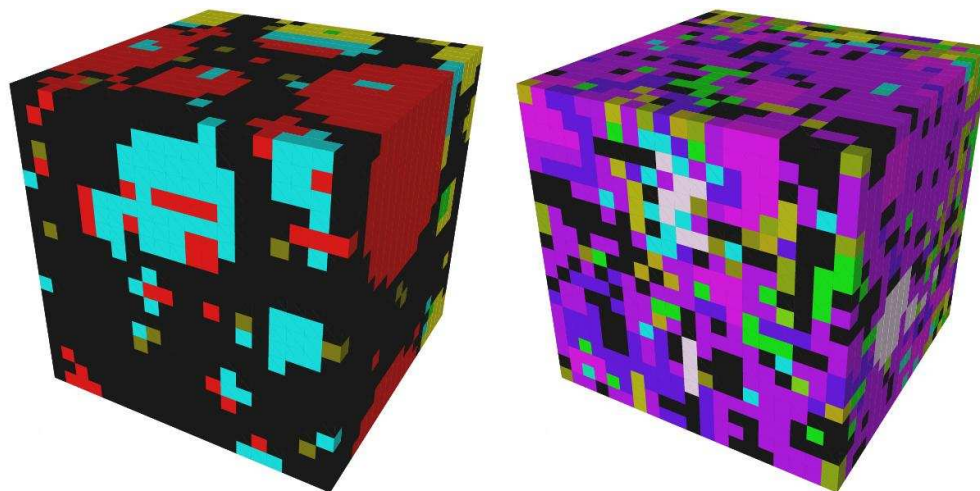
Obr. 21: Schématické znázornění modelu s jedním zdrojem tepla.

V Obr. 21 je  $\Delta T$  změna teploty mezi jednotlivými časovými kroky v Kelvinech,  $Q_i$  je celkové hydratační teplo v čase  $i$  v  $J / g$ ,  $Q_{i-1}$  je celkové hydratační teplo v čase  $i-1$  v  $J / g$ ,  $c$  je měrná tepelná kapacita v  $J / g / K$ ,  $m$  je hmotnost v  $g$ ,  $\alpha$  je součinitel přestupu tepla ve  $W / m^2 / K$ ,  $T_e$  je okolní teplota v čase  $i$ ,  $A$  je povrch

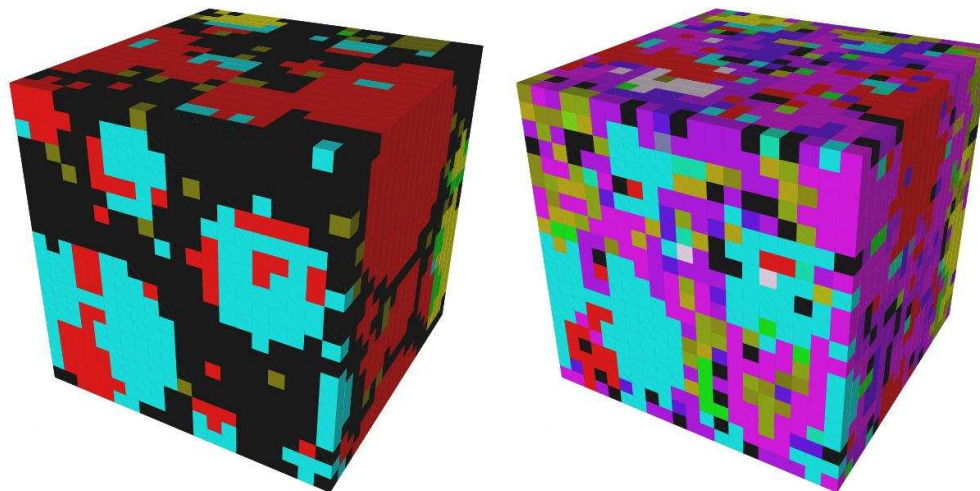
vzorku v  $m^2$ ,  $\Delta t$  je délka časového kroku,  $T_{i-1}$  je teplota v předchozím kroku hydratace a  $T_i$  je vstupní teplota pro další krok hydratace.

#### 4.7 Grafické výstupy

Na Obr. 22 a Obr. 23 jsou zobrazeny pro ilustraci typické mikrostruktury o velikostech 20 voxelů.



Obr. 22: Znázornění RVE o velikosti 20 voxelů a vodním součinitelem 0,50 na počátku (vlevo) a na konci (vpravo) hydratace. Jednotlivé barvy představují následující složku voxelu: černá - kapilární póry, červená -  $C_3S$ , světle modrá -  $C_2S$ , zelená -  $C_3A$ , světle žlutá -  $C_4AF$ , tmavě žlutá – sádrovec, fialová - C-S-H gel, tmavě fialová – CH.



Obr. 23: Znáornění RVE o velikosti 20 voxelů a vodním součinitelem 0,25 na počátku (vlevo) a na konci (vpravo) hydratace. Jednotlivé barvy představují následující složku voxelu: černá - kapilární póry, červená -  $C_3S$ , světle modrá -  $C_2S$ , zelená -  $C_3A$ , světle žlutá -  $C_4AF$ , tmavě žlutá – sádrovec, fialová - C-S-H gel, tmavě fialová – CH.

## 5 Popis modelu s více zdroji tepla – program TRFEL

### 5.1 Teorie vedení tepla

Při modelování průběhu hydratace byl použit model nestacionárního vedení tepla. Ten lze obecně popsat pomocí diferenciální rovnice vedení tepla ve tvaru

$$\operatorname{div}(k \operatorname{grad} u(\mathbf{x}, t)) - c \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + I_u(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (19)$$

s počátečními podmínkami

$$u(\mathbf{x}, t = 0) = u_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (20)$$

a s hlavní okrajovou podmínkou jako předepsanou teplotou na okraji, tzv. Dirichletovou podmínkou

$$u(\mathbf{x}, t) = \bar{u}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_u \quad (21)$$

a vedlejšími okrajovými podmínkami předepisujícími tepelný tok na okraji, tzv. Neumannovou podmínkou

$$q(\mathbf{x}, t) = \bar{q}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q \quad (22)$$

a tzv. Cauchyho podmínkou, předepisující tepelný tok na okraji, řízený následujícím vztahem



$$q(\mathbf{x}, t) = \alpha(u(\mathbf{x}, t) - u_e(\mathbf{x}, t)), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q \quad (23)$$

Kde  $u(\mathbf{x}, t)$  je funkce teplot v daném bodě a čase v Kelvinech,  $k$  je součinitel tepelné vodivosti ve  $W / m / K$ ,  $c = \rho \cdot C$ , přičemž  $C$  je měrná tepelná kapacita v  $J / kg / K$ ,  $\rho$  je hustota v  $kg / m^3$ ,  $l_u(\mathbf{x}, t)$  je vnitřní zdroj tepla ve  $W / m^3$ ,  $\alpha$  je koeficient přestupu tepla povrchu ve  $W / m^2 / K$  a  $u_e(\mathbf{x}, t)$  je okolní teplota v  $K$ .  $q(\mathbf{x}, t)$  je pak hustota tepelného toku  $W / m^2$ , pro níž platí

$$q(\mathbf{x}, t) = k \frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial \vec{n}}, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_q \quad (24)$$

Tyto rovnice lze řešit diskretizací pouze přibližně a slabá formulace problému vedení tepla má následující tvar

$$\int_{\Omega} (k \operatorname{grad} u - c \frac{\partial u}{\partial t}) w d\Omega + \int_{\Gamma_q} (k \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} - \bar{q}) w d\Gamma = 0 \quad (25)$$

za pomoci Gaussova teorému lze přepsat následovně

$$\int_{\Omega} (k \operatorname{grad} u \operatorname{grad} w - c \frac{\partial u}{\partial t} w) d\Omega + \int_{\Gamma_u} k \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} w d\Gamma - \int_{\Gamma_q} \bar{q} w d\Gamma = 0 \quad (26)$$

Kde  $w$  je váhová funkce taková, že na hranici, kde je předepsaná teplota má nulovou hodnotu (princip virtuálních teplot) [30], [13].

## 5.2 Výpočet vedení tepla pomocí metody konečných prvků

Při výpočtu pomocí konečných prvků je pak průběh teplot po prvku aproximován jako lineární kombinace uzlových hodnot. V případě Galerkinovy metody je tato

aproximace stejná i pro váhovou funkci  $w$ . Aproximaci průběhu teplot lze napsat v následujícím tvaru:

$$u = Nr \tag{27}$$

Kde  $N$  je matice bázových funkcí, které jsou závislé na typu použitého prvku a  $r$  je hodnota funkce  $u$  v jednotlivých uzlech. Z diskretizace (19) plynou následné matice

$$K = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial N^r}{\partial x} k \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{\partial N^r}{\partial y} k \frac{\partial N}{\partial y} + \frac{\partial N^r}{\partial z} k \frac{\partial N}{\partial z} \right) d\Omega \tag{28}$$

Čili ve zjednodušeném tvaru pro izotropní materiál

$$K = \int_{\Omega} (B^T k B) d\Omega, \tag{29}$$

$$C = \int_{\Omega} N^T c N d\Omega, \tag{30}$$

$$\bar{q} = \int_{\Gamma_q} N^T \bar{q} d\Gamma, \tag{31}$$

Kde  $K$  je matice vodivosti,  $C$  je matice tepelných kapacit a  $\bar{q}$  vektor předepsaného tepelného toku na okraji prvku. Pak může být (26) přepsána v následujícím tvaru:

$$Kr + C \frac{dr}{dt} = \bar{q} \tag{32}$$

Při výpočtu je dále používána časová diskretizace, která je založena na znalosti

řešení, tedy vektoru neznámých  $\mathbf{r}$  v čase  $t_{i-1}$ , ze kterého je dále počítáno řešení v čase  $t_i$ . Řešení v čase  $t_{i-1}$  je označováno jako  $\mathbf{r}_{i-1}$  a časový krok je roven  $\Delta t = t_i - t_{i-1}$ . Vektor neznámých  $\mathbf{r}$  a jeho derivaci pak lze v libovolném čase rozepsat jako

$$\mathbf{r}(t) = \tau \mathbf{r}_i + (1 - \tau) \mathbf{r}_{i-1}, \quad (33)$$

respektive

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}), \quad (34)$$

kde

$$\tau = \frac{t_i - t_{i-1}}{\Delta t} \quad (35)$$

Vektor  $\mathbf{q}$  lze rozepsat obdobným způsobem. Na základě těchto vztahů pak řešení vektoru neznámých  $\mathbf{r}$  v programu TRFEL vypadá následovně [30]:

$$\left[ \mathbf{K}\tau + \frac{\mathbf{C}}{\Delta t} \right] \mathbf{r}_i = \bar{\mathbf{q}}_{i-1}(1 - \tau) + \bar{\mathbf{q}}_i\tau + \left[ \frac{\mathbf{C}}{\Delta t} - \mathbf{K}(1 - \tau) \right] \mathbf{r}_{i-1} \quad (36)$$

### 5.3 Způsob výpočtu pomocí programu TRFEL

Pro modelování hydratace cementu s více zdroji tepla byl společně s programem CEMHYD3D používán program SIFEL (Simple Finite Element), respektive jeho součást TRFEL, určená pro výpočty transportních procesů pomocí metody konečných prvků [30]. Spojení programů je navrženo tak, že program TRFEL řeší úlohu vedení tepla, zatímco CEMHYD3D je při výpočtu vedení tepla používán jako vnitřní zdroj tepla, viz (19). Schématické znázornění modelu je patrné z Obr. 24.

Zadání pro modelování v programu TRFEL je tvar konstrukce včetně jejího rozdělení na konečné prvky, specifikace materiálových vlastností jednotlivých konečných prvků, délka výpočtu a časový krok výpočtu, okrajové a počáteční podmínky a způsob, jakým jsou výsledky zapisovány do výstupních souborů. Součástí materiálových vlastností jednotlivých konečných prvků je i zadání vstupních hodnot pro výpočet hydratace RVE programem CEMHYD3D [30].

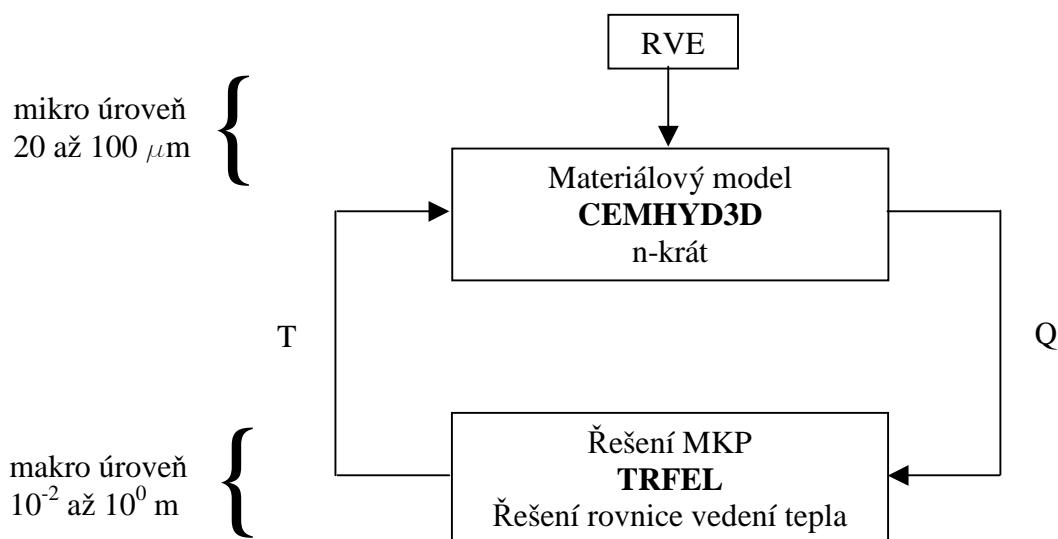
Program TRFEL pak v každém časovém kroku řeší soustavu rovnic popisujících vedení tepla, jejímž výstupem jsou hodnoty teplot v jednotlivých uzlech (integračních bodech). Tyto teploty jsou následně průměrovány z uzlových hodnot na průměrné hodnoty pro jednotlivé konečné prvky. Hodnoty teplot v jednotlivých konečných prvcích následně vstupují do programu CEMHYD3D jako teplota při hydrataci RVE, viz kapitola 4.4. Program CEMHYD3D pro každý konečný prvek a daný časový krok spočte množství uvolněného hydratačního tepla v J / g cementu. Pro konstrukci o  $n$  konečných prvcích tak v případě, že každý konečný prvek má vlastní zdroj tepla, počítá CEMHYD3D hydrataci na  $n$  RVE. Interpolace z časových kroků na cykly CEMHYD3Du je popsána v Obr. 19. Výstupy z hydratací RVE jsou pak po přenásobení objemem jednotlivých konečných prvků používány jako vnitřní zdroj tepla do dalšího kroku ve kterém program TRFEL řeší vedení tepla a tudíž nové hodnoty teplot v uzlech.

V každém kroku výpočtu je tak programem TRFEL řešena rovnice vedení tepla s  $n$  konečnými prvky a programem CEMHYD3D simulována hydratace cementu na  $n$  RVE pro délku časového kroku. Program CEMHYD3D je tedy v modelu používán jako zdroj tepla.

Výše uvedený způsob modelování, kdy každý konečný prvek má vlastní zdroj tepla, je zde popsán detailněji proto, že tímto způsobem byl používán při simulacích v rámci této práce. Existují však samozřejmě i případy, například při výpočtech rozměrnějších konstrukcí s mnoha konečnými prvky, kdy by z hlediska

délky trvání výpočtu bylo výhodnější snížit počet zdrojů tepla. V takovém případě by jednomu zdroji tepla odpovídal ne jeden konečný prvek, nýbrž celá oblast na konstrukci, přičemž teploty pro vstup do programu CEMHYD3D by byly průměrovány z uzlových hodnot v celé této oblasti.

Model simulací je tak v principu víceúrovňový (multiscale), jelikož teplo uvolněné na jednotlivých prvcích je získáváno z programu CEMHYD3D pomocí RVE o velikostech přibližně 20 až 100  $\mu\text{m}$ , zatímco rozměry jednotlivých konečných prvků na konstrukci se pohybují typicky od centimetrů po 1 metr.



Obr. 24: Schématické znázornění modelu s více zdroji tepla.

Program TRFEL umožňuje pro výpočet užití celé škály typů konečných prvků, při simulacích v rámci této práce byly použity 2 typy, jednak trojrozměrné prvky typu brick s kvadratickými a lineárními aproximacemi, viz. kapitola 7.1 a dvojrozměrné čtyřúhelníkové prvky s lineárními aproximacemi, viz. kapitola 7.2. Zároveň bylo při simulacích užito integrační schéma Crank-Nicholson, zejména proto, že je nepodmíněně stabilní a nemusel tak být brán ohled na délku integračního kroku z hlediska stability výpočtu [30], [24].

## 6 Simulace hydratace s jedním zdrojem tepla

### 6.1 Úvod

Ověření programu CEMHYD3D probíhalo se třemi cíli. Prvním bylo naladit a ověřit hodnoty vstupních konstant tak, aby výsledky odpovídaly měřením na reálných konstrukcích. Zejména se jednalo o stanovení součinitele  $\beta$  určujícího časový průběh hydratace. Dle autorů modelu CEMHYD3D se nachází v rozmezí 0,0003 – 0,001, viz [1]. Druhým cílem bylo zjistit pro které hodnoty vstupů je program vhodný a použitelný a naopak při kterých nejsou již jeho výsledky věrohodné. Třetím cílem pak bylo ověření že program je schopen správně a reálně spočítat výsledky pro různé kombinace vstupních dat.

### 6.2 Popis referenčního cementu

Pokud není uvedeno jinak, byl při simulacích užíván portlandský cement typu CEM I 42,5. Údaje o jeho chemickém složení byly získány z cementárny: SiO<sub>2</sub> 20,51%, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 4,74%, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 3,3%, CaO 63,77%, MgO 1,05%, K<sub>2</sub>O 0,95%, SO<sub>3</sub> 3,07%, MnO 0,09%, Na<sub>2</sub>O 0,15%, volný Ca 0,0%, TiO<sub>2</sub> 0,0%. Toto chemické složení bylo dále přepočítáno na mineralogické dle různých metodik od autorů Boguea, Lochera, Newkirka, Lea a Glaussera, viz. reference v [20].

minerál	objemové zastoupení
C <sub>3</sub> S	0,656150
C <sub>2</sub> S	0,162905
C <sub>3</sub> A	0,081143
C <sub>4</sub> AF	0,099792
Sádrovec	0,050000

Tabulka 9: Mineralogické složení referenčního cementu.

Pro simulace byl dále používán pouze přepočet podle Boguea, takže jako vstupní

parametry sloužily po přenormování uvedené v Tab. 9. Jak je z mineralogického složení patrné, byl jako součást směsi uvažován i sádrovec zejména kvůli hydrataci  $C_3A$  tak, aby namísto vzniku  $C_3AH_6$  došlo k formování monosulfátu a trisulfátu. Jemnost mletí dle Blaina byla zjištěna  $306 \text{ m}^2 / \text{kg}$ , a při simulacích byla uvažována hodnota  $300 \text{ m}^2 / \text{kg}$ . Hodnota aktivační energie byla při všech simulacích rovna  $38,3 \text{ kJ} / \text{mol}$ . Pro srovnání s výsledky následujících simulací je zajímavé zmínit, že pro mineralogické složení z Tab. 9 uvádějí zmínění autoři, viz. reference v [20], celkové uvolněné potenciální hydratační teplo  $Q_{\text{pot}}$  v rozmezí od 434 do  $498 \text{ J} / \text{g}$  cementu.

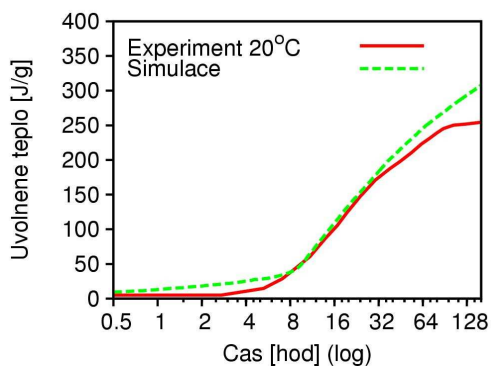
### 6.3 Kalibrace časového kroku

Pro kalibraci hodnot vstupní konstanty  $\beta$  byl využit zejména článek “Determination of apparent activation energy of concrete by isothermal calorimetry” [11]. Tento článek pojednává o vývoji hydratace betonu, experimentálně jsou v něm změřeny a stanoveny průběhy a hodnoty uvolněného hydratačního tepla, stupně hydratace a aktivační energie. Při experimentu byl použit cement I 42,5 R a proto i při simulacích v programu CEMHYD3D byl použit referenční cement, viz. kapitola 6.2.

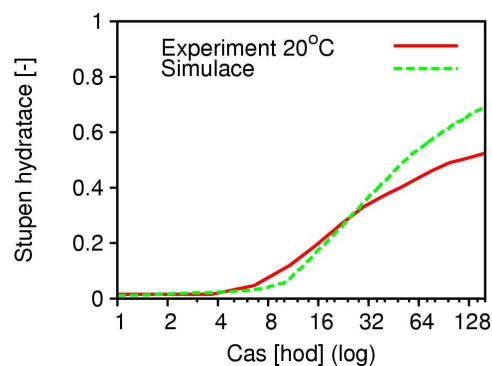
Fitování součinitele  $\beta$  probíhalo na základě porovnávání spočtených a změřených hodnot stupně hydratace a uvolněného tepla. Ukázalo se, že výsledky měření v článku [11] jsou díky užití technologii měření použitelné pouze do určitého času od počátku hydratace, viz Obr. 25 a Obr. 26. Poté co se uvolňované hydratační teplo snížilo pod určitou hodnotu, chyby při jeho měření a vyhodnocování již byly nejspíš tak velké, že se v podstatě podle měření již hydratace zastavila, nebo dokonce dochází i ke snižování celkového uvolněného tepla, což je nereálné. K tomuto jevu docházelo v závislosti na teplotě při hydrataci od cca od 50 do nejpozději však do 160 hodin od počátku hydratace. Nepřímý důkaz k tomuto tvrzení je celkové množství uvolněného tepla v průběhu hydratace. Dle měření

v článku [11] se celkové množství uvolněného tepla pohybovalo mezi 220 a 270 J / g, nicméně dle autorů, viz. reference z [20] se tato hodnota u cementů 42,5 pohybuje mezi 380 a 530 J / g, nejčastěji cca 450 J / g.

Lze tedy tvrdit, že fitování podle článku [11] je možné, avšak pouze s uvážením výše uvedených skutečností. V Obr. 25 a Obr. 26 je patrné srovnání křivek uvolněného tepla a stupně hydratace z článku [11] a výstupů ze simulací provedených programem CEMHYD3D. Fitování probíhalo pro cement hydratující při 20°C izotermálně v uzavřeném vodním prostředí. Jako nejvhodnější aproximace se ukázalo použití součinitele  $\beta = 0,00045$ , kdy si obě křivky průběhu množství uvolněného tepla viz Obr. 25 odpovídají do cca 50-60 hodin od počátku hydratace. Poté už se projevuje výše popsaná chyba měření.



Obr. 25: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla při experimentu [11] a simulaci.



Obr. 26: Srovnání vývoje stupně hydratace při experimentu [11] a simulaci.

V článku bylo uvolňování hydratačního tepla měřeno při 4 různých teplotách (10, 20, 30 a 40°C) viz. Obr. 11, avšak tyto teploty mají vliv pouze na rychlost reakce a nemají vliv na celkové množství uvolněného hydratačního tepla. Závislost rychlosti reakce na teplotě je dle Arrheniova zákona (8).

Při srovnávání stupňů hydratace byl stupeň hydratace z experimentu dělen hodnotou 1,7 a to z výše popsaných důvodů nepřesnosti měření od určitého



časového úseku. Stupeň hydratace je v článku [11] počítán jako podíl sumy hydratačního tepla uvolněného do času  $t$  a celkového hydratačního tepla. Hodnota proto 1,7 odpovídá přibližně poměru uvolněného tepla potenciálního celkového pro cement I 42,5 a skutečně změřeného v [11], které je ovšem zatížené chybou.

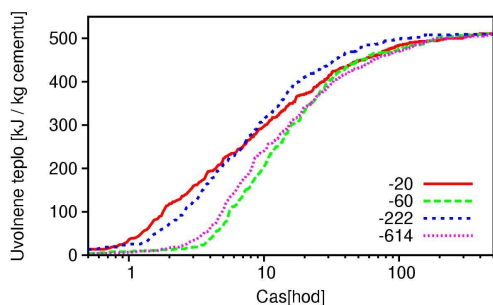
#### **6.4 Vliv velikosti RVE**

Jak již bylo řečeno, druhým cílem testování bylo stanovit takové velikosti RVE, při kterých jsou simulovaná hydratační tepla málo ovlivněná náhodností. Testován byl proto rozptyl výsledků v závislosti na rozměrech RVE, proběhlo srovnání průběhu hydratací pro různé rozměry RVE a zároveň ověření správnosti množství a časového průběhu uvolněného hydratačního tepla pro jednotlivé složky cementu.

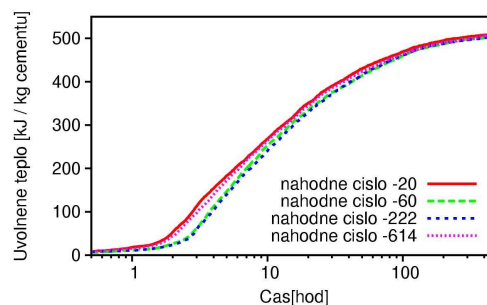
Srovnávání rozptylu výsledků probíhalo pro zjednodušení a vyloučení vedlejších vlivů na čistém  $C_3S$ . Pro srovnání jsou uvedeny 4 Obrázky. Obr. 27, Obr. 28 a Obr. 29 zobrazují rozptyl průběhů uvolňování hydratačního tepla. Tento rozptyl je způsoben změnou vstupního čísla do generátoru náhodných čísel, viz kapitola 4.2. Jak je patrné z přiložených grafů, pro RVE o rozměru hrany 10 voxelů je rozptyl výsledků dosti vysoký a silně ovlivněný vstupním číslem, proto není z tohoto hlediska příliš vhodné používat tento rozměr pro finální výpočty. Výsledky hydratace na RVE o rozměru hrany 20 voxelů již dávají menší rozptyl výsledků při zachování vysoké rychlosti výpočtů. Srovnání na RVE o velikosti hrany 50 voxelů ukazuje, že výsledky již vůbec nejsou ovlivněny zadaným vstupním číslem generátoru, nicméně rychlost výpočtu je pomalejší.

Srovnání rychlosti hydratace na těchto 3 vzorcích RVE, viz. Obr. 30, zároveň ukazuje závislost průběhu rychlosti hydratace na velikosti RVE. Jak je patrné z RVE o velikosti 10 voxelů, průběh hydratace je výrazně skokový a rychlejší. Tento průběh je způsoben celkově malým počtem zrněk  $C_3S$  které mohou hydratovat, přičemž každý zreagovaný voxel se pak projevuje jako skok na křivce

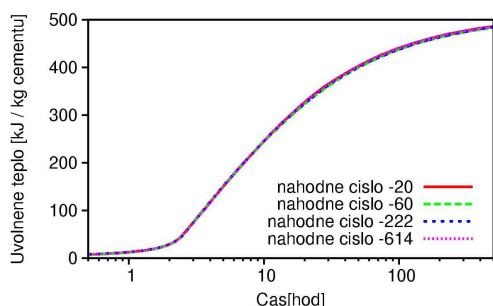
uvolněného tepla. Vyšší rychlost hydratace je pak způsobena omezeností křivky



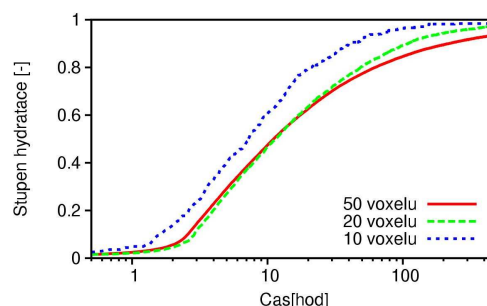
Obr. 27: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla pro různá vstupní čísla do generátoru náhodných čísel pro RVE o velikosti 10 voxelů.



Obr. 28: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla pro různá vstupní čísla do generátoru náhodných čísel pro RVE o velikosti 20 voxelů.



Obr. 29: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla pro různá vstupní čísla do generátoru náhodných čísel pro RVE o velikosti 50 voxelů.



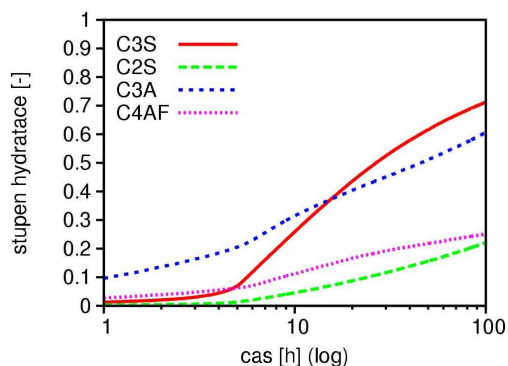
Obr. 30: Srovnání vývoje stupně hydratace pro RVE o různých rozměrech.

zrnitosti (viz. kapitola 4.5), kdy takto malý RVE neobsahuje velká zrna, jejichž hydratace trvá delší dobu. Tento efekt již na RVE o velikosti 20 není tak patrný, na RVE o velikosti 50 se pak již nevyskytuje vůbec. Závěrem je nutné dodat, že kromě velikosti RVE je tento efekt ovlivněn také vodním součinitelem a jemností mletí cementu, přičemž platí že čím nižší vodní součinitel a čím vyšší jemnost mletí tím méně jsou výsledky ovlivněny velikostí RVE. Doporučení je použít raději větší RVE, zejména pak při modelování s vyšším vodním součinitelem a menší jemností mletí.

Závěrem pak lze konstatovat, že vzhledem k přesnosti výsledků není doporučeno používat menší velikosti RVE k finálním výpočtům. Naopak, vzhledem k rychlosti při jejich výpočtu jich lze výhodně využít při počátečním testování, kdy například ověřujeme správnost zadání vstupních dat apod.

## 6.5 Simulace průběhu hydratace jednotlivých slínkových minerálů

Správnost modelu byla testována také z hlediska hydratace jednotlivých slínkových minerálů. Průběh hydratace jednotlivých slínkových minerálů je patrný z Obr. 31. Simulace byly prováděny s použitím referenčního cementu (viz. kapitola 6.2) na RVE o velikosti 100 voxelů kvůli vyloučení vlivu skokovitosti křivky zrnitosti, izotermálně při 20°C. Vodní součinitel byl pak roven 0,5 zejména proto, aby hydratace nebyla omezena nedostatkem vody. Každopádně při srovnání s kapitolou 2.4 a Obr. 3, Obr. 4, Obr. 6 a Obr. 8 je patrné, že model vystihuje průběh hydratace jednotlivých slínkových minerálů tak, jak je na ní dnes obecně nahlíženo.



Obr. 31: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla jednotlivých slínkových minerálů.

## 6.6 Simulace pro různé vstupní a okrajové hodnoty

Cílem těchto výpočtů bylo ověřit, zda je program schopen simulovat všechny základní typy úloh, které se při výpočtech reálných konstrukcí mohou vyskytnout. Simulace probíhaly proto na RVE o velikosti 100 voxelů kvůli vyloučení nežádoucích vlivů které provázejí malé RVE (viz kapitola 4.5) pro následující možnosti.

Srovnání:

- Portlandského cementu s cementem portlandským rychlovazným (izotermálně, adiabaticky)
- Různých hodnot jemnosti mletí cementu (izotermálně)
- Saturevané a uzavřené podmínky při hydrataci (izotermálně)
- Rozdílných hodnot počátečních teplot (adiabaticky)
- Rozdílných hodnot vodních součinitelů (izotermálně, adiabaticky)

Všechny tyto zmíněné simulace probíhaly pokud není zmíněno jinak se vstupními hodnotami odpovídající referenčnímu cementu (viz. kapitola 6.2). Pokud není zmíněno jinak, simulace probíhaly za saturovaných podmínek s jemností mletí cementu  $300 \text{ m}^2 / \text{kg}$  a vodním součiniteli rovném 0,5. V případě izotermálních simulací probíhala hydratace za stálé teploty  $20^\circ\text{C}$ . U adiabatických reakcí byla stanovena vždy pouze počáteční teplota, přičemž v průběhu hydratace bylo všechno uvolněné teplo použito k ohřátí směsi jako celku, tj. s uvažováním betonové směsi obsahující kamenivo a 400 kg cementu na  $1\text{m}^3$ . Měrná tepelná kapacita pro tuto betonovou směs byla uvažována  $900 \text{ J} / \text{kg} / ^\circ\text{C}$  a hustota směsi byla uvažována  $2500 \text{ kg} / \text{m}^3$ .

### 6.6.1 Srovnání hydratace běžného a rychlovazného portlandského cementu

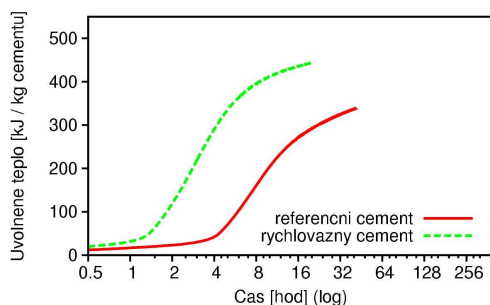
Jelikož všechny ostatní simulace probíhaly pouze s užitím referenčního cementu

(viz. kapitola 6.2), který odpovídá běžným portlandským cementům, byl v této simulaci srovnáván tento referenční cement CEM I 42,5 X s cementem portlandským rychlovazným CEM I 42,5 R, jehož mineralogické složení bylo získáno z databáze NIST [18] pro cement od výrobce Dyckerhoff a je patrné z Tab. 10.

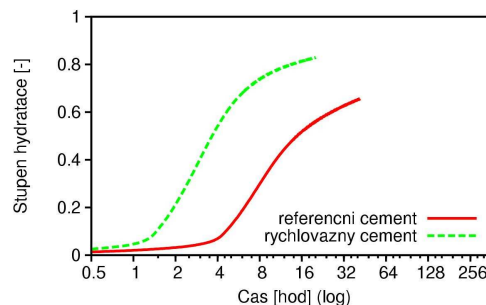
minerál	objemové zastoupení
C <sub>3</sub> S	0,8100
C <sub>2</sub> S	0,0408
C <sub>3</sub> A	0,0875
C <sub>4</sub> AF	0,0617
Sádrovec	0,0500

Tabulka 10: Mineralogické složení rychlovazného cementu [18].

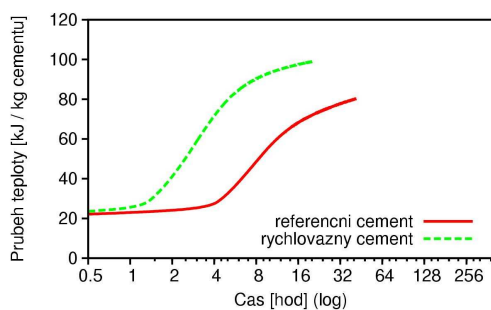
Jemnost mletí byla 608 m<sup>2</sup> / kg. Simulace proběhly jak adiabaticky, tak izotermálně. Dle očekávání, díky většímu množství C<sub>3</sub>S a vysoké jemnosti mletí, hydratoval mnohem rychleji a ve druhé fázi hydratace uvolňoval teplo mnohem intenzivněji, nicméně dle dosaženého stupně hydratace lze usuzovat, že celkové množství uvolněného hydratačního tepla po úplném zhydratování by nebyl až tak rozdílný.



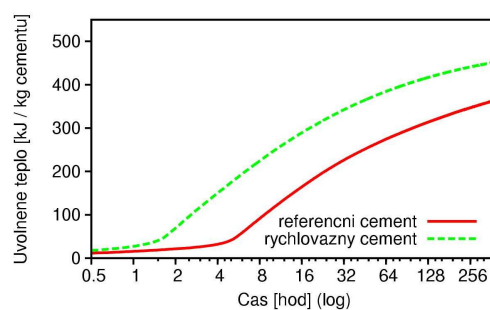
Obr. 32: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla v závislosti na typu cementu při adiabatickém ději.



Obr. 33: Srovnání vývoje stupně hydratace v závislosti na typu cementu při adiabatickém ději.



Obr. 34: Srovnání časových průběhů teplot v závislosti na typu cementu při adiabatickém ději.

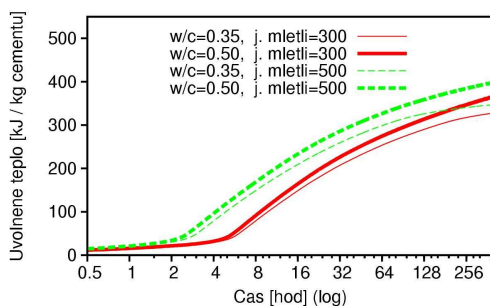


Obr. 35: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla v závislosti na typu cementu při izotermálním ději.

Jak je patrné ze srovnání teplot při adiabatické hydrataci (viz. Obr. 33), byla její rychlost u rychlovažného cementu výrazně uspíšena vysokou teplotou. Byla proto provedena simulace ještě při izotermálních podmínkách při 20°C, kde rychlovažný cement vykazuje stejné vlastnosti jako byly popsány výše, avšak za plynulejšího nárůstu, viz. Obr. 35.

### 6.6.2 Srovnání hydratace při různých hodnotách jemnosti mletí

V případě srovnávání vlivu jemnosti mletí na hydrataci byl zároveň ukázán vliv různých vodních součinitelů. Jak je patrné z Obr. 36, zobrazujícího výsledky, dle předpokladů jemnost mletí zrychluje nástup a průběh hydratace, naopak snížený

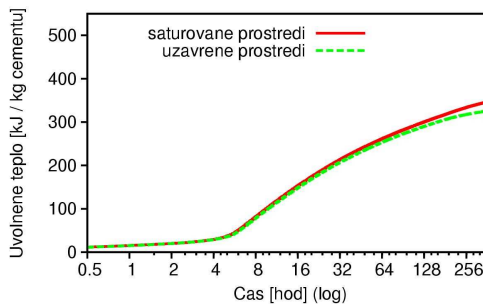


Obr. 36: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla v závislosti na jemnosti mletí cementu při izotermálním ději.

vodní součinitel způsobuje po určité době nezanedbatelné zpomalení hydratace.

### 6.6.3 Srovnání hydratace při saturovaném a uzavřeném vodním prostředí

Pro testování rozdílů hydratace za saturovaného respektive uzavřeného vodního prostředí byl použit vzorek s vodním součinitelem 0,35, proto aby byl efekt spotřebování vody v průběhu hydratace výraznější. Ukázalo se totiž, že u simulace při vodním součiniteli 0,50 nebyl v uvolňování hydratačního tepla žádný rozdíl mezi saturovanými a uzavřenými podmínkami. Teprve u simulace při vodním součiniteli 0,35 pak výsledky ukazovaly, že v pozdějších fázích, kdy se již spotřebovala velká část vody, dochází ke pozorovatelnému zpomalení hydratace, nicméně ani přesto tento vliv není příliš veliký. Lze tedy konstatovat, že pro simulace je proto vhodnější použít saturované prostředí, které lépe odpovídá podmínkám ošetřování betonu ve skutečnosti a nezkrusuje výsledky ani při simulování hydratace cementů s nižším vodním součinitelem.

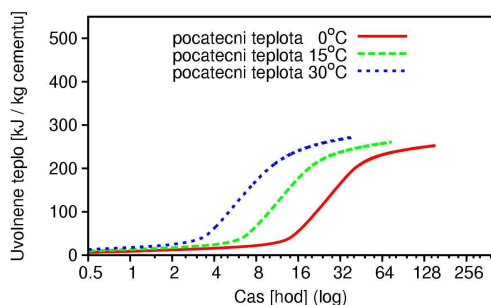


Obr. 37: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla v závislosti na vodním prostředí v RVE při izotermálním ději.

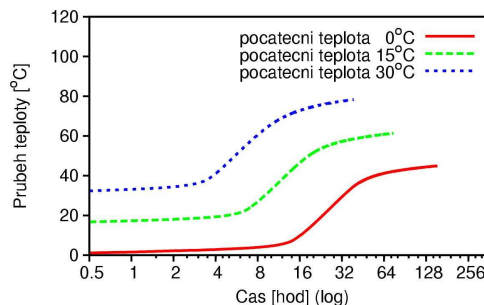
### 6.6.4 Srovnání hydratace při různých počátečních teplotách

Pro srovnání rozdílů adiabatické hydratace při různých počátečních teplotách byly zvoleny 3 teploty představující přibližně letní, zimní a jarní / podzimní období.

Podle teorie závisí rychlost jednotlivých fází hydratace pro stejný vzorek cementu na teplotě podle Arrheniova zákona (8). Jak tedy výsledky správně



Obr. 38: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla v závislosti na počáteční teplotě při adiabatickém ději.



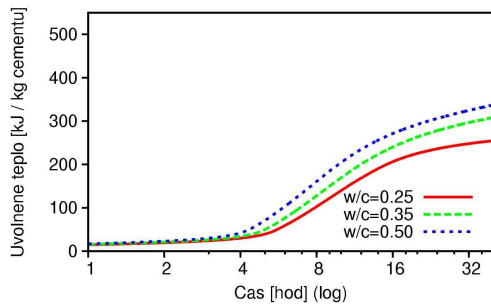
Obr. 39: Srovnání časových průběhů teplot v závislosti na počáteční teplotě při adiabatickém ději.

ukazují, uvolňování hydratačního tepla je obdobné pro všechny srovnávané počáteční teploty, avšak výrazně se liší časy nástupů jednotlivých fází hydratace a délka trvání druhé fáze hydratace.

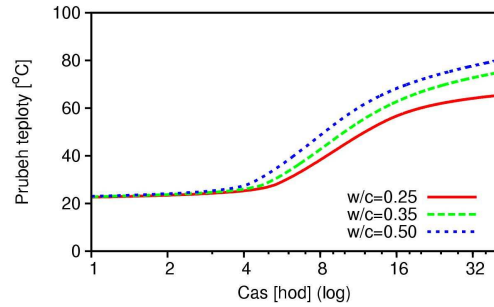
### 6.6.5 Srovnání hydratace s různými vodními součiniteli

Srovnání vodních součinitelů proběhlo jak adiabaticky tak izotermálně a zvolené vodní součinitele byly 0,25, 0,35 a 0,50. Původně měl být testován vodní součinitel 0,20, avšak u něj se vůbec nepodařilo rozmístit cementová zrna do objemu RVE. Všechny grafy ukazují, že díky nejlepšímu přístupu vody k cementovým zrnkům hydratuje nejrychleji cement s vodním součinitelem 0,50. Dále je patrné, že u cementu s vodním součinitelem 0,25 dojde v určité fázi ke spotřebování vody a od té chvíle je už uvolňování hydratačního tepla výrazně pomalejší. K tomuto jevu dochází i přesto, že vodní prostředí RVE bylo zvoleno



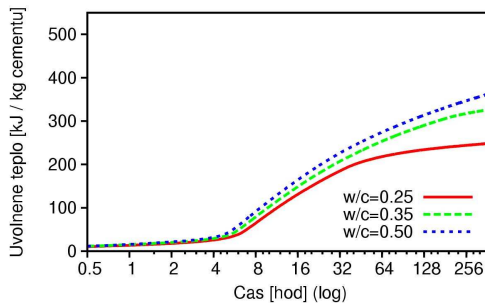


Obr. 40: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla v závislosti na vodním součiniteli při adiabatickém ději.



Obr. 41: Srovnání časových průběhů teplot v závislosti na vodním součiniteli při adiabatickém ději.

jako saturované a chybějící voda by měla mít možnost se stále doplňovat. Ke zpomalení hydratace tak dochází spíše díky tomu, že cementová struktura je již tak prohydratovaná, že vodě již trvá velmi dlouho než se dostane k ještě nezhydratovaným částem cementových zrn.



Obr. 42: Srovnání časových průběhů uvolňování hydratačního tepla v závislosti na vodním součiniteli při izotermálně ději.

## 7 Simulace hydratace s více zdroji tepla

### 7.1 Srovnání výsledků simulací s výsledky z experimentu

Reálnost výpočtů byla dále ověřována porovnáním simulací s výsledky měření průběhu teplot při hydrataci betonové krychle provedené dle [8]. V průběhu experimentu [8] byly vybetonovány 4 krychle o rozměrech 0,25m x 1m x 1m až 1m x 1m x 1m. Do jejich nitra byly při betonáži zabudovány teploměry a následně byl sledován průběh teplot v průběhu hydratace. Cement použitý při výrobě této betonové směsi byl portlandský samozhutnitelný. Pro porovnání výsledků získaných z měření bylo vybráno měření z krychle 1m x 1m x 1m, jelikož nárůst teplot v ní byl nejvýraznější a zároveň byla přesnost výsledků nejvíce rezistentní k nejistotám v zadání okrajových podmínek. Simulace probíhaly pro obě varianty modelu, jak s jedním zdrojem tepla tak s více zdroji.

#### 7.1.1 Srovnání se simulací s jedním zdrojem tepla

Simulace s jedním zdrojem tepla byla modelována dle Obr. 21. Probíhala s použitím referenčního cementu (viz. kapitola 6.2) s časovým krokem integrace rovnic vedení tepla 6 sekund. Při každém kroku byly od nově uvolněného hydratačního tepla odečteny tepelné ztráty do okolí dle vztahu:

$$Q_z = (T_b - T_o) \alpha 6A\Delta t \quad (37)$$

Kde  $Q_z$  je tepelná ztráta v průběhu 1 kroku v J,  $T_b$  je teplota modelované krychle ve °C,  $T_o$  je teplota okolí ve °C,  $\alpha$  je vodivost povrchu ve  $W / m^2 / K$ ,  $A$  je plocha strany krychle v  $m^2$  a  $\Delta t$  je časový krok v sekundách. Rozdíl  $Q_r$  mezi hodnotami nově uvolněného hydratačního tepla a tepelných ztrát do okolí, byl poté použit pro výpočet změny teploty v modelované krychli dle následujícího vztahu:

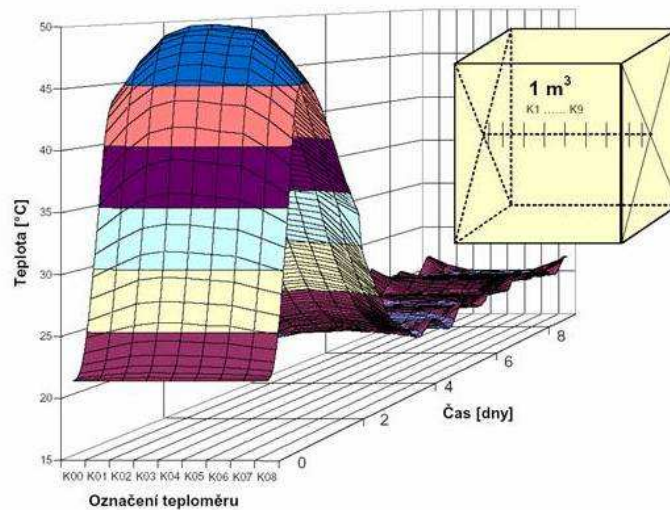
$$\Delta T = Q_r / (C_p \rho V) \quad (38)$$

kde  $\Delta T$  je změna teploty ve  $^{\circ}\text{C}$ ,  $C_p$  je měrná tepelná kapacita v  $\text{J} / \text{kg} / \text{K}$ ,  $\rho$  je objemová hustota v  $\text{kg} / \text{m}^3$  a  $V$  je objem krychle v  $\text{m}^3$ . Simulace zdroje probíhala na RVE o velikosti  $30 \mu\text{m}$  (voxelů), vstupní hodnoty pro simulaci byly použity následovně: měrná tepelná kapacita rovna  $900 \text{ J} / \text{kg} / \text{K}$ , hodnota součinitele přestupu tepla na povrchu modelované krychle byla rovna  $8 \text{ W} / \text{m}^2 / \text{K}$ , hustota betonové směsi rovna  $2500 \text{ kg} / \text{m}^3$ , teplota okolí konstantní rovna  $20^{\circ}\text{C}$  a z hlediska uvolňování tepla bylo uvažováno že  $1 \text{ m}^3$  betonové směsi obsahuje  $400 \text{ kg}$  cementu.

### 7.1.2 Srovnání se simulací s více zdroji tepla

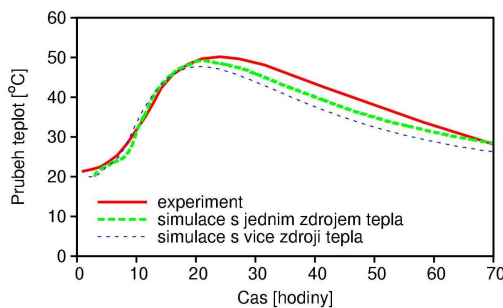
Simulace s více zdroji tepla byla řešena metodou konečných prvků, viz. kapitola 5 a Obr. 24. Modelovaná krychle byla rozdělena na 27 prvků, použity byly konečné prvky typu brick s kvadratickými aproximacemi [30]. Časový krok byl zvolen 60 sekund a součinitel vnitřní tepelné vodivosti mezi jednotlivými prvky byla rovna  $2,0 \text{ W} / \text{m}^2 / \text{K}$ . Vstupní hodnoty pak byly shodné s předchozí simulací kromě hodnoty měrné tepelné kapacity, která byla v tomto případě rovna  $800 \text{ J} / \text{kg} / \text{K}$ , a obsahem cementu v betonové směsi, který byl roven  $300 \text{ kg} / \text{m}^3$ .

Hodnoty měrné tepelné kapacity i množství cementu v  $1 \text{ m}^3$  betonové směsi jsou v případě simulací s jedním zdrojem tepla a s více zdroji tepla v běžném rozmezí jakého je u portlandských cementů dosahováno a rozdílné údaje jsou v obou případech proto, aby výsledný průběh teplot nejlépe odpovídal skutečnému. Důvod použití rozdílných hodnot je takový, že na rozdíl od simulace s více zdroji tepla není simulace s jedním zdrojem tepla schopná postihnout vedení tepla uvnitř modelované krychle a tudíž ani rozložení teplot po jejím objemu – teplota je konstantní po celém objemu krychle. Tepelné ztráty jsou tak vyšší, jelikož s



Obr. 43: Graf časového průběhu teplot v průřezu betonové krychle dle experimentu [8].

jedním zdrojem tepla je uvažována stejná teplota uprostřed krychle i na jejím povrchu a rozdíl  $T_b - T_o$  je tak také vyšší než při uvažování skutečného rozložení teplot kdy teplota při povrchu je nižší než uvnitř objemu. Simulace s více zdroji tepla je schopná tento jev postihnout a proto u ní byly použity takové hodnoty vstupů, které mírně snižovaly množství uvolněného hydratačního tepla a zvyšovaly tepelné ztráty do okolí.



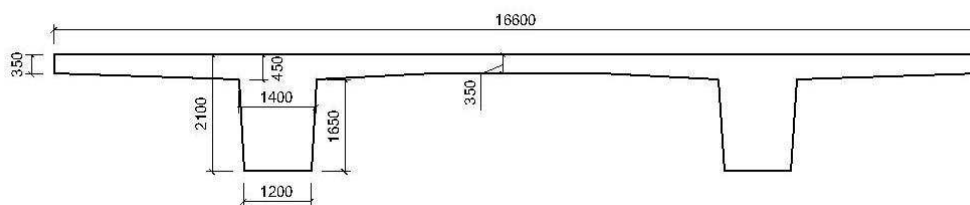
Obr. 44: Srovnání časových průběhů teplot uprostřed betonové krychle dle experimentu [8] simulací s jedním, respektive více zdroji tepla.

Výsledné průběhy teplot jsou zobrazeny v Obr. 44, a lze říci, že křivky teplotního průběhu získaného simulacemi odpovídají v obou případech skutečně naměřeným hodnotám z experimentu a proto lze modely považovat za realistické při modelování skutečného uvolňování hydratačního tepla.

## 7.2 Simulace hydratace mostní konstrukce pomocí více zdrojů tepla

### 7.2.1 Zadání a popis konstrukce

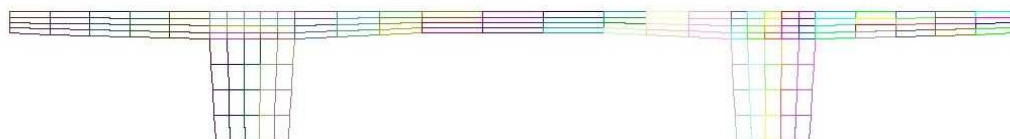
Tato simulace probíhala na průřezu reálného mostu. Vedení tepla bylo uvažováno jako 2D, bez tepelných ztrát, v příčném profilu bylo uvažováno jako nestacionární. Z toho důvodu byla hydratace modelována na dvourozměrném modelu s prvky o tloušťce 1 m, přičemž hodnoty byly v podélném směru mostu uvažovány konstantní. Tvar průřezu mostu je zobrazen na Obr. 45. Rozměry hlavních prvků mostu jsou následující: výška hlavního trámu je 2100 mm, šířka 1200 mm, tloušťka desky 350 mm uprostřed a 450 mm v náběžích. Celková šířka mostu je 16600 mm.



Obr. 45: Příčný řez modelované mostní konstrukce.

Průřez byl rozdělen sítí konečných prvků dle Obr. 46. Byly použity čtyřúhelníkové prvky s lineární aproximací [30] a jak už bylo popsáno v kapitole 5.3, každý prvek obsahoval právě jeden samostatný zdroj tepla modelovaný na samostatných RVE. Počáteční teplota, stejně jako teplota na okrajích byla při simulacích rovna 20°C

kromě simulace vlivu teploty na hydrataci. Hodnota součinitele tepelné vodivosti jednotlivých prvků byla rovna  $1,6 \text{ W} / \text{m}^2 / \text{K}$  což je hodnota odpovídající betonové směsi, součinitel přestupu tepla byl roven  $10 \text{ W} / \text{m}^2 / \text{K}$  což přibližně odpovídá hodnotě tepelné vodivosti bednění. Simulováno tak bylo záměrně bednění i při horním povrchu mostovky a to z toho důvodu, že cílem této simulace bylo modelovat 2 typy konstrukcí – masivní konstrukce a plošné (nemasivní) konstrukce. Pro vyhodnocení hydratace na masivních konstrukcích pak byly používány výsledky z prostřední části trámu mostu, pro plošné konstrukce byl sledován střed desky mostovky uprostřed rozpětí mostu. Z hlediska sledování vlivu uvolňování hydratačního tepla a zahřívání na plošných konstrukcích je však zajímavější sledovat oboustranně bedněné konstrukce, jelikož tepelná vodivost volného povrchu sousedícího se vzduchem je přibližně dvakrát vyšší a tudíž u oboustranně bedněných konstrukcí dochází k většímu zahřívání. Objemová hmotnost betonu byla při simulacích rovna  $2600 \text{ kg} / \text{m}^3$ , měrná tepelná kapacita betonu  $800 \text{ J} / \text{kg} / \text{K}$ . Časový krok byl zvolen 60 sekund, vzhledem k poměru mezi přesností výsledků a spotřebou času při výpočtu, více viz kapitola 7.2.7. Pokud není uvedeno jinak, byl při simulacích užíván referenční cement (viz. kapitola 6.2).



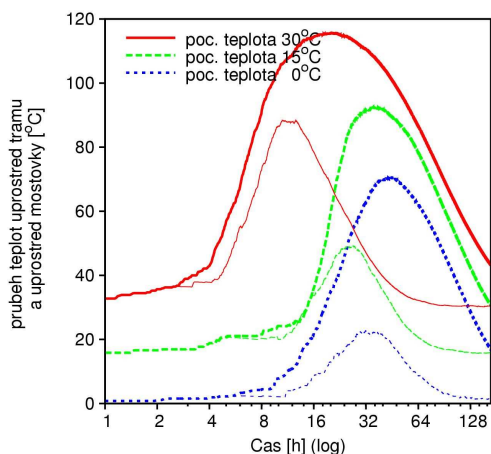
Obr. 46: Rozdělení příčného řezu na síť konečných prvků.

## 7.2.2 Způsob modelování konstrukce

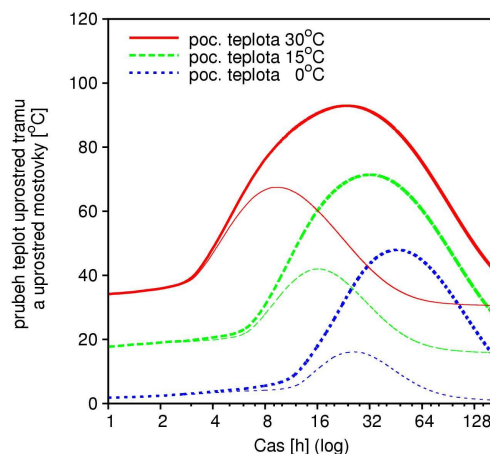
Simulace hydratace na mostní konstrukci probíhala ve dvou fázích. Nejdříve byla

provedena se zdroji o velikosti RVE 10 voxelů. Důvodem bylo ověření správnosti zadání výpočtu a také kvůli odhadu času, který zabere skutečná simulace s většími zdroji. Ta poté probíhala se zdroji o velikosti RVE 50 voxelů.

Obr. 47 a Obr. 48 ukazují pro srovnání výsledky simulací se zdroji o velikostech RVE 10 a 50 voxelů při testování vlivu teplot na hydrataci, více viz kapitola 7.2.5. Jak už bylo zmíněno v kapitole 4.5, uvolňování tepla modelované na malých RVE nemá hladký průběh a díky maximální velikosti zrna probíhá hydratace rychleji a intenzivněji než při simulacích na větších RVE. Při dalším vyhodnocování těchto simulací nebyly výsledky ze zdrojů o velikosti RVE 10 voxelů dále uvažovány, byly však použity při vyhodnocení náročnosti výpočtu, viz kapitola 7.2.7.



Obr. 47: Srovnání časového průběhu teplot uprostřed trámu (tlustě) a uprostřed mostovky (tence) v závislosti na počátečních a okolních teplotách vypočteného dle modelu se zdroji o velikosti RVE 10 voxelů.



Obr. 48: Srovnání časového průběhu teplot uprostřed trámu (tlustě) a uprostřed mostovky (tence) v závislosti na počátečních a okolních teplotách vypočteného dle modelu se zdroji o velikosti RVE 50 voxelů.

Vykreslovány byly výsledky ve dvou místech konstrukce, a to uprostřed trámu a uprostřed desky mostovky. Tato místa byla zvolena jakožto typický představitel běžně užívaných betonových konstrukcí, střed mostovky může zastupovat v zásadě všechny nemasivní, tedy například deskové, betonové konstrukce

zatímco trám zastupuje spíše chování hydratace pro masivní betonové prvky. Simulace okrajových podmínek betonáže stejně jako betonáže samotné nebyla úplně totožná se reálnou situací. Betonáž tohoto mostu bude pravděpodobně probíhat ve dvou částech, nejdříve dojde v vybetonování trámů a přibližně s jednodenním zpožděním pak bude vybetonována mostovka. Naopak pro simulaci bylo předpokládáno, že průřez mostu bude vybetonován vcelku. Nicméně tento příklad byl počítán spíše jako teoretický, popisující chování typických betonových prvků při hydrataci, než přesná simulace výstavby dané konstrukce a lze konstatovat, že zjednodušení použitá pro simulaci nemají zásadní vliv na chování sledovaných veličin v průběhu hydratace.

Na základě předchozích simulací uvolňování tepla s jedním zdrojem tepla byly pro simulaci mostu vybrány pouze 3 varianty, jejichž porovnání slibovalo nejzajímavější výsledky. Tyto varianty byly následující. Proběhlo srovnání:

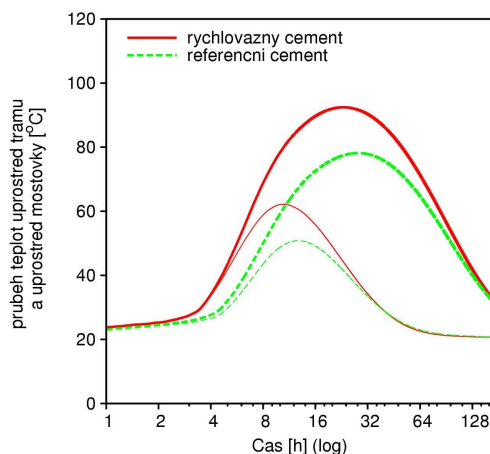
- Portlandského cementu obyčejného s cementem portlandským rychlovazným
- Různých hodnot jemnosti mletí cementu
- Rozdílných hodnot počátečních teplot

### **7.2.3 Srovnání výsledků simulací hydratace běžného a rychlovazného cementu**

V simulaci srovnávající cementy portlandské rychlovazné a portlandské obyčejné měly oba stejné mineralogické složení i ostatní hodnoty vstupů jako v kapitole 6.6.1, jediným rozdílem byla jemnost mletí rychlovazného cementu, která byla v tomto případě  $300 \text{ m}^2 / \text{kg}$ , tj. stejná jako u referenčního cementu (viz. kapitola 6.2). Důvod byl takový, že vliv jemnosti mletí byl testován hned v následující simulaci a snahou bylo srovnávat v testech vždy pouze jednu rozdílnou vlastnost, tak aby se daly jasně vyvozovat její důsledky. Jediným rozdílem mezi oběma cementy tak bylo jejich mineralogické složení. Z grafu jasně vyplývá, že se rychlovazný cement, díky kratší době trvání druhé fáze hydratace a tj. díky větší



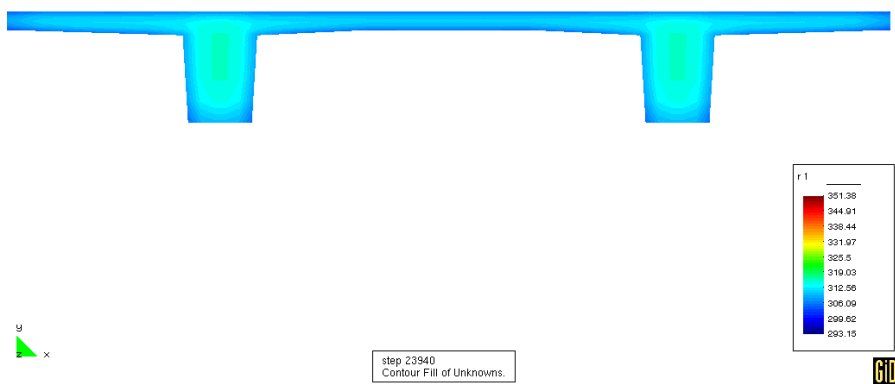
intenzitě uvolňování hydratačního tepla, zahřívá na mnohem vyšší teplotu než cement referenční. Uprostřed trámu tak teploty stoupají až ke 100°C ve srovnání s necelými 80°C, kterých dosáhne při své hydrataci cement referenční. Může se zdát, že tento rozdíl přibližně o 20°C není podstatný, avšak opak je pravdou. Jestliže teplota hydratace přes 60°C negativně ovlivňuje výsledné vlastnosti cementové struktury (viz. oddíl 2.5.3), teploty přes 80°C už strukturu díky vysokým gradientům teploty vyloženě poškozují a způsobují nezanedbatelné snížení pevnosti jako i dalších mechanických vlastností zhydratovaného betonu. Lze tedy konstatovat, že pro nemasivní konstrukce není rozdíl mezi oběma cementy nijak podstatný z hlediska výsledné kvality betonu, u masivních konstrukcí je již rychlovažný cement nevhodný.



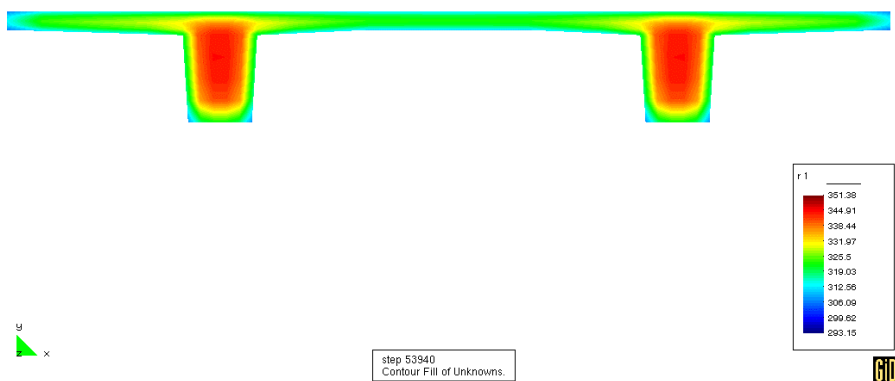
Obr. 49: Srovnání časového průběhu teplot uprostřed trámu (tučně) a uprostřed mostovky (tence) v závislosti na typu cementu.

Průběh teplot po celém průřezu mostu je patrný z Obr. 50, Obr. 51, Obr. 52 a Obr. 53. Odpovídá hydrataci obyčejného portlandského cementu při okolní teplotě 20°C. Teploty jsou v obrázcích vykresleny v Kelvinech, rozsah stupnice je tedy 20°C až 78°C. Obrázky odpovídají průběhu teplot postupně v časech 6 hodin a 40 minut tj. krátce po začátku druhé fáze, 15 hodin tj. při dosažení maximální teploty uprostřed desky, 26 hodin a 40 minut tj. při dosažení maximální teploty uprostřed

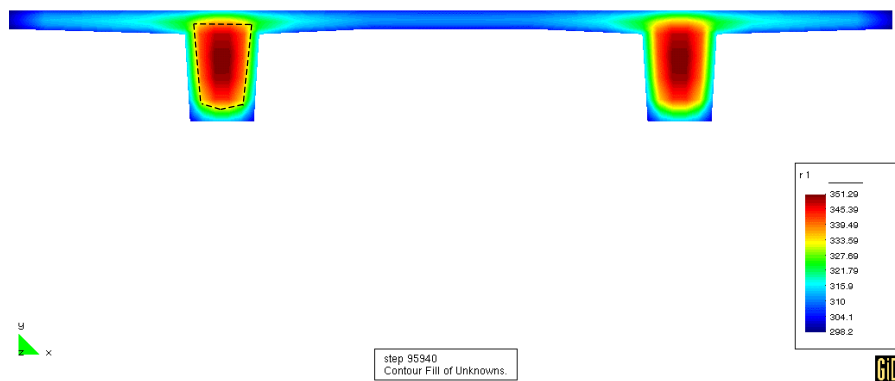
trámu a v čase 70 hodin tj. v průběhu chladnutí. V obrázku zobrazujícím stav při dosažení maximální teploty uprostřed trámu je zároveň vyznačena oblast ve které je teplota vyšší než 60°C, tudíž ve které dochází ke snížení mechanických vlastností betonu. Tato oblast svým rozsahem zároveň přibližně odpovídá oblasti, ve které při hydrataci rychlovažného portlandského cementu, dochází k ohřátí betonu nad 80°C.



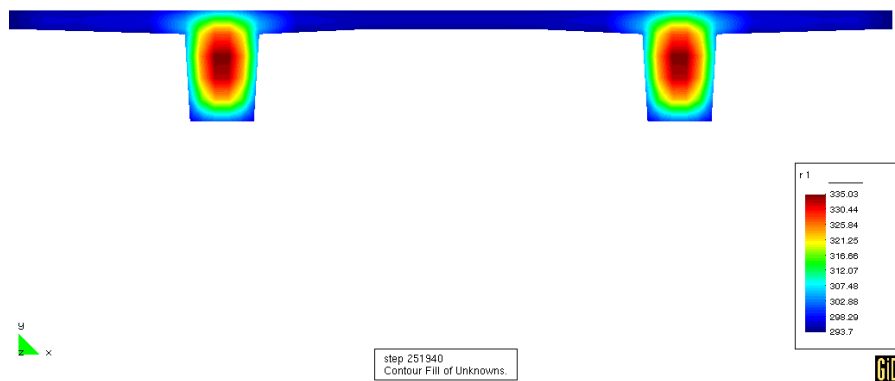
Obr. 50: Rozložení teplot (v Kelvinech) v průřezu mostu v čase 6 hodin a 40 minut od počátku hydratace, tj. na počátku druhé fáze hydratace.



Obr. 51: Rozložení teplot (v Kelvinech) v průřezu mostu v čase 15 hodin od počátku hydratace, tj. při dosažení maximální teploty uprostřed mostovky.



Obr. 52: Rozložení teplot (v Kelvinech) v průřezu mostu v čase 26 hodin a 40 minut od počátku hydratace, tj. při dosažení maximální teploty uprostřed trámu. Zvýrazněna je zóna s teplotou vyšší než 60°C.

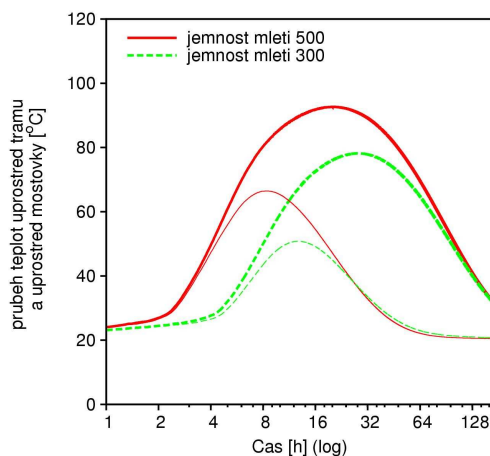


Obr. 53: Rozložení teplot (v Kelvinech) v průřezu mostu v čase 70 hodin od počátku hydratace, tj. v průběhu chladnutí.

#### 7.2.4 Srovnání výsledků simulací hydratace cementů s různými jemnostmi mletí

Další porovnávání jednotlivých vlivů na průběh hydratace probíhalo s cementy s různými jemnostmi mletí. Použitým cementem při této simulaci byl cement referenční (viz. kapitola 6.2), ostatní vstupní hodnoty byly stejné jako v kapitole 6.5.2, například vodní součinitel (0,50) či počáteční teplota (20°C). Jediným

rozdílem tak byla jemnost mletí, ta byla u referenčního vzorku  $300 \text{ m}^2 / \text{kg}$ , zatímco u vzorku ukazujícím vliv zvýšené jemnosti mletí byla rovna  $500 \text{ m}^2 / \text{kg}$ . Jak je patrné z Obr. 54, cement s vyšší jemností mletí má rychlejší nástup druhé fáze hydratace a zároveň větší intenzitu uvolňování tepla v této fázi. Zvláště uprostřed trámu je pak výsledek takový, že vysoké teploty přetrvávají ještě po delší dobu než při užití rychlovazného cementu (viz Obr. 49), což způsobuje ještě výraznější poškození struktury cementového kamene. Uprostřed desky tak, ač po určitou dobu teplota také překročí  $60^\circ\text{C}$ , není vliv teploty na výslednou kvalitu a pevnost nijak výrazně negativní. Naopak uprostřed trámu, tj. pro masivní konstrukce není cement s vysokou jemností mletí vhodný.

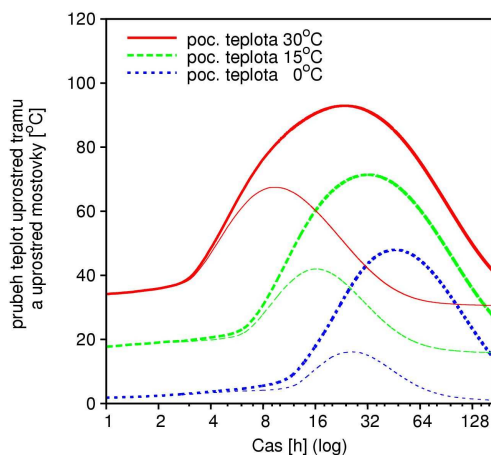


Obr. 54: Srovnání časového průběhu teplot uprostřed trámu (tučně) a uprostřed mostovky (teně) v závislosti na jemnosti mletí cementu.

### 7.2.5 Srovnání výsledků simulací hydratace při různých počátečních a okolních teplotách

Posledním porovnáním průběhu hydratace byly rozdílné počáteční a okrajové podmínky, tzn. vnější teplota okolí při hydrataci a počáteční teplota betonové směsi. Testování probíhalo na referenčním portlandském cementu (viz. kapitola 6.2), jemnost mletí byla rovna  $300 \text{ m}^2 / \text{kg}$ . Simulovány byly 3 stavy vnějších a

počátečních teplot, a to 0°C, 15°C a 30°C odpovídající rámcově podmínkám betonáže v zimě, respektive na jaře / podzim a v létě.

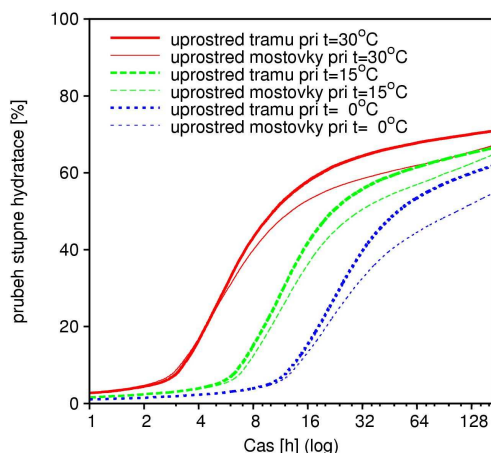


Obr. 55: Srovnání časového průběhu teplot uprostřed trámu (tučně) a uprostřed mostovky (tenče) v závislosti na počátečních a okolních teplotách.

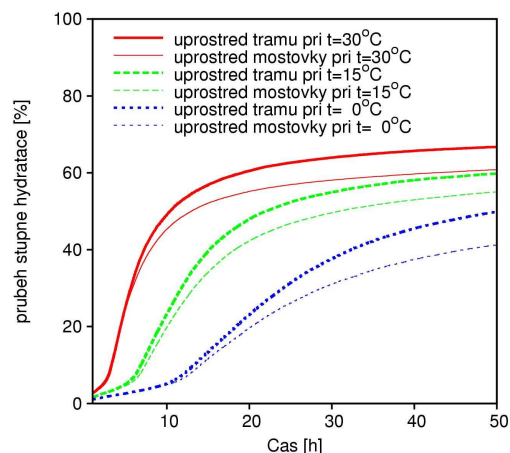
Ukázalo se, že ovlivnění hydratace v závislosti na těchto podmínkách je výrazné, přičemž rozdíl v počáteční a okolní teplotě rovný 15°C má obdobný vliv jako užití rychlovazného portlandského cementu nebo cementu s vyšší jemností mletí ve smyslu dosažených teplot betonu v průběhu hydratace. Teplotními podmínkami byl zároveň velmi ovlivněn časový průběh hydratace, například počátky druhé fáze hydratace nastaly pro teploty 0°C a 30°C v časech 3 hodiny od počátku, respektive 11 hodin od počátku hydratace.

Při těchto simulacích vlivu teplot byl zároveň sledován vývoj stupně hydratace, dle kterého lze odhadovat mnoho dalších vlastností cementu, například na jeho pevnost. Jak je patrné z Obr. 56 a Obr. 57, rozdílný průběh teplot v průběhu hydratace má významný vliv i na vývoj stupně hydratace. Ten roste nejvýrazněji zejména v průběhu druhé fáze hydratace a tudíž je ovlivněn časem jejího počátku a rychlostí jejího průběhu. Můžeme tak například pozorovat, že 50% stupně hydratace dosáhne cement uprostřed trámu při počáteční a okrajové teplotě 30°C

již po 8 hodinách, zatímco při počáteční a okrajové teplotě rovné 0°C přibližně až po 50 hodinách od počátku hydratace.



Obr. 56: Srovnání vývoje stupně hydratace uprostřed trámu (tučně) a uprostřed mostovky (tenče) v závislosti na počátečních a okolních teplotách v logaritmickém měřítku.



Obr. 57: Srovnání vývoje stupně hydratace uprostřed trámu (tučně) a uprostřed mostovky (tenče) v závislosti na počátečních a okolních teplotách.

### 7.2.6 Shrnutí výsledků simulace hydratace mostní konstrukce

Závěrem lze tedy konstatovat, že vliv počátečních a okrajových teplot při hydrataci je velmi významný a je jej třeba v každém reálnějším modelu uvažovat. Vzhledem k výsledkům dosaženým při simulacích rychlovlazného cementu a cementu s vysokou jemností mletí se pak pro masivní konstrukce jeví jako možné až vhodné užití těchto cementů právě v období s nižší teplotou okolí, naopak při vyšších okolních teplotách je i pro obyčejných portlandský cement množství uvolněného tepla příliš vysoké, poškozující vlastnosti zhydratovaného betonu.

Ke všem těmto simulacím je nutno dodat, že díky logaritmickému vykreslení grafů a tudíž jejich počátku v čase 1 hodina, v nich není zobrazena iniciační fáze hydratace ve které došlo ke krátkému, nicméně intenzivnímu uvolňování tepla.

Proto například u simulací vlivu teplot nejsou počáteční hodnoty teplot v době 1 hodina rovny přesně 0°C, 15°C respektive 30°C, neboť v iniciační fázi již došlo k mírnému ohřátí betonové směsi.

Celkově se dá říci, že u masivních konstrukcí je třeba brát ohled na průběh teplot při hydrataci, a v případě že by dosažené teploty při hydrataci byly příliš vysoké, použít například zpomalovače tuhnutí či jiné přísady a příměsi. U nemasivních konstrukcí je třeba soustředit se na průběh teplot při hydrataci pouze v případě kombinace více nepříznivých vlivů.

### 7.2.7 Srovnání rychlosti a přesnosti výpočtů simulací mostní konstrukce

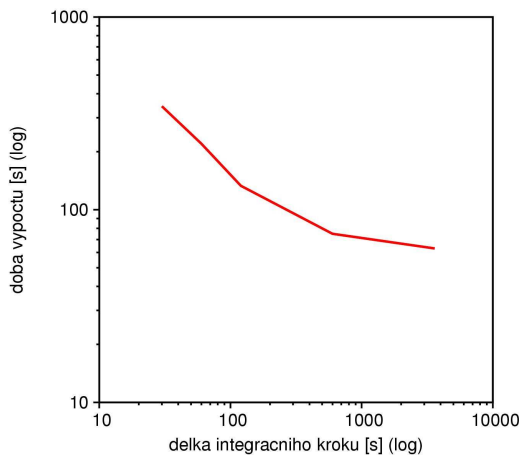
Před započítáním skutečných simulací s velikostmi RVE 50 voxelů proběhlo ještě testování celkové doby výpočtu a nalezení časového kroku při velikostech RVE 10 voxelů. Jak již bylo zmíněno v kapitole 4.3, program CEMHYD3D počítá uvolňování hydratačního tepla v jednotlivých cyklech, které se teprve později mapují na čas. Program TRFEL pak počítá v časových krocích, ve kterých získává hodnoty uvolněného tepla z CEMHYD3D. Závislost potřebné doby pro výpočet na délce časového kroku při simulacích na počítačích s procesorem o rychlosti 3,2 GHz je patrný z Tab. 11 a Obr. 58. Při simulacích na RVE o velikosti 50 voxelů by tyto časy byly přibližně 125x delší.

Časový krok [s]	Počet kroků výpočtu	Doba výpočtu [min]
30	20 160	5:44
60	10 080	3:40
120	5 040	2:13
600	1 008	1:15
3600	168	1:03

Tabulka 11: Závislost trvání doby výpočtu na délce časového kroku při simulacích na 156 RVE o velikosti 10 voxelů.

Při skutečném modelování popsaném v kapitolách 7.2.3, 7.2.4 a 7.2.5 na RVE o velikosti 50 voxelů pak byl použit časový krok 60 sekund zejména z důvodu přesnosti výpočtu, která tak byla vysoká při přijatelné délce výpočtu konstrukce.

Stojí za zmínku, že přesnost výpočtu v závislosti na délce časového kroku není téměř ovlivněna nepřesnostmi díky programu CEMHYD3D, neboť ten stejně provádí výpočet v jednotlivých cyklech, naopak nepřesnost výpočtu v programu TRFEL je časovým krokem ovlivněna mnohem více, zejména pak v první a druhé fázi hydratace kdy dochází k největšímu uvolňování hydratačního tepla. Na druhou stranu, jestliže přesnost programu CEMHYD3D není příliš ovlivněna délkou časového kroku, významným faktorem z hlediska přesnosti a reálnosti simulace je velikost RVE. Proto je z hlediska celého modelu výhodnější a větší přesnosti je dosaženo při použití relativně větších RVE spolu s delším časovým krokem v TRFELu než s menšími RVE a kratším časovým krokem v TRFELu.



Obr. 58: Závislost trvání doby výpočtu na délce časového kroku při simulacích na RVE o velikosti 10 voxelů.



## 8 Závěr

V práci bylo dosaženo těchto výsledků:

- Propojení modelu hydratace cementové pasty (CEMHYD3D) s modelem vedení tepla (TRFEL) na objektové úrovni. Tím je možné sdruženě modelovat průběh teplot při hydrataci v reálných betonových konstrukcích v závislosti na např. chemickém složení cementu, vodním součiniteli, jemnosti mletí, průběhu okolní teploty a tepelných parametrů betonu. V současné době je podobný model propojení mikrostruktury s chováním konstrukce vyvíjen pouze v Japonsku [15].
- Úspěšné použití víceúrovňového modelování. Mikrostruktura cementové pasty o rozměru typicky  $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}$  předpovídá uvolněné hydratační teplo pro sítě konečných prvků o velikosti řádově decimetrů (posun 4 řádů). Výrazné zpřesnění zdrojů tepla vycházející přímo z mikrostruktury pasty.
- Optimální velikost RVE byla nalezena přibližně  $50 \times 50 \times 50 \mu\text{m}$ , pro předběžné testy a testy správnosti zadání postačuje  $10 \times 10 \times 10 \mu\text{m}$ .
- Stanovení časového kroku pro integraci nestacionární rovnice vedení tepla je optimální volit pro většinu typů cementů v řádech minut pro integrační schéma Crank-Nicholson.
- Nalezeny faktory mající vliv na rychlost hydratace, seřazeny dle velikosti účinků: vliv počáteční teploty a průběh okolní teploty během hydratace, vliv jemnosti mletí cementu, vliv mineralogického složení cementu a vliv vodního součinitele. Uvedené výsledky souhlasí se zkušenostmi z reálných konstrukcí.

- Simulace teplot při betonáži mostní konstrukce ukázala, že uvolněné hydratační teplo je kritické u masivních konstrukcí. U nemasivních deskových konstrukcí nezpůsobí hydratační teplo díky přestupu tepla do okolí tak výrazný nárůst teplot se všemi dalšími důsledky.
- Na simulaci mostní konstrukce byl sledován největší relativní rozdíl ve stupni hydratace betonu okolo 15 % vlivem rozdílných historií teplot. Tento rozdíl v sobě zcela jistě nese odlišné mechanické vlastnosti či odlišné autogenní smršťování. Do budoucna je však možné tyto jevy modelovat víceúrovňově z reálných mikrostruktur cementových past, včetně paralelní implementace pro výpočet.

## 9 Poděkování

Mé poděkování patří rodině, přátelům a zaměstnancům Katedry Mechaniky Fakulty Stavební ČVUT v Praze, zejména pak vedoucímu této diplomové práce panu Vítu Šmilauerovi, za jejich rady, podporu a pomoc které umožnily vznik těchto řádek.

## 10 Reference

- [1] Bentz D. P., **CEMHYD3D: A three dimensional Cement Hydration and Microstructure Development Modelling Package, Version 3.0**, Building and Fire Reserach Laboratory, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland 20899, 2005
- [2] Breugel K. van, **Numerical simulation of hydratation and microstructural development in hardening cement-based materis (I) Theory**, Cement and Concrete Research vol. 25 no. 2, Pergamon 1995, 319-331
- [3] Breugel K. van, **Numerical simulation of hydratation and microstructural development in hardening cement-based materis (II) Applications**, Cement and Concrete Research vol. 25 no. 2, Pergamon 1995, 522-530
- [4] **ČSN EN 197-1**, Cement – část 1: Složení, specifikace a kritéria shody cementů pro obecné použití, Český normalizační institut 2001
- [5] Feldman R. F., Sereda P. J., **A model for hydrated Portland cement paste as Deduced from Sorption-lenght Change and Mechanical**

- Properties**, *Materiaux et Constructions* vol. 1, no. 6, Springer Netherlands 1968
- [6] Hansen T. C., Radjy F., Sellevold E. J., **Cement paste and concrete**, *Annual Reviews Material Science*, 1973, 233-268
- [7] Hansen T. C., **Physical structure of hardened cement paste, A classical approach**, *Materiaux et Constructions* vol. 19, no. 6, Springer Netherlands 1986, 423-436
- [8] Hošek J., Víttek J. L., Kuráž V., Litoš J., Matoušek J., **Teplotní a objemové změny samozhutnitelného betonu měřené na velkoobjemových modelech**, *Beton TKS číslo 6*, Beton TKS s.r.o. 2001
- [9] Jennings H. M., Thomas J. J., Rothstein D., Chen J. J., **Handbook of porous solids, kapitola 6 - Cements as porous materials**, Weinheim, Wiley-VCH 2002
- [10] H.M. Jennings, P.D.Tennis, **A model for the microstructure of calcium silicate hydrate in cement paste**. *Cement and Concrete Research* vol. 30, Pergamon 2000, 855-863
- [11] Kada-Benameur H., Wirquin E., Duthoit B., **Determination of apparent activation energy of concrete by isothermal calorimetry**, *Cement and Concrete Research* vol. 30, Pergamon 2000, 301-305
- [12] Kjellsen K. O, Detwiler R. J., Gjorv O. E., **Pore structure of plain cement pastes hydrated at different temperatures**, *Cement and Concrete Research* vol. 20, Pergamon 1990, 927-933

- [13] Krejčí T., Nový T., Sehnoutek L., Šejnoha J., **Structre-subsoil interaction in view of transport processes in porous media**, CTU Report 5 (1), Czech Technical University in Prague, 2001
- [14] Maekawa K., Chaube R., Kishi T., **Modelling of Concrete performance**, London, E & FN Spon 1999
- [15] Maekawa K., Ishida T., Kishi T., **Multi-scale Modelling of Concrete Performance, Integrated Material and Strucutral Mechanics**, Journal of Advanced Concrete Technology Vol. 1, No. 2, JCI 2003, 91-126
- [16] Mehta P. K., Monteiro P. J. M., **Concrete Microstructure Properties**, New York, McGraw-Hill Professional Publishing 2005
- [17] Meredith P., Donald A. M., Luke K., **Pre-induction and induction hydrataion of tricalcium silicate: an environmental scanning elektron microscopy study**, Journal of materials science vol. 30, Champan and Hall 1995, 1921-1930
- [18] National Institute of Standarts and Technology, **Virtual Cement and Concrete Testing Laboratory 1.1, Cement database**  
*<http://vcctl.cbt.nist.gov/vcctl/vcctl11/master.html>*
- [19] Nedbal F., **Za betonem do Evropy**, Praha, Svaz výrobců betonu ČR 1998
- [20] Neville A. M., **Properties of concrete**, John Wiley & sons 1997, 4. edice
- [21] Novák J., **Nauka o materiálech 10, Stavební materiály I**, Praha, Vydavatelství ČVUT 1999

- [22] Parrot L. J., Geiker M., Gutteridge W. A., Killoh D., **Monitoring portland cement hydration: Comparison of methods**, Cement and Concrete Research vol. 20, Pergamon 1990, 919-926
- [23] Pytlík P., **Technologie betonu**, Brno, Vutium 2000, 2 vydání
- [24] Rektorys K., **Metoda časové diskretizace a parciální diferenciální rovnice**, SNTL, Praha 1985
- [25] Schulze W., **Der Baustoff Beton**, Leipzig, Verlag für Bauwesen VEB 1984
- [26] Stark J., **Neue Ansätze zur Zementhydratation**, ZKG international 2001  
*<http://www.uni-weimar.de/~remlabor/ZKG.htm>*
- [27] Šauman Z., **Maltoviny I.**, Brno, PC-DIR s.r.o. 1993
- [28] Šmilauer V., **Modelling of hydration in cement-based materials, performance of CEMHYD3D model**, dipl, Fakulta stavební, ČVUT Praha, 2003
- [29] Taylor H.F.W., **Cement chemistry**, New York, Academic Press 1990
- [30] **TRFEL Manual**, TRFEL - finite elements for transport problems, Katedra Mechaniky, Fakulta Stavební, ČVUT v Praze  
*<http://cml/~sifel/index.html>*