

MODELAMIENTO MULTIESCALA PARA
INTERFACES ACERO/CONCRETO:
FUNDAMENTOS Y REVISIÓN CRÍTICA

ÓSCAR ALFONSO PUENTES-PORRAS

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA CIVIL
BUCARAMANGA

2014

MODELAMIENTO MULTIESCALA PARA INTERFACES ACERO/CONCRETO:
FUNDAMENTOS Y REVISIÓN CRÍTICA

ÓSCAR ALFONSO PUENTES-PORRAS

Trabajo de Grado presentado para optar al Título de
Ingeniero Civil

Director: Prof. Oscar Begambre Ph.D.

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICO-MECÁNICAS
ESCUELA DE INGENIERÍA CIVIL
BUCARAMANGA
2014

AGRADECIMIENTO

No son pocas las personas que han aportado a la realización de este trabajo. En particular, y más importante, quiero ofrecer un reconocimiento al trabajo de orientación del Profesor O. Begambre; a su saber científico y a su pedagogía que me han permitido iniciar una línea de investigación en ciencia de materiales, materia condensada y física computacional. A la instrucción de los profesores Chio Cho, Rey Soto y al equipo de profesores asociados al área de Estructuras; al Recurso Humano de la Escuela de Ingeniería Civil; a las Facultades de Ciencias y de Ingenierías de la Universidad Industrial de Santander y al profesor Alvaro Ramírez. A todos ellos, mi respeto y agradecimiento.

a mis padres

a mis hijos

The system of real numbers has the property, for example, that between any two of them, no matter how close, there is a third. It is not at all clear that physical distances or times can realistically be said to have this property. If we continue to divide up the physical distance between two points, we could eventually reach scales so small that the very concept of distance, in the ordinary sense, could cease to have meaning.

Roger Penrose, *The Emperor's new Mind* (1989)

To what extent do models help? It is interesting that very often models do help [and offer] a good physical feel for how things are going to work. But it always turns out that the greatest discoveries abstract away from the model and the model never does any good. [..] The method of guessing the equation seems to be a pretty effective way of guessing new laws.

Richard Feynman. *The character of physical Law* (1965)

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	15
1. CARACTERIZACIÓN	16
2. REVISIÓN DE MODELOS	19
2.1. MODELOS MECÁNICOS	19
2.2. MODELOS FISICOQUÍMICOS	29
3. EVALUACIÓN DEL ESTADO DEL ARTE	40
3.1. PROBLEMAS FUNDAMENTALES	40
3.2. PROBLEMAS TECNOLÓGICOS	41
4. CONCLUSIÓN	45
BIBLIOGRAFÍA	46
ANEXOS	54

LISTA DE TABLAS

TABLA 3.1 EJEMPLO DE MATRIZ DE EVALUACIÓN DEL ESTADO DEL ARTE EN EL TEMA DE INVESTIGACIÓN	42
TABLA 3.2 MATRIZ DE EVALUACIÓN DEL ESTADO DEL ARTE: PROBLEMAS FUNDAMENTALES	44
TABLA 3.3 MATRIZ DE EVALUACIÓN DEL ESTADO DEL ARTE: PROBLEMAS TECNOLÓGICOS	44
CLASIFICACIÓN DE REFERENCIAS	56
RESUMEN COMPARATIVO DE MODELOS	57

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1 MODELO DE INTERFAZ ACERO/CONCRETO	22
FIGURAS 2.2 MODELO DE PROPAGACIÓN DE FALLA Y PROGRAMACIÓN ORIENTADA A OBJETOS	22
FIGURA 2.3 MODELO MARKOVIANO DE PROPAGACIÓN	24
FIGURA 2.4 CRITERIO HIPERBÓLICO EN MODELO DE ADHERENCIA	27
FIGURA 2.5 PERFIL DE INTERFAZ	31
FIGURA 3.1 COMPARATIVO DE TRABAJOS INCLUIDOS EN LA REVISIÓN	42
FIGURA 3.2 PUBLICACIONES POR TÍTULO	43
FIGURA 3.3 FRECUENCIA INTERANUAL PUBLICACIONES	44

LISTA DE ANEXOS

ANEXO A ÍNDICE DE MATERIAS	55
ANEXO B CLASIFICACIÓN DE REFERENCIAS	56
ANEXO C RESUMEN COMPARATIVO DE MODELOS	57

This page intentionally left blank

RESUMEN

TÍTULO:

MODELAMIENTO MULTIESCALA PARA INTERFACES ACERO/CONCRETO:
FUNDAMENTOS Y REVISIÓN CRÍTICA *

AUTOR:

Óscar Alfonso Puentes-Porras**

PALABRAS CLAVE:

Caracterización; multiescala; modelamiento; interfaces; acero; concreto;
compositos; adherencia.

El trabajo exhaustivo de caracterización en ciencia de materiales ha llevado siempre a la incertidumbre propia de procesos irreversibles descritos por la naturaleza misma de la materia. En la búsqueda de una aproximación aceptable a este reto insoluble, el modelamiento teórico ha representado una herramienta poderosa que requiere de un alto grado de abstracción. Por otra parte, las afirmaciones de la Física y de la Ciencia de Materiales son debidas a observaciones y prácticas experimentales llevadas al máximo grado de precisión posible. En particular, la síntesis de materiales compuestos ha contribuido al desarrollo y al bienestar de los países. Es por esta razón que su conocimiento comprensivo sin duda llevará a modificaciones en las escalas atómica y molecular en busca de mejorar propiedades ya conocidas.

En el presente trabajo se revisan ideas fundamentales en modelamiento y avances tecnológicos en caracterización de materiales a nivel microscópico e inferior. Se da una descripción de aquellos modelos mecánicos y fisicoquímicos enfocados hacia la composición y la dinámica de la zona de contacto entre el acero y el concreto, desde diferentes escalas i.e., atómica, molecular, nano, micro y macroscópica, en lo que se ha denominado Interfaces Acero/Concreto (IAC). También se aborda una discusión crítica que identifica las ventajas y posibles inconvenientes de cada uno de los modelos revisados, como una guía de trabajo para investigadores interesados en proponer un modelo teórico multiescala del objeto de estudio, y se muestra que modelos basados en la dinámica de interacciones prevalecen sobre modelos morfológicos estáticos. Finalmente, el estudio presenta una evaluación del estado del arte de cara a los problemas inherentes al trabajo de investigación en caracterización y modelamiento multiescala de la interfaz acero/concreto.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Civil. Director: Prof. Oscar Begambre Ph.D.

SUMMARY

TITLE:

FUNDAMENTALS OF MULTISCALE MODELING FOR STEEL/CONCRETE
INTERFACES: A SURVEY*

AUTHOR: Óscar Alfonso Puentes-Porras**

KEYWORDS: Characterization; multiscale; modeling; interface; steel;
concrete; composites; bond-slip.

In depth characterization of materials leads to fundamental uncertainties related to irreversible processes and to the proper nature of matter. To cope with such a riddle so far unsolved, modeling recursion is an acceptable and a very useful tool that requires a great deal of abstraction. On the other hand, most of the physical facts about materials science had been asserted due to observations and experimental practices after the constant development in instrumentation techniques. Composite cementitious reinforced materials comprise a significant contribution to the upgrowth and welfare of countries. Thus a thorough, comprehensive knowledge of the very core of such materials, no doubt steers modifications in the molecular and atomic scale in order to enhance their properties.

This review paper outlines a bundle of models for structural concrete characterization, particularly those that describe both, the composition and the dynamics of the steel/concrete interface from the multiscale formulation standpoint. A survey of the fundamental features on small-scale characterization is presented too. Furthermore, and in order to base an introduction on further development in materials science modeling, a critical discussion on the advantages and/or setbacks of each model is addressed.

* Undergraduate Thesis Work

** Faculty of Physics and Mechanical Engineering. Department of Civil Engineering.

Prof. Oscar Begambre Ph.D., Thesis director

INTRODUCCIÓN

El desarrollo actual en ciencia de materiales se ha propuesto modificaciones a escala cuántica y molecular basadas en interacciones de estructuras cristalinas [1][4][26][63]. Uno de sus objetivos específicos es la búsqueda de estructuras internas controlables a partir de síntesis de materias de composición diversa [3][24][68]. Por mucho tiempo el conocimiento acumulado con respecto al comportamiento y las características de un material fué empírico y determinista [52][122]; en la actualidad, en términos de daño y fatiga, el enfoque tiende a ser probabilista [19][21][41][42], manteniendo el rigor de la experimentación [15][20][72][85][90][99][116]. En particular, la caracterización del concreto estructural parte de la medición de esfuerzos y deformaciones que cambian con el tiempo y con variables ambientales y de carga [17]. El análisis de gran parte de los datos obtenidos en observaciones controladas ha llevado a la formulación de modelos teóricos de la naturaleza de los procesos que se desarrollan al interior y en torno de los elementos que componen el material. En ese sentido, la hipótesis del *continuo* es aún referente [17][52][59][68][89][120]. Tal es el punto de vista macroscópico. Sin embargo, la complejidad de los procesos dinámicos propios de materiales complejos ofrece un alto grado de incertidumbre en la medida en que se los estudia en escalas más finas [25][65]. Es allí donde surgen las soluciones que contribuyen a entender y mejorar nuestras burdas observaciones superficiales.

En este trabajo¹ se seleccionaron algunos estudios que abordan problemas de caracterización y análisis desde diferentes escalas de observación. Una revisión crítica ha permitido identificar los modelos que más se ajustan a la noción del objeto de estudio, i.e. la interfaz acero/concreto, y a su vez los propone como referente en el planteamiento de futuros modelos teóricos que satisfagan las necesidades científicas, igualmente identificadas en el presente trabajo (ver Sección 3). La importancia de tener una mayor comprensión de la zona de contacto acero/concreto, permitirá un trabajo de caracterización detallado y modelos realistas que aporten nuevos datos y sugieran diseños inteligentes como parte de la solución a problemas prácticos de durabilidad, seguridad y comodidad.

Los trabajos seleccionados se clasificaron según su aporte, i.e. si su objetivo responde a la caracterización mediante exposición teórica y/o por técnicas de experimentales (Sección 1), o bien al planteamiento de un modelo mecánico o fisicoquímico (Sección 2). Finalmente, se evalúa el estado del arte en el tema de investigación (Sección 3).

¹Desamb.: la acepción utilizada en este trabajo de la palabra inglesa 'interface' corresponde al contexto de procesos físicos de supercie, diferenciándolo, aunque no por ello desarticulándolo del término compuesto 'inter phase' que en química física describe relaciones entre distintos estados de la materia o fases. Se ha encontrado en la literatura especializada en español el uso de las palabras 'interfase' o 'interfaz' y con menor frecuencia 'interface' indistintamente. Por lo tanto, y para efectos de la consistencia del texto, se utilizará la palabra 'interfaz' y su plural 'interfaces' para describir el objeto de investigación.

1. CARACTERIZACIÓN

La coalescencia físicoquímica del concreto estructural se puede entender con el conocimiento de los procesos de hidratación [64][83][106][123], fraguado y curado [67][45][99][108][116], y con la caracterización de cada una de sus fases componentes considerándolas como materiales compuestos *per se*, i.e. una fase dúctil representada por el acero de refuerzo [29][112], una fase dura representada por agregados rocosos [43][60][88] y una Zona de Transición Interfacial ZTI, de baja resistencia representada por cristales de etringita [27][87][117] portlandita [23][117] y Silicatos de Calcio Hidratados (SCH) [34] [45] [49] [75] [106] [121] que conforman la pasta de cemento [55] [94] [119].

Fórmulas analíticas [45], Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear RMN [75], procesamiento digital de imágenes [81], trazadores metálicos líquidos [90], análisis de difracción de rayos X [49] [53] [127], Microscopía Electrónica SEM [119] [121] [134], de Fuerza Atómica AFM, SAS [74], y acústica SAM [132], monitoreo piezoeléctrico no destructivo [123], procedimientos de medición de constantes elásticas y capacidad portante por indentación en diversas escalas [78] [86] [115] [135], son algunas de las técnicas más difundidas que han permitido conocer de forma concreta la microestructura del material. Recientemente se ha logrado la caracterización a escala nanoscópica [34] [38] [101], y las respuestas térmica y mecánica de arreglos atómicos fundamentales ante condiciones de sollicitación pueden ser simuladas computacionalmente mediante modelamiento molecular [27] [61] [65]. Tal avance, sumado a metodologías de unificación inter-escala [15][42][47][68][69][77], homogenización y bifurcación [25] [122] [125], y métodos de Optimización por comportamiento de Sociedades de Partículas OSP [96] aplicados a la caracterización por reconocimiento de imagen, han permitido mayor comprensión de la constitución y el comportamiento estructural del material. La literatura descriptiva de procesos físicoquímicos en el concreto es abundante: Hewlett [54] reúne una serie de artículos dedicados a la química del concreto y del cemento. Landis [69], ofrece una representación explícita de procesos físicos. Thixotropía, comportamiento reológico y viscosidad de pastas hidratadas, son tratados por Roussel [108]. En términos económicos, el uso extendido del concreto en construcción de obras civiles, proyectos energéticos e infraestructura es indicador de un gran esfuerzo académico y científico: periódicamente se publican datos experimentales (ver Sección 3) y estándares de calidad y normas técnicas de acuerdo con políticas de desarrollo regionales [5][7][10][11][27][58].

Parejamente, se han intentado modificaciones que tienden a optimizar desempeños, acelerar procesos y prolongar períodos útiles, *viz.* revestimientos cerámicos que incrementan la energía de adhesión acero/concreto [3]; concretos con adiciones poliméricas superficiales [20] y fibras poliméricas orientadas según diseño [12] [57] [130]; concretos avanzados modificados con técnicas computacionales de dosificación [32]; compositos de concreto reforzado con fibras de acero distribuídas aleatoriamente [40] [95] [109] e inserciones controladas de nanomoléculas de sílice[124] y nanotubos de carbón NTCs[135].

Entre tanto, son otros los procesos que cobran importancia a nivel de redes cristalinas. Brune [19], Chiang et al. [23] y Kittel [63], exponen de forma general la física del estado sólido desde una perspectiva holística y unificadora; discuten el estado cristalino ideal de un material y establecen que muchas de las propiedades de la materia condensada como conductividad eléctrica, difusión, transporte, densificación y evolución de fracturas y deformaciones son determinadas por la estructura de la red de Bravais y el número y tipo de imperfecciones. Ver también los trabajos de Tadmor [122] y van Mier [125]. Abraham y Gao [1] comparan velocidades de propagación de onda simulando estados particulares de agrietamiento por cortante a lo largo de interfaces débiles en arreglos periódicos de medios cristalinos elásticos. Adamson y Gast [2] analizan procesos fisicoquímicos en superficies de diversa naturaleza proporcionando estudios de caso; por su parte, Patrykiewicz y Borówko [97] logran simulaciones computacionales representativas de fenómenos de adsorción en superficies energética y geoméricamente heterogéneas; Allnatt y Lidiard [4], asumen un enfoque probabilista para explicar fenómenos de transporte relacionados con imperfecciones en arreglos cristalinos mediante simulaciones Monte Carlo. Armstrong y Todd [8], describen la electroquímica debida al intercambio iónico entre fases metálicas y substratos electrolíticos sólidos. Este tipo particular de interfaces electroquímicas es también descrito a fondo en [14] por Bergmann y Tannenberger. Grathwohl [51] explica procesos de difusión y transporte atómico en medios porosos homogéneos desde un marco fenomenológico. De otra parte, Essam [39], propone un modelo de difusión en medios cristalinos por clusters percolativos a partir de la teoría de grafos, y Watson *apud* Domb y Green [128], revisan algunos efectos de superficie y tamaño en variedades de *lattices* y arreglos planos. Una solución numérica de la segunda ley de Fick no lineal es dada por Sharma et al. [113] en su trabajo sobre procesos de difusión en medios ópticos heterogéneos, mientras que Spiegel [118] desarrolla métodos analíticos básicos para dar solución a la Ecuación Diferencial Parcial (EDP) de segundo orden que gobierna el problema de conducción térmica de Fourier.

Una definición general de *interfaz*, como la región de características propias que separa dos fases diferentes, en la cual tienen lugar gran variedad de fenómenos de transición, es propuesta por Slattery et al. [114].

Aunque son contadas las referencias que asumen una caracterización unificada del acero estructural y del concreto, el estudio los procesos de corrosión ha enfocado su interés en reacciones interfaciales [19] [28] [82] [131] [134], presentando resultados importantes para el trabajo de modelamiento [103] [105].

De los trabajos revisados, hacen referencia explícita a algún aspecto de interés en el estudio de interfaces acero/concreto:

- **Energía de adhesión y rugosidad:** Allison et al. [3], Baky et al. [12], Berthet et al. [16], Domínguez e Ibrahimbegovic [36], Garbacz et al. [44], Garzón et al. [46], Golafshani et al. [48], Khalfallah & Ouchenane [62], Liang et al. [71], Lin et al. [72], Mehta et al. [84], Roque & Volnei [107], Tawie & Lee [123].

- **Microestructura:** Horne et al. [56].

- **Corrosión:** Michel et al. [85], Richard et al. [105], Zapata [131], Zhao et al. [134].

- **Fatiga y fractura:** Satoh et al. [110], Walter et al. [126].

- **Parámetros constitutivos:** Lee et al. [70].

los cuales se proponen como referencia obligada en el abordaje de la caracterización del objeto de investigación.

2. REVISIÓN DE MODELOS

Ashby [9] reconoce dos tipos de trabajo: aquel que desarrolla un modelo creativo (o bien, modificado), y aquel que sugiere las bases mismas del modelamiento.

Modelos los hay de muchas clases y es conveniente por tanto distinguir un modelo empírico [12][18][31][33][40][47][48][50] como uno que se puede ajustar matemáticamente a un conjunto de mediciones y que no tiene gran poder predictivo, de un modelo analítico [36][41][102] o físico que, por contraste, ofrece recursos de los cuales es posible derivar predicciones generalizadas basadas en leyes establecidas. Además, dada una gran cantidad de variables a tener en cuenta, un modelo físico representativo y realista necesariamente es un modelo dinámico [25].

El estudio de un sistema dinámico comporta varias etapas [21], en su orden: la identificación de un *sistema real* objeto de investigación; la construcción de un *sistema modelo* representativo del sistema real; la evaluación del sistema modelo con sus *predicciones*, la delimitación de la utilidad del sistema modelo y su *validez*. Varios autores [12][18][22], han procedido mediante el empleo de objetos geométricos básicos relacionados con la simetría sugerida por los procesos estudiados en el sistema real. De ese modo se obtienen leyes constitutivas y representaciones para densidades de masa lineales [33][41][62] y espacios de dos [36][40][91] y más dimensiones [47][92].

Aparte, el enfoque multiescala busca entender comportamientos estructurales en la escala macroscópica haciendo uso de información obtenida de simulaciones o por medio de caracterización en escalas inferiores. En tal sentido, métodos de diseño y modelamiento molecular [61][65][68] representan una herramienta poderosa. Sumado a lo anterior, y desde una perspectiva global y colectiva, la tendencia actual en modelamiento enmarca un contexto interdisciplinario. Colaboraciones en medicina, astrofísica, ingeniería y economía entre otras disciplinas, han ofrecido soluciones anteriormente insospechadas a problemas comunes. Ejemplos interdisciplinarios de modelamiento multifísico y multiescala son actualmente motivo de discusión en congresos internacionales, p.ej. [66].

De acuerdo con los procesos analizados y el alcance de cada trabajo, los modelos incluidos en esta revisión se han clasificado en Mecánicos y Físicoquímicos. A continuación se da una descripción de cada uno de ellos.

2.1 Modelos Mecánicos

La noción de falla tiene un sentido muy amplio y puede ser encontrada en diversos campos independientemente de la escala de observación. Con algunas excepciones [80], los modelos que describen el problema de fatiga debido a pequeñas fallas puntuales siguen la idea clásica de fractura lineal de Griffith [52] e Irwin & Paris [59], cuya representación matemática del proceso de agrietamiento de un material que se comporta en el rango elástico, i.e. con módulo de Young E y relación de Poisson ν , es un pequeño corte lineal sometido a esfuerzos uniformes normales al plano de discontinuidad efectuado en la superficie de un medio semiinfinito, cuya energía varía entre un estado no deformado y un estado fracturado como función de la distancia al punto de falla.

En materiales compuestos la resistencia al desprendimiento depende de la geometría, del tipo de unión (*crack bridging*) y del área de contacto s entre los componentes. En realidad la variable s , además de las condiciones de contacto, depende de variables ligadas al mecanismo de falla, pero la dependencia principal corresponde al estado de deformación local en la vecindad de zonas inelásticas, i.e., condiciones de frontera. Simplificaciones al modelo son también expuestas por Bolotin [17] desde el conocimiento clásico de la mecánica de fatiga, para determinar ciclos de vida en función de parámetros de carga en materiales compuestos. El autor reconoce dos metodologías: la que busca una estimación del daño en términos de número de ciclos o de tiempo útil, y aquella que se propone evaluar el daño de acuerdo con el crecimiento del frente de agrietamiento. El uso de una u otra metodología depende del régimen de carga y de la escala de análisis. Un patrón unidireccional de propagación de agrietamiento sigue las siguientes hipótesis: a escala microscópica el material es compuesto por una cantidad finita de elementos similares entre sí (desde el punto de vista estadístico). La falla de un elemento ocurre cuando éste alcanza un valor de esfuerzo de referencia p.ej., el máximo esfuerzo a tensión, representado por una variable aleatoria cuya Función de Densidad de Probabilidad (FDP) depende de la deformación última que puede alcanzar el elemento. Un cuerpo se compone de un número finito de dominios críticos; el incumplimiento de al menos uno de ellos implica la falla del cuerpo en su totalidad. Desde el punto de vista macroscópico se verifica el concepto del enlace más débil (*weakest-link*) con el cual se pueden estimar tamaño, forma y posición de cada uno de los dominios críticos en estructuras reales a partir de la observación de fracturas en estructuras similares, es decir que el modelo se puede alimentar escogiendo cuidadosamente la geometría y teniendo un conocimiento del campo de esfuerzos y deformaciones sobre cada elemento. Son abundantes los trabajos que recrean el problema de progresión de agrietamiento bajo diferentes condiciones en busca de parámetros mecánicos. Entre las metodologías utilizadas se cuenta la simulación por medio del Método de Elementos Finitos (MEF) con *lattices* continuos planos [18][40][47] y el modelamiento micromórfico de la llamada Zona de Proceso de Fractura (ZPF) [13][50][57][60]; análisis de propagación multifractal [22] y aplicaciones interactivas usuario-servidor por medio de Programación Orientada a Objetos (POO) [30] son otras alternativas de modelamiento bastante extendidas. Las interfaces de materiales compuestos son definidas como discontinuidades, anomalías o, en cualquier caso como zonas difusas producto de reacciones químicas. No hay un consenso al respecto de la composición, aunque sus dimensiones se asumen mucho menores comparadas con las de especímenes de prueba: frentes de agrietamiento matemáticamente definidos como rectas e interfaces modeladas como planos, siguiendo el modelo clásico [52][59]. En el tratamiento teórico de la referencia [120] se presentan modelos de propagación lineal de agrietamiento localizado en interfaces elásticas -con o sin espesor- que separan otras fases elastoplásticas; modelos analíticos que dan cuenta tanto de la energía de adhesión como de la fuerza de desprendimiento interfacial en materiales compuestos cuyos microparámetros pueden ser relacionados con parámetros elásticos macroscópicos (E, ν) conocidos.

La validación de este tipo de modelos muestra la existencia de superficies de fisuración localizadas a lo largo de capas muy finas de falla en especímenes de prueba que se desarrollan tempranamente en el régimen elástico.

La energía total debida al trabajo realizado en el proceso de deformación es equivalente a la energía elástica almacenada en la probeta, más el calor disipado a través de flujo plástico, más cierta cantidad de energía residual dentro de la fisura. Es de suponerse que los puntos del material más cercanos al frente de agrietamiento desarrollarán deformaciones inelásticas mientras que el gradiente de energía disminuye con la distancia a la discontinuidad.

La idea de determinar la fuerza de adherencia de elementos inmersos en una matriz sólida por medio de pruebas *pull-out* ha sido desarrollada por varios autores desde diferentes aproximaciones: micromecánica no lineal en materiales compuestos[12]; experimentalmente, variando el tipo de conexión [16]; entrenando Redes Neuronales Artificiales (RNA) con bancos de datos experimentales [31][48]; simulaciones con el MEF basadas en leyes de constitución termodinámicas [36], o por medio de análisis paramétricos y de sensibilidad [70].

Así, Désir et al. [33] adoptan tanto modelos de constitución basados en el comportamiento termodinámico de interfaces discontinuas con disipación de energía isotérmica, así como modelos numéricos que tienen en cuenta desplazamientos relativos ξ en la interfaz y que se validan por procedimientos experimentales. Ambos modelos asumen un comportamiento plástico e isotrópico. La variación de la energía intrínseca tiene la forma

$$\varphi dt = \mathbf{T} \cdot d\xi - d\psi, \quad (2.1.1)$$

con \mathbf{T} , el tensor de esfuerzos y ψ , la energía libre de Helmholtz. El modelo es aplicado a elementos prismáticos que permiten grados de libertad en cada extremo. Por comparación se establecen relaciones topológicas de interfaz de espesor nulo: (i) concreto elástico/concreto plástico. (ii) concreto plástico/concreto elástico. (iii) concreto plástico/concreto plástico.

Técnicas más sutiles se han desarrollado para determinar un valor del Módulo elástico del concreto en la escala microscópica. El interés se concentra en la vecindad de la zona de transición interfacial (ZTI) -que es como se denomina a la frontera de grano entre la pasta de cemento y los agragados, pasado el tiempo de hidratación- y el elemento de refuerzo. Cuando un elemento de concreto estructural es cargado, la transmisión de esfuerzos sigue la ruta de menor energía. En la escala microscópica se ha establecido que si hay una ruta crítica de esfuerzos, esa ruta es, en efecto la ZTI, hipótesis que ha sido probada experimentalmente p.ej. en [135] por Zhu y colaboradores.

La programación POO aplicada a la resolución de problemas mecánicos y en particular al análisis de estructuras reticulares por el método matricial es anterior a la década de 1970 [62]. Asimismo, la validación de modelos estructurales por medio de Análisis de Elementos Finitos (AMEF), es ya una técnicas harto extendida.

Para la representación del concreto estructural se han usado varias alternativas, dependiendo de si el refuerzo se considera discreto o inmerso en la pasta. En cualquier caso, existe aún cierta dificultad en la definición de los elementos conectores internodales que representan interfaces acero/concreto y por lo tanto los modelos comportan, en gran medida, simplificaciones importantes.

Llama la atención por ser uno de las primeras abstracciones, pero principalmente por su concepción mecánica, el modelo de adherencia y desprendimiento (*bond-slip*) utilizado por Ngo y Scordelis (1967) *apud* [62] y [107], que representa la interfaz acero/concreto con un elemento de enlace (*bond element*) compuesto por un juego ortogonal de resortes internodales para los cuales se establece la relación esfuerzo-deformación (FIGURA 2.1). En este modelo², cada nodo es representativo de cada uno de los dos materiales i.e. acero y concreto, que componen el compuesto. Los elementos utilizados son definiciones isoparamétricas cilíndricas y planares, articulados en un entorno computacional.

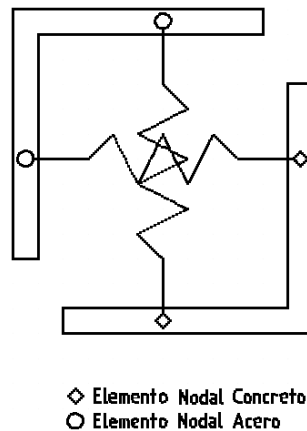


FIGURA 2.1 Modelo de Interfaz acero/concreto [62] [107]

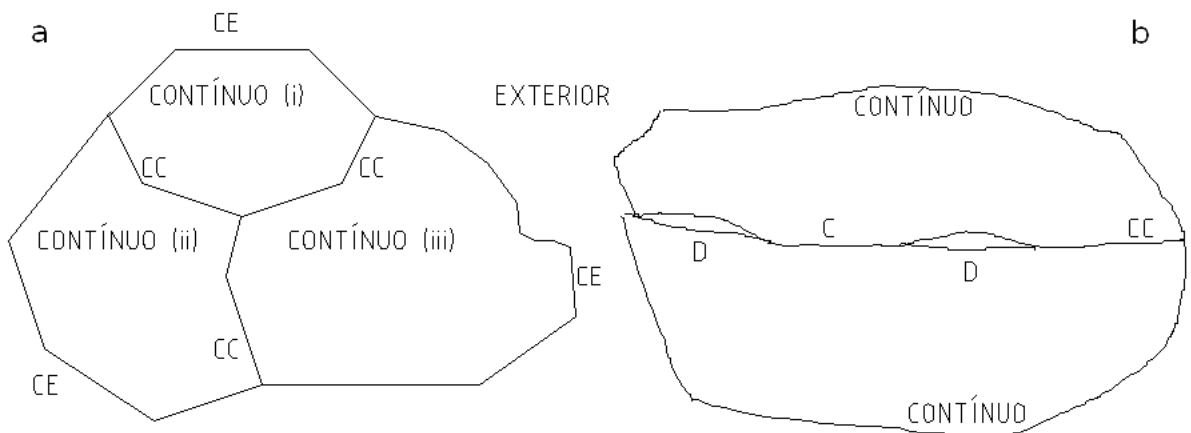


FIGURA 2.2 a) Topología. b) Segmentación de interfaz: D (discontinuo) y C (continuo). [30]

² *The Rigid-Body-Spring Model*, Revisado también por Landis y Bolander [69], quienes lo atribuyen a Kawai (1978).

El modelo de Cojocarú y Karlsson [30] es otra implementación de la programación POO que simula estados de propagación de falla por cargas cíclicas en elementos 2D, otorgando grados de libertad mediante liberación nodal. Parámetros de propagación son datos necesarios para la inicialización del modelamiento, que, por lo demás puede utilizar software comercial. Las clases y dominios definidos en el modelo son señalados en las FIGURAS 2.2. Se definen dos conjuntos de objetos: el objeto *continuo* que representa una fase o material. Esta clase es constitutiva y en ella se definen propiedades y rutinas de respuesta. Y el objeto de *interfaz* que describe una clase topológica, i.e., describe relaciones de ubicación relativa e interacción entre objetos *continuo* (CC) o entre objetos continuo y el objeto *exterior* (CE). Adicionalmente las interfaces se definen como intactas o *continuas* (C) e interfaces falladas o *discontinuas* (D), *viz.* agrietamientos, vacíos, poros e imperfecciones.

Contrario a otros modelos que suponen un incremento de agrietamiento por cada ciclo, en este modelo es posible trabajar a partir otros criterios, pero depende en gran medida de la gestión de la base de datos y del nivel de programación.

Ghosh et al. [47] adoptan una metodología *adaptativa multinivel* con la cual generan subdominios computacionales con diferente grado de resolución para abordar problemas multiescala obteniendo predicciones de la evolución de variables estructurales y microestructurales en materiales porosos. El nivel macroscópico es analizado por medio de desplazamientos con el método de elementos finitos FEM, mientras que para el análisis microestructural se adopta el método de Celda de Voronoi VCFEM, reconociendo regiones críticas y no-críticas para sus simulaciones. Son tres los dominios computacionales de análisis: macro(Nivel 1), macro-micro(Nivel 2) y micro(Nivel 3), relacionados entre si por medio de leyes constitutivas basadas en la mecánica del medio continuo y técnicas de homogenización. La adaptabilidad del modelo lo hace eficiente sin perder la precisión requerida para cada región analizada.

Basado en un modelo adherencia-desprendimiento (Taira et al.,1978) y en su aplicación a pequeños agrietamientos en sistemas cristalinos (Tanaka et al.,1986), el modelo probabilístico de fatiga por propagación de microgrietas de Fedlich [41] describe la interacción entre la zona plástica y la frontera de grano como un proceso de Markov.³

La variación del esfuerzo de corte $\Delta\tau = \tau_1 - \tau_2 \geq 2\tau_Y$ es condición para un estado inicial de fisuración de una pequeña franja analítica $2c$, siendo τ_Y el esfuerzo último de fricción. La propagación se asume como un proceso discreto, y se define a través de un factor de intensidad de esfuerzos $K = K(a, c, \tau)$ como una función creciente de la longitud de fisuración c , de modo que la zona plástica se expande hacia un dominio adyacente si $K \geq r$, siendo r un valor crítico, de lo contrario la plastificación se interrumpe.

En contraste, el crecimiento del agrietamiento, por ciclo n en cada dominio de grano es proporcional al desplazamiento de la ranura y se asume como un proceso continuo con gradiente $v = v(a, c) = \frac{dc}{dn}$ que cumple la condición de frontera $\lim_{c \rightarrow a} v(a, c) = 0$, siendo a la frontera de grano (Ver FIGURA 2.3).

³A. Markov(Ryazan, Rusia 1856-St.Petersburg, Rusia 1922).

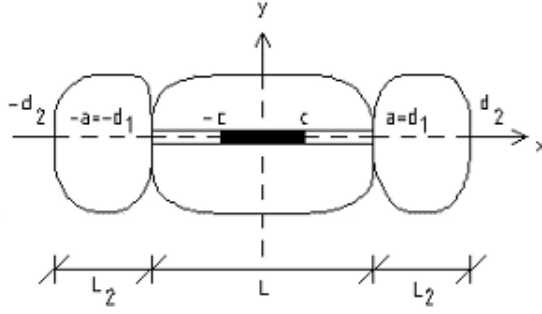


FIGURA 2.3 Tamaño de microfisura y frontera de grano [41]

Por otro lado, el tamaño de grano l debe ser definido como una variable aleatoria L descrita por la distribución de probabilidad $P_L(l) := \mathcal{P}(L \leq l)$ y, mientras la resistencia r al deslizamiento entre fronteras en vecindades de grano depende de su orientación relativa, r es considerada asimismo como una variable aleatoria R con distribución de probabilidad $P_R(r) := \mathcal{R}(R \leq r)$.

Pasados n ciclos, el estado del sistema es descrito por dos variables aleatorias $A(n)$ y $C(n)$ las cuales, respectivamente, representan la magnitud de la franja de deslizamiento y la magnitud de la microfisura, donde los valores $a_0, c_0 = l_0 = d_0, n_0$ son condiciones del estado inicial.

La transición entre dos estados $(A(n'), C(n'))$ y $(A(n), C(n))$ es determinada por la probabilidad condicional⁴

$$P(a, c, n | a', c', n') := \mathcal{P}(A(n) \leq a, C(n) \leq c | A(n') = a', C(n') = c'). \quad (2.1.2)$$

No se descarta un salto \mathcal{J} de la zona de plastificación hacia otra frontera de grano; su probabilidad condicional se calcula como $P(\mathcal{J}, n | a', c', n')$ en función de resistencia P_R y factores de intensidad de esfuerzos K .

Luego, entre dos estados consecutivos $(A(n'), C(n'))$ y $(A(n), C(n))$, es posible calcular la distribución de probabilidad como una probabilidad condicional de transición con y sin salto

$$P(a, c, n | a', c', n') := P(a, c, n | \mathcal{J}, a', c', n')P(\mathcal{J}, n | a', c', n') + P(a, c, n | \bar{\mathcal{J}}, a', c', n')P(\bar{\mathcal{J}}, n | a', c', n) \quad (2.1.3)$$

En un intervalo cíclico $\Delta n = n - n'$ puede o no presentarse salto de una frontera a otra, por tanto Δn se debe escoger lo suficientemente pequeño como para garantizar al menos un salto entre n' y n . Así, el tamaño de la fisura después de n ciclos será calculado como una función de las características de la fisuración al inicio y al final del intervalo cíclico: $\beta(a', c', r, a, \Delta n)$.

⁴En un proceso de Markov la probabilidad de un estado futuro está encadenada únicamente por el valor del estado más reciente i.e., de un estado inmediatamente anterior, por lo tanto información de cualquier estado $(A(n''), C(n'')), n'' \leq n'$ precedente, no altera la probabilidad del estado futuro.

Finalmente, para la función de distribución de probabilidad $P(a, c, n|a_0, c_0, n_0)$ entre el estado inicial y el actual, se deriva una ecuación de balance utilizando la ecuación de Chapman-Kolmogorov, con $p := \partial^2 P / \partial a \partial c$, $p_R := dP_R/dR$ y $p_L := dP_L/dR$, en el límite en que $\Delta n \rightarrow 0$:

$$\frac{\partial p}{\partial n} + \frac{\partial vp}{\partial c} = \int_{a_0}^a P(\mathcal{J}|\Delta a) - P(\mathcal{J}|A(n)) \quad (2.1.4)$$

Este resultado tiene dos componentes: el primer término es la probabilidad de salto que conduce a un tamaño de fisura a . El segundo término es la probabilidad de salto a partir de $A(n)$. Una vez integrado, y en el dominio del ancho de franja, es posible determinar la probabilidad de transición para la longitud de fisuración.

Este modelo ofrece la ventaja de aplicación en cualquier escala, siempre que las condiciones iniciales y de frontera sean datos de prácticas objetivas de caracterización, aunque la interfaz propiamente dicha no intervenga en el modelamiento.

En cambio, trabajos como el de Khalfallah y Ouchenane [62], consideran de forma explícita la interfaz acero/concreto cuando se estudia la adherencia de sistemas estructurales reforzados sometidos a pruebas de tracción con carga uniaxial monotónica. Su modelo se basa en trabajos previos [123] y en la teoría de distribución de esfuerzos τ a lo largo de elementos de diámetro D y superficie A definidos, los cuales son sometidos a deslizamiento por carga axial según la ecuación

$$\frac{\partial^2 s}{\partial x^2} - \frac{\pi D}{EA} \tau(s) = 0 \quad (2.1.5)$$

donde $s(x)$ es el deslizamiento local del elemento sometido a tracción uniaxial y E el Módulo de Young. Consideran como primera hipótesis que el esfuerzo de adherencia τ es función lineal de s , esperando una mayor variación de esfuerzos con elementos más rígidos. Su segunda hipótesis considera varias etapas en la generación de esfuerzos, algunas de ellas sugiriendo un comportamiento no lineal -como es el caso de los esfuerzos iniciales en donde la incertidumbre por calibración y desajuste es importante comparada con la dimensión característica de los especímenes de prueba- hasta alcanzar un valor s_1 a partir del cual se verifica un decremento lineal de la resistencia por adherencia. La simulación sugiere que la distribución de los esfuerzos de adherencia en el elemento anclado sometido a tracción es determinada principalmente por las propiedades de la interfaz, y como consecuencia, la transferencia de pequeños deslizamientos s depende de la relación anclaje-esfuerzo. Al comparar los resultados entre tres tipos de modelo, el lineal, el exponencial y el analítico, se encuentran diferencias marcadas en la respuesta dependiendo de tipo de elemento que se usó para definir la interfaz (*bond element*).

El modelo de Niezgodá y Derewońko [92], parte de un estado global de carga macroscópico aplicado a elementos prismáticos que descompone en bloques elementales isoparamétricos rectangulares de ocho nodos. Con base en la *Teoría Clásica de Laminación* para estados de esfuerzos planos se obtienen deformaciones finitas en términos de tensores de esfuerzo de Piola-Kirchhoff y de Green. En la escala macro, el análisis no lineal no considera falla individual entre elementos pero los desplazamientos y condiciones

de frontera obtenidos se aplican posteriormente a elementos compuestos por dos fases, fibra de carbono armada en una dirección dentro de matriz epóxica, simulando la estructura meso y microscópica del concreto. En estas escalas inferiores el análisis no lineal sí considera fallo entre fases individuales, e incluso estados de carga térmica. Cerca de 40000 elementos uninodales fueron utilizados en el modelo (~20000 elementos fibrosos binodales tipo viga). La evaluación es efectuada en puntos nodales que representan interfaces fibra/matriz, tanto en el eje neutro como en fibras alejadas. Los autores señalan que para determinar inicios de agrietamiento, el modelo de interfaz fibra/matriz debe ser explícito, i.e., debe considerar imperfecciones de adherencia.

Del trabajo de Baky et al. [12] se deriva un modelo 3D no lineal de fallo por adherencia microplanar para elementos finitos tetrahedrales (4 nodos), para concretos Reforzados unidireccionalmente con Fibra de Refuerzo Polimérica (FRP), el cual tiene en cuenta la variación local de los esfuerzos resistentes en la longitud de la interfaz fibra/pasta de acuerdo con una ley general esfuerzo-deformación que relaciona el esfuerzo cortante de adherencia debido a tracción uniaxial τ con esfuerzos normales locales σ que inevitablemente se desarrollan en el concreto desde la superficie de la interfaz:

$$\tau_{m\acute{a}x} = g(\sigma, f), \quad (2.1.6)$$

ley que se comprueba posteriormente con resultados hallados en la literatura y por medio de experimentos en especímenes de concreto FRP diseñados para tal fin.

El modelo general es tripartita. Independientemente se evalúa la resistencia al corte de a) elementos poliméricos laminares (macro-modelo), b) capa adhesiva(meso-modelo), y c) interfaz con el concreto(micro-modelo) en términos de perfiles de adherencia.

Etse et al. [40] desarrollan un modelo de *interfaz de espesor nulo* que predice desempeños de concretos reforzados con fibras de acero dispuestas de forma aleatoria, en dos niveles de observación: macro y mesoescala. Inicialmente el comportamiento es gobernado por la interacción de las componentes normales y de corte de esfuerzos actuantes en el plano de interfaz (juntas de adhesión) de acuerdo con un criterio hiperbólico de resistencia máxima que se ajusta, o que es acotado por las superficies extremas de los criterios de Mohr-Coulomb y de Potencial Plástico. La hipótesis de trabajo asume un régimen elástico-lineal hasta alcanzar el valor pico; posteriormente, el régimen plástico es formulado en términos de disipación de energía según dos tipos de fractura. En la fractura tipo I el agrietamiento activa la superficie de máximos esfuerzos a lo largo del eje de esfuerzos normales σ_N . La fractura de tipo II, gobernada por esfuerzos de corte σ_T , es representada por un hipérbola cuyos parámetros corresponden a la resistencia a tensión τ , la cohesión c , y el ángulo de fricción ϕ de la mezcla. En la FIGURA 2.4 puede verse el patrón asintótico de la superficie hiperbólica con las superficies de control de los criterios de Potencial Plástico y de Mohr-Coulomb.

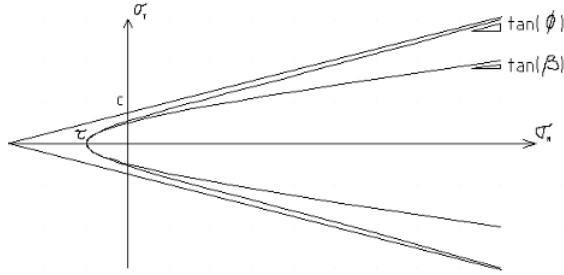


FIGURA 2.4 Hipérbola de falla acotada por las superficies de falla Mohr-Coulomb (ϕ) y de Potencial plástico (β) [40]

En modelamiento de sistemas multifásicos es práctico partir de la base de la mecánica del continuo; de este modo un sistema compuesto puede considerarse homogéneo e isotrópico. La adopción de la Teoría de Mezclas (*Mixture Theory*) permite este tratamiento siempre que se encuentre una ley constitutiva bien definida. El modelo de Etse y sus colaboradores está pensado para Compositos de Cemento Reforzados con Fibras de Acero (SRFCC)⁵, asumiendo una distribución uniforme de fibras de refuerzo en la masa cementicia de acuerdo con la Teoría de Mezclas. Condiciones últimas de resistencia son definidas como leyes de flujo y evolución del agrietamiento, las cuales han de ser articuladas con una ecuación de constitución, que para el presente modelo, relaciona un término de rigidez \mathbf{C} con un término de desplazamientos relativos \mathbf{u} , normales y tangenciales tanto para el régimen elástico como para el régimen plástico: $\mathbf{t} = \mathbf{C} \cdot \mathbf{u}$.

De este modo queda establecida la formulación del modelo en términos de energía de fractura que posteriormente puede validarse por medio de un modelo de falla en Elementos Finitos.

En la práctica, este tipo de modelos basados en mezclas al nivel nanoscópico presentan el inconveniente de la instalación *in situ*, debido al alto grado de incertidumbre en la orientación adecuada de las fibras que evitan agrietamientos previos al fraguado. Una solución a este problema es bastante costosa y requiere de dosificadores especiales y de todo un trabajo de prefabricación.

Micromecánica de modelos constitutivos para concretos fibrosos de alto desempeño son presentados por Huespe et al. [57] y por Oliver et al. [95]. Modelos micromecánicos como el de Plé & Bayard [100] son aplicados a Concretos Pulverizados altamente Reactivos (RPC) empleando un *Modelo de Inclusión*. Por su parte, Brighenti y su equipo [18], aplican una alternativa FEM que consiste en definir elementos reticulares planos para modelar materiales fracturables reforzados con elementos fibrosos (FRC) ordenados aleatoriamente, cuyo módulo de elasticidad E depende de la longitud y del área de la sección transversal de micro-elementos (*lattices*) hexagonales. El modelo supone dos condiciones diferentes de carga: el Modo I, es una distribución de carga uniforme. En el Modo II, elementos tipo viga asumen cargas puntuales en varios puntos de la luz. Los resultados, diagramas de carga vertical *vs.* desplazamiento vertical, son comparados con los correspondientes al modelo de elemento finito continuo clásico.

⁵ *Steel Reinforced Fiber Cement Composite*, por su sigla en Inglés.

Ideas fundamentales del modelamiento multiescala aplicado a evolución de agrietamiento y dislocaciones son expuestas por Chandra *apud* Kwon [68]. Entre otras, se explican *Técnicas de Borde flexible*, Dinámica Molecular MD y Dinámica molecular de grano grueso *coarse grained* CGMD; técnicas energéticas de deformación homogénea aplicando la ley de Cauchy-Born (tensor de segundo orden) y métodos quasi-contínuos de nanoindentación y de frontera de grano, son implementaciones todas basadas en el método de elementos finitos. Para enfrentar el problema de escalamiento, suele asumirse técnicas de homogenización de Expansión Asintótica. Otros autores [31][48] aportan modelos basados en Lógica Difusa y protocolos RNA de hasta 6 puntos (capas) para predecir resistencias de adherencia entre fases sólidas, validables mediante experimentación.

Una revisión completa (ca. 2002) de modelos de fractura es presentada en [13] por Bazant, quien diferencia tipos de fractura de materiales dúctiles y de materiales frágiles; introduce el concepto de Zona de Proceso de Fractura (ZPF) y lo analiza bajo los supuestos de una Mecánica Lineal Elástica de Fractura (MLEF); asimismo desarrolla el cálculo de micro-parámetros por el método de mínimos cuadrados, llegando a una conclusión importante sobre el número máximo y la confiabilidad de los mismos. Finalmente discute la efectividad de modelos basados en el trabajo de Griffith [52][59][89].

Una exposición general sobre modelamiento multiescala de materiales desde las nociones cuánticas básicas del nivel subatómico a la descripción del contínuo puede encontrarse en Tadmor y Miller [122]. Van Mier [125], por su parte propone un acercamiento multiescala a procesos de fractura en el concreto, describiendo las técnicas clásicas de entramados planos, concentración de esfuerzos, Mecánica Lineal Elástica de Fractura MLEF, modelos de plasticidad de fractura puntual y detección de parámetros en modelos de fractura ficticia.

Las aproximaciones matemáticas al problema mecánico de evolución de fisuras generalmente adoptan un modelo microestructural que describe concentraciones de esfuerzos en una pequeña franja que se deforma gradualmente hasta experimentar un salto abrupto en el campo de deformaciones. Tal divergencia afecta los términos de rigidez de cada elemento y a las simulaciones ejecutadas sobre entramados de elementos finitos en la zona de fisuración. Ante tal problema, los modelos adoptan configuraciones de elementos dinámicos y adaptativos como los presentados por Rashid y Bouchard, revisados en el trabajo de Cojocarú y Karlsson [30]⁶ ⁷.

De acuerdo con lo anterior, el modelamiento mecánico de interfaces en materiales compuestos sigue la dinámica de fatiga y de agrietamiento, en la mayoría de los casos, considerando simplificaciones propias de los medios contínuos, obteniendo así soluciones analíticas de gran utilidad. Una aproximación no lineal, por otro lado, implica soluciones numéricas inexactas y técnicas adecuadas en la definición de leyes de constitución.

⁶Rashid M.M. The arbitrary local mesh refinement method: an alternative to remeshing for crack propagation analysis. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* (1998) 154:133–50.

⁷Bouchard P.O, Bay F., Chastel Y., Tovina I. Crack propagation modelling using an advanced remeshing technique. *Comput. Methods Appl. Mech. Engng.* (2000) 189:723–42.

2.2 Modelos Fisicoquímicos

Allnatt y Lidiard [4], al estudiar fenómenos de transporte en sólidos utilizan métodos aplicables en principio, a cualquier modelo, independientemente del mecanismo de migración atómica o de la concentración de los posibles defectos de superficie. La capacidad de procesamiento y de cómputo limita, sin embargo, la complejidad de los modelos y las propiedades de interés en las simulaciones logradas, cuya importancia es relevante cuando los métodos analíticos se ven restringidos. Las propiedades de transporte pueden ser calculadas de dos formas, i.e. mediante la simulación de un sistema termodinámico en equilibrio o bien, simulando un sistema dado en presencia de una fuerza termodinámica. En el primer caso, los coeficientes de transporte son calculados a partir de expresiones que describen una respuesta lineal. En el segundo caso, el cálculo se obtiene a partir de flujos inducidos por una perturbación externa conocida aplicada a un sistema químicamente homogéneo: en particular, una simulación emplea una aleación binaria aleatoria AB en arreglo cúbico con algunas vacancias. Dependiendo del ordenamiento atómico, pueden ser necesarias simulaciones de ensamblaje a través de algoritmos de Monte Carlo. Una vez superado el equilibrio metaestable, se selecciona aleatoriamente una vacancia y una vecindad. Si la vecindad corresponde a un átomo, se calcula la frecuencia de salto w en el intercambio atómico según la ecuación 2.2.1, donde c_i es la concentración relativa de cada especie i (*nucleones*):

$$w = \sum_i c_i w_i \quad (2.2.1)$$

Para Adamson y Gast [2], en la escala atómica ($0.5 \times 10^{-15} \text{m}$), una interfaz ideal se caracteriza por ser suave. Superficies de apariencia suave a nivel molecular (uno a cinco órdenes de magnitud más grande que el caso atómico) presentan rugosidad e irregularidades. Las únicas interfaces que llegan a ser lo suficientemente suaves como la planteada teóricamente es el tipo de interfaces entre cristales armónicos [1], cristales fundidos de metales como el platino y algunos polímeros deformables. Todas las demás interfaces entre sólidos tienden a ser rugosas a nivel atómico de tal forma que la densidad de corriente i , expresada en unidades $[\frac{A}{\text{cm}^2}]$, medida macroscópicamente, no es uniforme en regiones muy pequeñas (del orden de $1 \mu\text{m}^2$). Debido a esto se presentan resistencias R_{ct} asociadas a la diferencia de potencial entre uno y otro material y una transferencia de iones, cuyos diámetros son ligeramente mayores pero del mismo orden que las longitudes que recorren entre picos de asperezas (*Longitudes de Debye*) [8]. La corriente de intercambio iónico se supone bidireccional y puede ser evaluada según la siguiente relación deducida originalmente para interfases gaseosas de constante R , donde F es constante (*cte. de Faraday*), n el número de partículas y T la temperatura del sistema:

$$i_0 = RT/nFR_{ct}, \quad (2.2.2)$$

ecuación que define el movimiento de cargas por conducción térmica. Irregularidades superficiales estudiadas con microscopía electrónica y técnicas de imagen y mapeo ofrecen una topografía de interfaz detallada. Imperfecciones, asperezas y nucleaciones observadas en metales, normalmente sugieren la formación de una nueva fase. Un proceso

tal de depósito de productos de oxidación puede alcanzar órdenes de magnitud de hasta cientos de Angstroms (escala meso-nanoscópica) [2]. Aceptando la hipótesis de que las interfaces metal/cemento son interfaces electroquímicas debido a la naturaleza de las reacciones entre una fase anódica (metal) y un electrolito sólido catódico (pasta), se presentan dos clases de interfaces: a) Interfaces de bloqueo, y b) Interfaces de no bloqueo, dependiendo de si la interfaz se comporta como un circuito RC en serie o no. Aunque se supone cargada con carga $\pm q$ cada superficie, el equilibrio eléctrico se cumple mientras no se presente una diferencia de potencial $\Delta\phi$ debida a flujo de electrones. Un rango límite de densidad de carga normalmente se presenta entre -10 y $10 \frac{\mu C}{cm^2}$. La capacitancia C define tipo de interfaz de acuerdo con la relación

$$C = \frac{dq}{d\Delta\phi}. \quad (2.2.3)$$

Aspectos teóricos y experimentales en procesos electroquímicos, asumiendo en cada modelo la naturaleza de los electrolitos utilizados y sus conductividades eléctricas, son discutidos por Armstrong y Todd [8]. Proponen cinco modelos de los cuales, por configuración y fases descritas, interesa el modelo de interfaz *Metal/Sólido conductor*, descartando problemas relacionados con la formación de productos diferentes a las dos fases establecidas para el modelo e ignorando la formación de *estructura de poro*, aspectos que discuten de forma contextual y sin mucho rigor. No obstante presta especial atención al modo en que se equilibran cargas, si el equilibrio no se logra inmediatamente, o si se observa equilibrio inmediato en lo que definen como *Interfaces de bloqueo y de no bloqueo*. En ese sentido, se revisan dos modelos de interfaz.

El Modelo de Helmholtz predice el valor de la capacitancia C de la doble capa de interfaz como función de la distancia representativa (radio iónico a_0) entre cargas móviles en ambas superficies (constante dieléctrica ϵ_0), y del área de contacto A

$$C = \epsilon_0 \epsilon \frac{A}{a_0} \quad (2.2.4)$$

El metal es tratado como un material con exceso de carga negativa (dona electrones) que se balancea por el exceso de cationes móviles cuyos centros distan tan solo un radio atómico de la superficie. De forma similar el modelo Gouy-Chapman predice un comportamiento interfacial pero tiene en cuenta otros iones p.ej. aniones, insertos que cambian las condiciones eléctricas de flujo.

Tal vez el único parámetro usualmente tenido en cuenta en la caracterización de interfaces, es el espesor $\epsilon(x)$. En el artículo de Widom [128], sobre energía potencial y la tensiones superficiales, se sugiere un modelo de interfaz en que además del espesor se considera un perfil variable $\rho(x)$, como se esquematiza en la FIGURA 2.5. La variación espacial implica que puntos $x \gg \epsilon$ pertenecientes a la fase sólida (c) presentan un perfil ρ_c , en tanto que puntos $x \ll -\epsilon$, que pertenecen a la fase sólida (a) presentan un perfil ρ_a . Técnicas recientes de mapeo acústico y láser han permitido establecer parámetros topográficos en superficies sólidas aportando datos de forma, inclinación y textura [46].

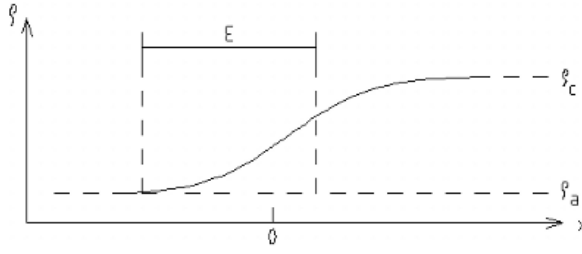


FIGURA 2.5 Perfil de interfaz [128]

Patrykiewicz y Borówko [97] utilizaron simulaciones computacionales para modelar la adsorción focalizada en superficies homogéneas o uniformes partiendo del trabajo de Langmuir (1918). Posteriormente abordan el problema de heterogeneidad incluyendo un número limitado de regiones defectuosas a superficies homogéneas. De ese modo los autores simulan el proceso de adsorción y describen directamente el aspecto imperfecto de superficies energética y geoméricamente heterogéneas al tiempo que identifican parámetros característicos de cada región midiendo energías de adsorción. El modelo es incapaz de correlacionar procesos de adsorción si éstos ocurren en regiones extremas no adyacentes.

Maekawa et al. en [76] y posteriormente en [77] desarrollaron el modelo multiescala para el concreto estructural como una herramienta de predicción del comportamiento de estructuras civiles durante su vida útil. Para los diferentes procesos proponen un modelo individual según la escala de aproximación:

- Hidratación y estructura de poro.* $10^{-10} \sim 10^{-6} m$
- Humedad, equilibrio y transporte.* $10^{-10} \sim 10^{-6} m$
- Transporte iónico.* $10^{-8} \sim 10^{-6} m$
- Carbonatación.* $10^{-9} \sim 10^{-6} m$
- Transporte de Oxígeno y Corrosión.* $10^{-9} \sim 10^{-6} m$
- Mecánica de fractura.* $10^{-6} \sim 10^{-2} m$

Supuestos. El concreto se compone sólo de material fino. En este sentido, la pasta es un mortero denso que no incluye arena o agregado grueso. El esquema del modelamiento inicia con el proceso de formación de la matriz de un cemento Portland convencional (Silicatos de Calcio Hidratados SCH). El tamaño, la forma y la separación de las partículas en suspensión se supone, permanecen constantes así como la porosidad total del grano. Hay capilaridad, pero ésta se activa sólo en puntos de contacto entre esferas y no dentro de ellas, lo que implica un núcleo de grano compacto y seco. La densidad de la solución tiene el siguiente orden jerárquico descendente: a) Volumen no hidratado (núcleo). b) Volumen interno de productos de hidratación. c) Volumen externo hidratado. d) Granos de SCH. e) Porosidad capilar. f) Porosidad-gel, y g) Porosidad intercapa. La distribución del tamaño de grano ϕ y su crecimiento controlan la capilaridad de la solución porosa:

$$\phi = \frac{r}{r+D} = \left(\frac{x}{c_{rec.}} \right) \phi_{max} \quad (2.2.5)$$

donde x es la distancia radial al centro del grano de diámetro ϕ ; r y D son longitudes características de la porosidad.

En cuanto a la energía del proceso de hidratación, que es una medida de la energía del sistema, puede ser obtenida de especímenes por medio de ensayos adiabáticos con aumento gradual de temperatura o bien por simulación computacional del grado de hidratación del volumen representativo de la mezcla. En cualquier caso, el contenido de humedad es un dato indispensable para conocer el grado de hidratación. Se ha utilizado una subrutina basada en el concepto de cascarón rígido (*hard shell*) dentro de clusters hidratados. Por tratarse de un material heterogéneo, la energía de hidratación de la pasta de concreto no es una cantidad constante ya que depende de la energía de cada mineral y del grado de hidratación individual de los granos. El balance de la masa total húmeda tiene en cuenta tanto el agua condensada como el vapor de agua.

Como toda ecuación de conservación, el equilibrio termodinámico se plantea en términos de capacidad, conductividad y pérdidas, referidas a un volumen representativo:

$$\rho \left(\sum \phi_i \frac{\partial S_i}{\partial P} \right) \frac{\partial P}{\partial t} - \text{div} (K \nabla P) + \rho \sum S_i \frac{\partial \phi_i}{\partial t} - W_P \frac{\partial \beta}{\partial t} = 0 \quad (2.2.6)$$

donde S es el área superficial del poro, que depende del inverso de la longitud característica (r^{-1}) evaluada en el volumen representativo V ; K es la conductividad con sus componentes líquido K_l y de vapor K_v . Otra variable de control para esta parte del modelo es la presión de poro P ejercida por la fracción de agua condensada, mientras que la difusión de la fracción correspondiente al vapor de agua la controla la conductividad por desalojo de poros (teoría de difusión de Knudsen). El flujo de vapor de agua depende del volumen representativo y de la variación de la densidad:

$$q_v = - \frac{\phi D_0(T)}{\Omega} \int_{r_c}^{\infty} \frac{dV}{1+N_k} \nabla \rho_V = -D_V \nabla \rho_V, N_k = \frac{l_m}{2(r-t_a)} \quad (2.2.7)$$

y se ve afectado por factores geométricos de la estructura compleja de poro como la tortuosidad de los canales $\Omega = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$, la longitud equivalente que recorre la molécula de agua l_m [m] y el espesor de la capa de adsorción t_a [m], cuya relación N_k es el adimensional Número de Knudsen. El coeficiente de difusividad del vapor D_0 se expresa en unidades $\left[\frac{m^2}{s}\right]$. En general, se espera que un cambio de temperatura afecte sustancialmente el transporte de masa, como ocurre a nivel macroscópico en medios porosos. En esas condiciones el flujo de humedad (difusividad de vapor y permeabilidad líquida) se puede expresar como

$$J = - (D_P \nabla P_l + D_T \nabla T) \quad (2.2.8)$$

con D_P y D_T , las respectivas conductividades de los gradientes de potencial de presión y temperatura. El calor se difunde pero no es un evento importante comparado con la transferencia de humedad condensada debida a la presión de poros. Con una geometría de grano ideal, la presión de poros de la fase líquida P_l dependerá del tamaño de las esferas en contacto r_s , produciéndose tensiones superficiales $\gamma \left[\frac{N}{m}\right]$, tal como lo describe la ecuación de Laplace:

$$P_l = \frac{2\gamma}{r_s} \quad (2.2.9)$$

A nivel molecular (tamaños de poro del orden $\text{nm} \sim \mu\text{m}$) el flujo líquido depende de la viscosidad η_i de referencia y de la energía libre G (Energía de Gibbs) que activa el flujo por exceso:

$$q_l = -\frac{\rho_l \phi^2}{50\eta} \left(\int_0^{r_c} r dV \right)^2 \nabla P_l = -K_l \nabla P_l, \eta = \eta_i \exp\left(\frac{G_c}{RT}\right) \quad (2.2.10)$$

donde R es la constante de gases, en unidades $\left[\frac{J}{\text{mol}\cdot K}\right]$.

Finalmente, la presión de poros de la fracción de vapor P_v , puede relacionarse con la presión de poros de la fase líquida o condensada por medio de la energía libre G :

$$\ln\left(\frac{P_v}{P_{sat}}\right) = \frac{P_l M_w}{\rho_l RT} \quad (2.2.11)$$

con P_{sat} como la presión de vapor de saturación [Pa] y M_w y ρ_l como la masa molecular del agua $\left[\frac{kg}{\text{mol}}\right]$ y la densidad líquida del agua, respectivamente.

En cuanto al transporte iónico, el modelo se concentra en el transporte del ión cloruro por ser un ión agresivo causante de la corrosión del refuerzo dentro del concreto. Aparte de la difusión de un frente de concentraciones, el transporte iónico es también un proceso advectivo-convectivo pues se trata de la transferencia de un frente horizontal de una solución acuosa. De un balance de masa para cloruro libre se obtiene la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi S C_{Cl}) + \text{div} J_{Cl} - Q_{Cl} = 0, \quad (2.2.12)$$

como la variación del flujo J , en términos de concentración del ión cloruro C_{Cl} , porosidad ϕ y saturación S del medio. Por tratarse de la totalidad de cloruros en el medio poroso, el balance tiene en cuenta el término Q con el que se denota la cantidad del ión adherida que no participa en el flujo libre. Los iones adheridos se han clasificado en dos categorías, los *cloroaluminatos* adsorbidos por las paredes porosas y aquellos cloruros químicamente enlazados. En condiciones locales de equilibrio químico es posible encontrar una relación entre cloruros libres y cloruros ligados, o retenidos, por unidad de volumen.

No son pocos los autores que relacionan la dependencia del coeficiente de difusión con la concentración del ión cloruro. Ver p.ej. en [133]. Una solución analítica de la ecuación de difusión y análisis de perfiles de corrosión acelerada en probetas con diferentes porosidades sugieren una dependencia inversa entre concentración y coeficiente de difusión aparente [131].

En general se adopta un valor constante $D_{Cl} = 3.0 \times 10^{-11} \left[\frac{m^2}{s}\right]$ después de realizar numerosos análisis de sensibilidad. Se ha tenido en cuenta nuevamente la tortuosidad Ω y la constricción δ de los canales entre poros, como un factor de reducción del flujo. La difusividad se puede calcular como el producto entre D_{Cl} y $\frac{\delta}{\Omega} \phi S$, donde la porosidad, las condiciones iniciales de mezcla e incluso el rastro histórico de humedad son contribuyentes. Simultáneamente, los iones se transportan en gradientes acuosos con una velocidad de advección $\vec{u} = -\frac{K \nabla P}{\rho \phi S} \left[\frac{m}{s}\right]$. El vector de flujo iónico \vec{u} , es entonces la resultante de dichas componentes:

$$J_{Cl} = -\frac{\delta}{\Omega} \phi S D_{Cl} \nabla C_{Cl} + \phi S \vec{u} C_{Cl} \quad (2.2.13)$$

Por otro lado, los procesos de carbonatación, transporte y equilibrio del CO₂ gaseoso y disuelto son procesos termodinámicos que modifican considerablemente la microestructura del concreto. El equilibrio químico de las fases gaseosa y condensada del dióxido de carbono (Ec. 2.2.14) se puede expresar en términos de potencial, flujo y pérdidas, tal como en las ecuaciones 3.2.6 y 3.2.12. Las unidades de densidad gaseosa y disuelta en $\left[\frac{kg}{m^3}\right]$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ \phi [(1-S) \rho_{gCO_2} + \rho_{dCO_2}] \} + \text{div} J_{CO_2} - Q_{CO_2} = 0. \quad (2.2.14)$$

La ley de Henry describe la proporcionalidad entre las concentraciones C de las fases gaseosa y líquida del CO₂ como el equilibrio entre el volumen de gas disuelto ejerciendo presión sobre el volumen líquido:

$$p = kC. \quad (2.2.15)$$

Valores de la constante k [unidades de presión] para el hidrógeno (7.2), oxígeno molecular (4.4) y carbónico (5.8) disueltos en agua se encuentran en cualquier parte, p.ej. [71a]⁸. Las presiones parciales en ambas fases suelen expresarse en términos de densidad o fracción molar en lugar de concentraciones. Por su parte, el flujo J depende de la conectividad de los poros. Como en el caso del transporte iónico, la geometría de los conductos, mientras más intrincada ofrecerá mayor resistencia al desalojo local de CO₂. Entre los parámetros físicos a tener en cuenta en la caracterización de la microporosidad se encuentran la constricción δ y la tortuosidad Ω , mencionadas anteriormente. La primera ley de Fick describe el transporte y la difusividad del CO₂ en la matriz porosa del concreto:

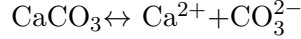
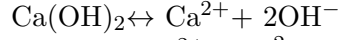
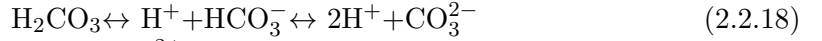
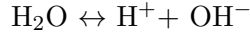
$$J_{CO_2} = - \left(D_{dCO_2} \nabla \rho_{dCO_2} + D_{gCO_2} \nabla \rho_{gCO_2} \right), \quad D_{dCO_2} = \frac{\delta}{\Omega} \phi D_0^d \int_0^{r_c} dV, \quad D_{gCO_2} = \frac{\delta}{\Omega} \phi D_0^g \int_{r_c}^{\infty} \frac{dV}{1+N_k} \quad (2.2.16)$$

donde r_c es el radio de equilibrio. Los coeficientes de difusión $\left[\frac{m^2}{s}\right]$, en las ecuaciones anteriores se obtienen integrando las difusividades correspondientes al volumen de la fase saturada para el CO₂ disuelto y al volumen de poro de la fase seca, para el CO₂ gaseoso. El consumo de CO₂ representado por el término Q $\left[\frac{kg}{m^3 s}\right]$ en la ecuación (2.2.14) es consecuencia del proceso de hidratación de la pasta.

La calcita es un mineral presente y muy activo en el endurecimiento del cemento Portland convencional y la determinación exacta de iones libres e hidróxidos de calcio, así como la concentración de ácidos carbónicos es un inconveniente. Sin embargo, en condiciones de equilibrio las reacciones son disociativas⁹:

⁸Levine I.N. Quantum Chemistry. 5th.ed. Prentice-Hall. 2000.

⁹La carbonatación es una reacción ácido-base en la cual participan aniones y cationes de Brønsted, es decir que en equilibrio, los ácidos tienden a donar protones y las bases son en cambio receptores de protones.



y la variación del carbonato de calcio es descrita por la Ecuación Diferencial de primer orden

$$Q_{\text{CO}_2} = \frac{\partial(C_{\text{CaCO}_3})}{\partial t} = k[\text{Ca}^{2+}][\text{CO}_3^{2-}] \quad (2.2.19)$$

El modelo utilizó un valor de $k = 2,8 \left[\frac{l}{\text{mol-s}} \right]$.

Para entender a fondo el rol del carbonato de calcio en el proceso de hidratación del cemento, ver [69] y [83].

El modo de difusión de iones negativos en el medio poroso tal y como se describe en [76] y [77] es gobernado por las ecuaciones 2.2.14 y 2.2.16, y no se descarta el transporte por percolación de iones positivos que cambian la microestructura porosa de la pasta. Estos iones suelen neutralizarse con la abundante concentración de hidróxidos de calcio $\text{Ca}(\text{OH})_2$.

El modelo constitutivo de resistencia del concreto es planteado con respecto al comportamiento esfuerzo/deformación de la pasta en hidratación temprana en función de coeficientes de deformación instantánea (*creep*) y elasticidad controlados por el grado de humedad de la microporosidad y otras condiciones ambientales como sismicidad, presión y temperatura. De este modo las partículas mayores de agregados son representadas como cuerpos elásticos suspendidos en la pasta de cemento. Se conserva una simetría esférica de capas concéntricas superpuestas hasta que la pasta adquiere la solidificación. El volumen representativo (VR) tiene una dimensión característica de 0.1 a 0.5m. El equilibrio de la fase es garantizado para cada componente, agregados(a) y pasta(p), de acuerdo con el principio de trabajo virtual de esfuerzos y deformaciones:

$$\sigma = \sum_{a,p} \rho \sigma, \quad \varepsilon = \sum_{a,p} \rho \varepsilon, \quad (2.2.20)$$

donde el campo de deformaciones depende de la rigidez volumétrica K de cada componente:

$$\varepsilon_a = \frac{1}{K_a} \sigma_a, \quad \varepsilon_p = f(\sigma_p), \quad (2.2.21)$$

presentándose un equilibrio entre la resistencia de las fases en la medida en que la pasta se endurece dando como resultado un mismo valor último representativo del material. El efecto de agregación es visto como la integración de conglomerados recién formados sobre la matriz de conglomerados depositados en un instante anterior.

A medida que se endurece, la pasta adquiere propiedades viscoelásticas y puede ser modelada como un sistema de microamortiguadores que se desagrega una vez solidificada por completo la pasta, empezando por la parte más externa.

Sorelli y colaboradores [115], reconocen las distintas fases que conforman un concreto de altas especificaciones: en la nano-escala predominan los SCH de alta densidad y microestructura plana, sobre otros productos de hidratación como la etringita y el silicato tricálcico, de estructura acicular (forma de aguja). La micro-escala de este tipo de concretos es una interfaz de fibras de acero y la pasta hidratada que las rodea, fase que debe estudiarse en detalle pues es allí donde se presenta la transición débil que limita el desempeño del material. En su modelo para concretos UHPC¹⁰, Los autores descartan la adhesión débil de interfaces acero/cemento, confiando en la densidad del SCH, pero insisten en la recolección de datos que validen tal condición de adherencia. Cuatro niveles de escala se proponen: SCH de baja y de alta densidad (Nivel I ~ 10e-8m); Polvo de cuarzo, clinker y aire (Nivel II ~ 10e-6m); Arena de cuarzo, fibras de acreo y aire (Nivel III ~ 10e-4m) y El nivel de macro de la mezcla (Nivel IIII ~ 10e-1m). La elasticidad macroscópica del UHPC se puede hallar a partir de interacciones de localización en la microestructura, bajo los supuestos de la mecánica del medio continuo. La relación es lineal

$$\varepsilon(x) = A(x) : E, \quad (2.2.22)$$

en otros términos, las microdeformaciones ε en cualquier punto x están relacionadas con el campo de deformaciones macroscópicas E , por medio de un tensor de localización A . Si un micro-volumen representativo presenta deformaciones $\varepsilon(x)$ y esfuerzos $\sigma(x)$, los respectivos valores medios de deformaciones y esfuerzos macroscópicos E y Σ serán:

$$E = \langle \varepsilon(x) \rangle_V \quad \text{y} \quad \Sigma = \langle \sigma(x) \rangle_V = \langle C_r : \varepsilon(x) \rangle_V \quad (2.2.23)$$

donde C_r es el tensor de rigidez de cada fase.

Por su parte, cada fase es en sí misma un material compuesto. La rigidez homogeneizada C^{hom} incorpora información sobre la morfología y la fracción de volumen f , representadas por el tensor A_r de localización:

$$C^{hom} = \langle C_r : A_r \rangle_V = C_0 + \sum_{r=1}^n \langle A_r \rangle (f_r - f_0) \quad (2.2.24)$$

El modelo de elemento finito tridimensional de Richard et al. [105], es un modelo de daño que está formulado siguiendo los principios de la mecánica del medio continuo en la cual la energía elástica de deformación está asociada a diversos mecanismos de disipación como deformaciones elásticas, fluencia y ciclos histeréticos por fricción cuyo análisis determina una serie de ecuaciones de estado propias de un comportamiento reversible.

El modelo es más cuidadoso al respetar principios de evolución/conservación dentro del marco conceptual de la termodinámica de procesos irreversibles. Entre otras formas de

¹⁰del inglés *Ultra High Performance Concrete*

disipación incluye fracturas y flujo plástico los cuales, se pueden presentar consecutiva o simultáneamente en la interfaz y pueden estar relacionados con la corrosión del acero cuyos productos experimentan pérdida de adhesión química, agrietamiento por cortante y degradación. Para conectar todos estos efectos dentro de una ley constitutiva, consideraciones energéticas son tomadas en cuenta para definir correctamente el potencial de estado en términos de la energía del sistema. Como es un modelo de daño, la energía depende del grado de deterioro que es variable, p.ej., para un estado no degradado (sin fracturar), la energía libre es máxima. Con el potencial de estado termodinámico se construyen las ecuaciones de estado para cada una de las variables internas, en términos de tensores de esfuerzos, siguiendo una regla de flujo controlada por una superficie crítica (la barrera endurecida de la matriz porosa del concreto). En esta etapa del planteamiento, el modelo recurre a funciones y parámetros cuya identificación debe hacerse a través de resultados experimentales y que dependen de la constitución de los materiales: endurecimiento isotrópico del material, mecanismos de disipación y otros valores críticos de degradación se tienen en cuenta como una función de consolidación en términos de fuerza termodinámica que se opone al daño de la interfase. Por su parte, parámetros empíricos describen *a)* la repuesta mecánica de interfaces acero/concreto debida a la expansión de productos de corrosión y al un aumento de la fragilidad del acero por degradación de la sección transversal y *b)* la variación de densidad de flujo (porosidad).

El modelo de Nguyen et al.[91] estudia en una escala microscópica, la mecánica de fraguado en la pasta de concreto. Cada elemento o volumen representativo (EVR) se modela con un método de elementos finitos, simulando microgrietas de tensión. El resultado de esa simulación es tomado como un patrón de respuesta observable en la escala macroscópica. La equivalencia se logra por medio de transformaciones interescala de homogenización.

Modelos de hidratación del cemento fueron utilizados para simular la reacción principal del silicato tricálcico (C3S) con el agua, cuyo producido final son silicatos hidratados (CSH) y portlandita (CH). En términos de volúmenes de reactivos, la hidratación del cemento puede ser escrita como:



Por simplificación, las partículas de cemento son modeladas como esferas de tamaño arbitrario empaquetadas aleatoriamente y sin traslapo en un elemento cúbico de $1000\mu m^3$ de acuerdo con la función

$$wc = \frac{1-f}{\rho_c f}, \quad (2.2.26)$$

que representa la relación agua/cemento, donde f es la fracción del volumen de partículas cuyo valor es menor que cierto valor dado por una función de distribución de tamaño de grano. Las densidades del cemento y del agua que se usaron tienen los valores $\rho_c = 3,15 \frac{g}{cm^3}$ y $1.0 \frac{g}{cm^3}$, respectivamente.

Los procesos cinéticos son modelados con ecuaciones de *a)* nucleación, *b)* crecimiento y

c) difusión, en términos del tamaño inicial de cada partícula y del tiempo de hidratación. Se espera que la humedad disminuya con el tiempo t , y con las interacciones entre granos y , como consecuencia, que las constantes cinéticas n , k_1 , k_2 y k_3 difieran con el radio r de cada partícula, de modo que la reacción más lenta entre las ecuaciones 2.2.27 a, b o c sea la que gobierne la hidratación:

$$dr = -nk_1 t^{n-1} \exp^{-k_1 t^n} dt \quad (2.2.27a)$$

$$dr = -k_2 dt \quad (2.2.27b)$$

$$dr = -\frac{k_3}{r_f - r_i} dt \quad (2.2.27c)$$

Durante la reacción, los productos de la hidratación superan en volumen al silicato tricálcico. En el modelo la precipitación es aleatoria y ocurre en los poros que desocupa el reactivo. El número de partículas n completamente hidratadas (precipitadas) disminuye exponencialmente y en tiempos muy cortos:

$$n_{CH} = n_{m\acute{a}x}(1 - e^{-bt}) \quad (2.2.28)$$

Se ha reportado el valor $b=0.213$ al completar la hidratación, esto representa aproximadamente una distribución de un grano de CH por cada cinco granos de C3S.

Para realizar la discretización, el modelo parte de imágenes 2D del elemento en los planos X,Y,Z, generados para una sección de la matriz de cemento en diferentes tiempos de hidratación(28 días,8 meses,2 años,10 años). A cada material (fase) se asigna un valor o color¹¹. Los elementos básicos son triángulos equiláteros que se superponen a la imagen 2D.

Al rededor de 41000 elementos triangulares (trinodales) componen la malla superpuesta a cada imagen de muestra, lo que representa 61000 grados de libertad, aproximadamente. Este enmallado se rectifica minimizando la sumatoria de valores de energía de cada elemento (función de costo) que tiene dos componentes, un componente de forma y otro de homogeneidad sujetas a factores de peso para el color y a factores de imperfección los elementos triangulares no son equiláteros.

El modelo constitutivo es el de degradación o daño isotrópico. Introduce una variable escalar para el daño w , que es gradual: sigue una ley exponencial y afecta el tensor de módulos de elasticidad D :

$$\sigma = (1 - w)D \quad (2.2.29)$$

La porosidad se ha modelado incluyendo los poros en la microestructura de la malla por un lado, y como control, se ha modelado una estructura en la cual los poros no entran en la discretización triangular de malla. Los elementos así conformados son sometidos a tensión uniaxial simulada. En un régimen lineal elástico se confirmaron discrepancias en los valores de los Módulos de Young y de Poisson cuando se aplicaban a los dos tipos de malla (con y sin poros): la porosidad inhibe el proceso de hidratación.

¹¹La fase de agregados se ha omitido representando el concreto solamente con la fase mortero.

La homogenización del modelo es un proceso multiescala que utiliza técnicas computacionales con procesadores en paralelo. La escala macro se conforma con asumir que el sólido es homogéneo y el patrón de agrietamiento es discreto. En el nivel meso, se define un sólido heterogéneo fracturado, en equilibrio quasi-estático en el que las fuerzas internas son definidas como matrices de tensión-deformación y matrices de forma. Los parámetros del material se identifican a escala micro y dependen del proceso de endurecimiento por hidratación explicado antes. Las ecuaciones de equilibrio se resuelven para todos los parámetros pero sólo se escogen aquellos que representan desplazamientos por deformaciones no lineales a lo largo de franjas de propagación de la falla para ser relacionados con la falla macroscópica (escalamiento).

Cada elemento presenta una relación típica de homogenización de escala con la forma:

$$\text{Desplazamiento} = (\text{microparámetro} \times \text{proyección}) + \text{salto} + \text{compatibilidad} \quad (2.2.30)$$

3. EVALUACIÓN DEL ESTADO DEL ARTE

La necesidad del modelamiento multiescala se hace evidente en la caracterización de materiales en las escalas microscópica e inferiores. Combinación de técnicas no destructivas, dispositivos láser, microscopía electrónica, análisis de difracción de rayos X, ultrasonido y prácticas de indentación, ofrecen evidencia cualitativa y cuantitativa de la composición y la forma interna del concreto estructural, lo que ha llevado al refinamiento de los modelos.

La revisión incluye una clasificación temática de los modelos seleccionados (ANEXO A) e igualmente se han establecido varias categorías en las que se han clasificado los trabajos revisados. Este resultado puede ser consultado en detalle en la TABLA del ANEXO B.

A continuación se da cuenta del estado del arte en el tema de esta investigación identificando algunos problemas (teóricos y experimentales) con relación a la caracterización de la interfaz concreto/acero en el concreto estructural y al modelamiento multiescala.

3.1. Problemas fundamentales .

- Modelamiento. Este problema tiene dos fuentes de solución, la primera, experimental y se refiere al conocimiento cualitativo y cuantitativo que se ha podido obtener por la observación y por mediciones sistemáticas. En segundo lugar, tiene su base teórica en la solución de las ecuaciones fundamentales que gobiernan los procesos físicos. En estos dos sentidos, el problema del modelamiento es complementario con el de caracterización. Una de las herramientas más utilizadas en la solución de este problema es la simulación computacional. Se ha insistido en el consumo de software especializado para realizar tareas de modelamiento cuando lo que se busca es desarrollar el código de una aplicación flexible para modelamiento multiescala de materiales. Otra herramienta son los modelos reales a escala con los cuales se recrean comportamientos a nivel macro indirectamente. El trabajo de modelamiento presenta inconvenientes, a saber, un modelo es una réplica simplificada de la realidad y a pesar de ello, requiere todavía de un alto grado de abstracción.
- Caracterización. Este es un problema experimental y teórico. La parte teórica se refiere al diseño de los experimentos, mientras el carácter experimental se refleja en las técnicas y los equipos utilizados en la preparación de muestras, la observación y medición de parámetros relacionados con el comportamiento y las propiedades fisicoquímicas del material. Dada su importancia, cualquier práctica al respecto es controlada por estándares de calidad. El concreto estructural es un material susceptible de analizarse desde diversas ópticas, no solo desde la óptica del análisis estructural elástico macroscópico pues comporta procesos termodinámicos, electroquímicos y electrónicos a nivel de microestructura cuyo control es determinante en el comportamiento resistente global del material. (Ver ANEXO B)

- Síntesis. Se refiere a mejoras del material y nuevos prototipos. Es un problema experimental y tecnológico. Lo que se busca es llegar a la estructura interna, atómica o molecular de la materia y aprovechar el arreglo cristalino para introducir nuevos componente. Se realimenta con el trabajo de caracterización siempre que nuevos prototipos requieran de pruebas para evaluar su comportamiento. En esta etapa, el modelamiento molecular es de gran utilidad.

3.2. Problemas tecnológicos.

- Diseño. Todo avance tecnológico es el resultado de la búsqueda de soluciones a problemas fundamentales en diversas áreas del conocimiento. Una de las herramientas tecnológicas de uso común es el diseño. En el diseño se utiliza la teoría fundamental y los modelos validados por datos experimentales para suplir necesidades o prestar un servicio. En ciencia de materiales el diseño está a mitad de camino entre modelamiento y síntesis. Y por supuesto, un buen diseño es reflejo de un buen trabajo de caracterización. (ANEXO B)
- Aplicaciones. Parece ser que la implementación de un diseño se ha remitido a su construcción y a esperar un comportamiento de antemano previsto, a partir de condiciones extremas. En este sentido toda la industria de la construcción se nutre de lo que la tecnología puede brindar. Lo que interesa en esta etapa es la efectividad, el costo temporal de los diseños. Se supone que los intereses antes mencionados son relativos a calidad y bienestar. Por otro lado, mayor disposición es requerida para encontrar aplicaciones realistas de la tecnología del concreto estructural, que no se remitan solamente al aporte de rigidez sino a necesidades estéticas, o autosostenibles por ejemplo. Sin embargo, como se ha remarcado en varios apartes de este trabajo, el conocimiento comprehensivo del material y la investigación sistemática procurarán el horizonte aplicativo correspondiente.

La proporción y la frecuencia histórica de cada uno de los trabajos relacionados con los problemas de investigación mencionados anteriormente es mostrada en la FIGURA 3.1. Así, es claro que el trabajo de caracterización es el más abundante, seguido del trabajo de modelamiento. En cuanto al diseño, la síntesis de nuevos materiales, y otras aplicaciones se nota un estado exploratorio que se espera, se desarrolle en los próximos 10 años.

Para hacer una evaluación del estado del arte del tema de investigación es necesario determinar el grado de madurez de cada uno de los trabajos revisados. Se escogieron tres categorías que determinan el carácter del trabajo investigativo . Un trabajo *científico* busca comprender causas para poder procesar datos y explicar las observaciones. Un trabajo *experimental* sugiere observaciones y mediciones. El trabajo *tecnológico* implica desarrollo a partir del conocimiento.

Así, por ejemplo, y como se muestra en la TABLA 3-1, el presente es un trabajo científico en etapa exploratoria, mientras que el trabajo de Speziale et al. [117] es experimental en etapa avanzada.

COMPARATIVO DE PUBLICACIONES EN LA REVISIÓN

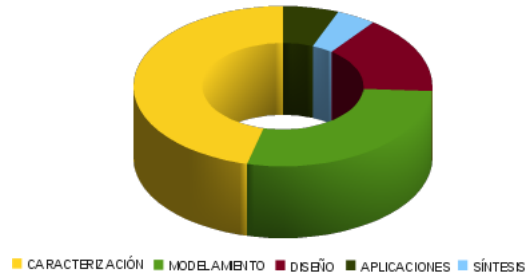


FIGURA 3.1 Comparativo de los trabajos incluidos en la presente revisión
 Caracterización 71 %, Modelamiento 43 %, Diseño 24 %, Aplicaciones 0.93 %, Síntesis 0.66 %

TIPO TRABAJO	CIENTÍF.	EXPERIM.	TECNOLÓG.
MADUREZ			
EXPLORATORIO	✓		
EN DESARROLLO			
AVANZADO			

TABLA 3-1 Matriz evaluación Estado del arte en el tema de investigación [79].

Teniendo en cuenta el ejemplo de la matriz tipo utilizada (TABLA 3-1), se evaluó el estado del arte representado en la literatura revisada. Detalles metodológicos pueden ser consultados en [79]. Como se advierte desde un principio, la revisión no es en ningún modo exhaustiva. Sin embargo se han incluido cifras descriptivas de una búsqueda general en la base de datos de ELSEVIER por medio de la web Science Direct, disponible gracias al servicio de información y los recursos electrónicos de las Bases de Datos de la Biblioteca central de la Universidad Industrial de Santander, o directamente en el portal

<http://www.sciencedirect.com/>

Se utilizó la siguiente fórmula de palabras clave :

multiscale+concrete+steel+interface+modeling

La FIGURA 3.2 muestra la frecuencia histórica del tema consultado para diferentes títulos de publicaciones con interés creciente por el tema de investigación en caracterización y modelamiento multiescala. Tanto en la revisión presente como en el histórico mostrado en la figura, publicaciones como la *Cement & Concrete Research* aportan datos determinantes para el tema de investigación tratado en este trabajo.

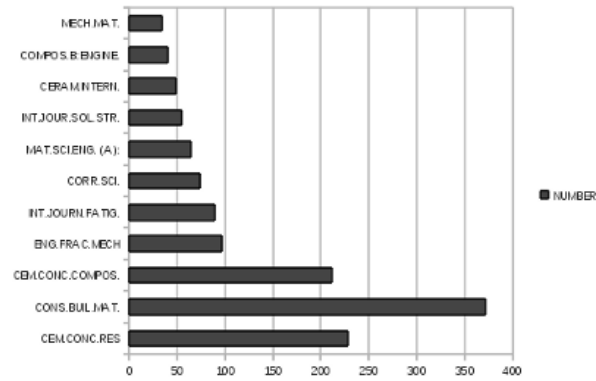


FIGURA 3.2 Publicaciones por título. Histórico hasta Feb/2014.

De acuerdo con la selección de artículos propuesta en el ANEXO B, y el tipo de problema *fundamental* o *tecnológico* identificado, el frente de investigación más activo es el correspondiente al trabajo de *Caracterización* con predominante énfasis experimental. Más de un 70 % del total de la revisión es literatura que describe procesos físicos y aporta datos cualitativos y numéricos, lo que no excluye el aporte de exposiciones teóricas deducidas de las ecuaciones fundamentales que gobiernan la dinámica del material las cuales, por involucrar esquemas abstractos también han sido incluidas en la categoría de Modelamiento aportando al 43 % de los textos revisados. Ahora bien, en cuanto al grado de madurez se tiene que gracias a la adopción extendida de metrología de precisión y herramientas estadísticas en el diseño de experimentos, el estado del trabajo de caracterización no es ciertamente avanzado pero sí muestra un desarrollo continuo y lo más cercano posible a la tecnología de punta.

Aunque en etapa de exploración a nivel académico local, el problema de modelamiento cobra interés desde el punto de vista práctico siempre que los grupos de investigación aporten nuevos datos y observaciones que permitan realizar volúmenes representativos y demás objetos teóricos con los que representar de forma más precisa la realidad física propia de escalas muy pequeñas. Mientras tanto, se puede afirmar que el problema del modelamiento teórico ha gozado de estabilidad permanente dado el aporte financiero a la investigación a nivel mundial.

En el FIGURA 3.3 puede apreciarse que el trabajo sobre modelamiento multiescala para materiales cementicios y concreto estructural supera las 50 publicaciones para final de 2013; si para febrero de 2014 se tiene un registro de *ca.* 25 artículos, se espera que al final del período el número de trabajos supere el máximo anual anterior, lo que permite determinar un desarrollo creciente en la solución del problema de modelamiento.

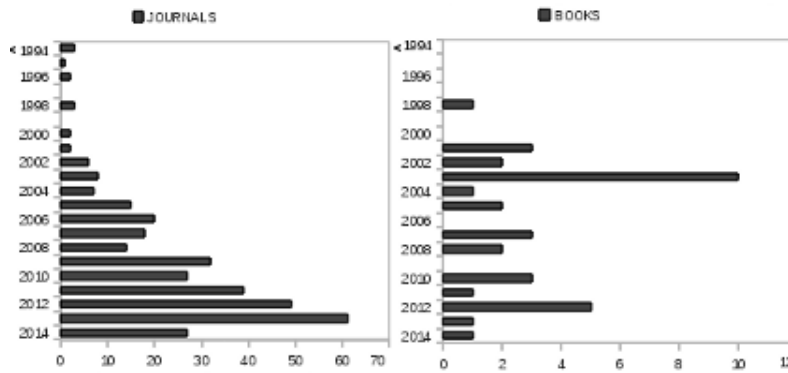


FIGURA 3.3 Frecuencia anual artículos y libros ELSEVIER a Feb/2014.

A continuación se presentan los resultados en las matrices de evaluación: Problemas fundamentales (TABLA 3-2). Problemas Tecnológicos (TABLA 3-3).

TIPO TRABAJO	CIENTÍF.	EXPERIM.	TECNOLÓG.
MADUREZ			
EXPLORATORIO	+	-	-
EN DESARROLLO	×-	×	
AVANZADO			

TABLA 3-2 Matriz de evaluación para problemas Fundamentales.
Modelamiento [+] Caracterización [×] Síntesis [-]

TIPO TRABAJO	CIENTÍF.	EXPERIM.	TECNOLÓG.
MADUREZ			
EXPLORATORIO		○	●
EN DESARROLLO	○	●	
AVANZADO			

TABLA 3-3 Matriz de evaluación para problemas Tecnológicos.
Diseño [○] Aplicaciones [●]

4. CONCLUSIÓN

La colección de referencias presentadas recoge una muestra de cerca de 130 trabajos sobre modelamiento y caracterización desde diferentes escalas de aproximación. Una revisión crítica ha permitido concluir que:

La idea fundamental del enfoque multiescala consiste en abordar la complejidad atómica y molecular de los materiales mediante técnicas numéricas, en tanto que las escalas mayores pueden ser tratadas experimentalmente y de acuerdo con las bases teóricas de la mecánica de medios continuos. Leyes de homogenización e integración interescala son requeridas siempre que se aborden modelos independientes para cada escala de análisis. El enfoque multiescala en trabajos de modelamiento es un ejercicio en desarrollo. Por su parte, el trabajo de caracterización del concreto estructural muestra un nivel avanzado en las escalas macro y microscópica, con algunos datos aportados por trabajos exploratorios en la escala nanoscópica, tendientes a modificaciones y optimización del material.

Desde el punto de vista de la ingeniería civil y de la mecánica de materiales el interés mayor se centra en el estudio del comportamiento estructural llevado hasta condiciones de falla. El fallo estructural es el resultado de eventos mecánicos, termodinámicos y químicos concatenados a través de varias escalas. Técnicas de escalamiento adecuadas e.g. Bifurcación, homogenización, etc. son necesarias para resolver este tipo de inconvenientes. Algunas de ellas fueron expuestas en la sección de Revisión de Modelos. Ver igualmente la TABLA RESUMEN del ANEXO C.

Se han identificado líneas de investigación en modelamiento multiescala que utilizan Programación Orientada a Objetos y entrenamiento de Redes Neuronales Artificiales, ambas alternativas requieren de la recopilación de datos experimentales confiables que comprendan la caracterización nanoscópica y su adecuado escalamiento para poder integrarlos con los datos macroscópicos existentes. En particular los modelos de Ngo revisados en [62] y [107], los avances en predicción de resistencia mediante RNA expuestos en [31] y [48], el modelos de propagación multifractal de fisuras [22], el modelo markoviano [41], el enfoque micromórfico [13][57] y el modelo multinivel que identifica variables microestructurales [47], expuestos en la sección 2 se recomiendan como punto de partida para trabajos futuros de modelamiento. Estos resultados son expuestos en la TABLA RESUMEN del ANEXO C, que incluye una ficha técnica, ventajas, inconvenientes y perspectivas de cada modelo revisado.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Abraham F., Gao H. How fast can cracks propagate? *Phys.Rev.Lett. Vol.84 No.14 (2000) 3113-3116*. American Institute of Steel Construction. Manual of steel construction. Load & Resistance Factor Design. 2nd.ed. 1994
- [2] Adamson A.W., Gast A.P. Physical Chemistry of Surfaces. Wiley-Interscience. 1997.
- [3] Allison P.G., Moser R.D., Weiss Jr. C.A., Malone P.G., Morefield S.W. Nanomechanical and chemical characterization of the interface between concrete, glass-ceramic bonding enamel and reinforcing steel. *Const. Build.Mat. 37 (2012) 638-644*.
- [4] Allnatt A.R., Lidiard A.B. Atomic transport in Solids. Cambridge University Press. 1993
- [5] American Concrete Institute — ACI. Building Code Requirements for Structural Concrete (ACI 318-08) and Commentary (ACI 318R-08), Farmington Hills, MI, USA. 2008.
- [6] American Society for Testing and Materials. Standard specification for Carbon structural Steel. ASTM A36/A36M-12. 1960
- [7] American Society for Testing and Materials. Standard specification for Portland Cement. ASTM C150. 1980
- [8] Armstrong R.D., Todd M. Interfacial electrochemistry. En: Solid state electrochemistry. Peter G. Bruce (ed.). Cambridge University Press. 1997.
- [9] Ashby M.F. Physical modelling of materials problems. *Mater.Sci.Tech. 8 (1992) 102-111*.
- [10] Asociación Colombiana de Ingeniería Sísmica. Reglamento colombiano de construcción sismoresistente NSR-10 Título A. Requisitos generales de diseño. 2010
- [11] Australian Technical Infrastructure Committee. ATIC-SP43. Cementitious Materials for Concrete. 2012
- [12] Baky H.A., Ebead U.A., Neale K.W. Nonlinear micromechanics-based bond-slip model for FRP/Concrete interfaces. *Eng. Struct. 39 (2012) 11-23*
- [13] Bažant P.Z. Concrete fracture models: testing and practice. *Eng.Frac.Mech.69 (2002) 165-205*
- [14] Bergmann E., Tannenberger H. Interface phenomena. En: Solid Electrolytes. General principles, characterization, materials, applications. *Hagenmuller P., van Gool W. (Eds.). Maerican Press. 1978*
- [15] Bernstein N., Broughton J.Q., Abraham F.F., Kaxiras E. Concurrent coupling of length scales: Methodology and application. *Phys.Rev. Vol.60 No.4 (1999) II. 2391-2403*
- [16] Berthet J.F., Yurtdas I., Delmas Y., Li A. Evaluation of the adhesion resistance between steel and concrete by push-out test. *Int. J. Adhesion and Adhesives Vol.31 issue 2(2011)*
- [17] Bolotin V.V. Mechanics of Fatigue. CRC Mechanical Engineering Series. Kulacki F.A.(Ed.) CRC Press. 1999

- [18] Brighenti R., Carpinteri A., Spagnoli A., Scorza D. Continuous and lattice models to describe crack paths in brittle-matrix composites with random and unidirectional fibres. *Eng.Frac.Mech.* 108 (2013) 170-182
- [19] Brune H. Growth of metal clusters at surfaces. En: Metal clusters at surfaces. Structure, quantum properties, physical chemistry. Dr. Meiwes-Broer K.-H. (Auth.). Springer. 2000
- [20] Caballero P.A., Ramírez A., Buitrago J.de J. Mejoramiento de las propiedades mecánicas del concreto mediante la adición de un material polimérico. Tesis de Grado. Facultad de Ingeniería. Universidad Industrial de Santander.1975
- [21] Campos D., Isaza J.F. Prolegómenos a los sistemas dinámicos. Universidad Nacional de Colombia. Primera ed. Bogotá. 2002
- [22] Carpinteri A., Spagnoli A., Vantadori S. A multifractal analysis of fatigue crack growth and its application to Concrete. *Eng.Frac.Mech.* 77 (2010) 974-984
- [23] Carter C.B., Norton M.G.. Ceramic Materials: Science and Engineering. Springer Science-Business Media, LLC.2007
- [24] Cazacu O. (Ed.). Multiscale Modeling of heterogeneous materials. From microstructure to macro-scale properties. ISTE-Wiley. 2008
- [25] Chambon R. Bifurcations from the microscale to the macroscale: a new paradigm for modeling and experiments. En: Borja R.I. (Ed.). *Multiscale and multiphysics processes in geomechanics. SSGG pp. 37-40. Springer-Verlag. 2011*
- [26] Chiang Y.-M., Birnie III D., Kingery W.D. Physical ceramics. Principles for ceramic science and engineering. *Wiley-MIT Series of Material Science & Engineering. 1997*
- [27] Clark C.M., Colas B., Kunz M., Speziale S., Monteiro P.J.M. Effect of pressure on crystal structure of Ettringite. *Cem.Conc. Res.* 38 (2008) 19-26
- [28] Cornell R.M., Schwertmann U. The Iron Oxides. *VHC Verlagsgesellschaft, Weinheim, Germany (1996)*
- [29] Cortés-Bruschi R. Guía de cálculo estructural. *DIACO LTDA. 1994*
- [30] Cojocar D., Karlsson A.M. Object oriented approach for modeling and simulation of crack growth in cyclical loaded structures. *Advan.Eng. Software* 39 (2008) 995-1009
- [31] Dahou Z., Sbartai Z.M., Castel A., Ghomari F. Artificial neural network model for steel-concrete bond prediction. *Engr. Str.* 31 (2009) 1724-1733
- [32] De Castro A.L., Liborio J.B.L., Pandolfelli V.C. Desempenho de concretos avançados para a construção civil, formulados a partir do método de dosagem computacional. *Cerâmica Vol.55 No. 335. São Paulo Jul/Set 2009*
- [33] Désir J.-M., Romdhane M.R.B., Ulm F. -J., Fairbairn F.M.R. Steel-Concrete Interface: revisiting constitutive and numerical modeling. *Comp.Str.* 71 (1999) 489-503
- [34] Dolado J.S., Griebel M., Hamaekers J. y Heber F. The nano-branched structure of cementitious calcium-silicate-hydrate gel. *J.Mater.Chem.* 2011, 21, 4445

- [35] Domb C. Graph Theory and embeddings. En: *Phase transitions and critical phenomena. Vol.3. Expansions for lattice models Series. Domb C., Green M.S. (Eds.) American Press. 1974*
- [36] Domínguez N., Ibrahimbegovic A. A non-linear thermodynamical model for steel-concrete bonding. *Comput.Strct. 106-107 (2012) 29-45*
- [37] Duffó G.S., Morris W., Raspini I., Saragovi C. A study of steel rebars embedded in concrete during 65 years. *Corr.Sci. 46 (2004) 2143-2157*
- [38] Erdem S., Dawson A.R., Thom N.H. Influence of the micro- and nanoscale mechanical properties of the Interfacial Transition Zone on impact behavior of Concrete made with different aggregates. *Cem.Conc.Res. 42(2012)447-458*
- [39] Essam J.W. Percolation and cluster size. En: *Domb.C, Green M.S. (Eds.).Phase Transitions and critical phenomena. Vol.2. Academic Press. 1972*
- [40] Etse G., Caggiano A., Vrech S. Multiscale failure analysis of fiber reinforced concrete based on a discrete crack model. *Int.J.Fract. (2012) 178: 131-146*
- [41] Fedelich B. A Stochastic Markovian model for fatigue short crack growth across microstructural barriers. *C.R.Acad.Sci. Paris, t.329, Série II b (2001) 741-746*
- [42] Flint M.M., Billington S.L. Implementation of multiscale models in probabilistic framework for performance-based durability engineering. En: *Multiscale and multiphysics processes in geomechanics. Wu W., Borja R.I. (Eds.) Springer. 2011*
- [43] Frink K., Kay I., Nagel M. (Eds.). Principles of Sand Control. *American Foundry Society, Inc./Cast Metals Institute, Inc. Green Sand Committee 4-M. 2008*
- [44] Garbacz A., Courard L., Kostana K. Characterization of concrete surface roughness and its relation to adhesion in repair systems. *Mater. Charact. 56(4-mai Sp. Iss. SI), (2006) 281-289*
- [45] Garboczi E.J., Bentz D.P. Analytical formulas for Interfacial Transition Zone properties. *Advn.Cem.Bas.Mat. 6 (1997)99-108*
- [46] Garzón J., Duque D.A., López C.H., Galeano J.A. Topographic characterization of corroded steel surface. *AIP Conference Proceedings 992, 840 (2008)*
- [47] Ghosh S., Lee K., Raghavan P. A multilevel computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials. *Int. J. Solids. Struct. 38 (2001) 2335-2385*
- [48] Golafshani E.M., Rahai A., Sebt M.H., Akbarpour H. Prediction of bond strength of spliced steel bars in concrete using artificial neural network and fuzzy logic. *Constr.Build.Mat. 36 (2012) 411-418*
- [49] Grangeon S., Claret F., Linnard Y., Chiaberge C. X-ray diffraction: a powerful tool to probe and understand the structure of nanocrystalline calcium silicate hydrates. *Acta Cryst. (2013). B69, 465-473*
- [50] Grassl P., Grégoire D., Rojas-Solano L., Pijaudier-Cabot G. Meso-scale modelling of the size on the fracture process zone of concrete. *Int.J.Solids and Strct. 49 (2012) 1818-1827*
- [51] Grathwohl P. Diffusion in natural porous media: contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics. Topics in environmental fluid mechanics Series. Springer Science+Business Media, LLC. 1998.

- [52] Griffith A.A. The phenomena of rupture in flow solids. *Phil.Trans.Roy.Soc.Lond. VOL.CCXXI-A587 (1921) 163-198*
- [53] Henry M., Darma I.S., Sugiyama T., Promentilla M-A. B. Application of X-Ray CT to Study Diffusivity in Cracked Concrete Through the Observation of Tracer Transport. *J.Advn.Conc.Tech. 11 (2013) 266-281*
- [54] Hewlett P.C. (ed.) *Lea's Chemistry of Cement and Concrete. 4th.ed. Elsevier, 2006*
- [55] Hidalgo A., Petit S., Domingo C., Alonso C., Andrade C. Microstructural characterization of leaching effects in cement pastes due to neutralization of their alkaline nature. Part I: Portland Cement pastes. *Cem.Conc.Res. 37 (2007) 63-70*
- [56] Horne A.T., Richardson I.G., Brydson R.M.D. Quantitative analysis of the microstructure of interfaces in steel reinforced concrete. *Cem.Conc.Res. 37 (2007) 1613-1623*
- [57] Huespe A.E., Oliver J. Mora D.F. Computational modeling of high-performance steel fiber reinforced concrete using a micromorphic approach. *Comput. Mech. DOI 10.1007/s00466-013-0873-4. Springer. 2013*
- [58] Instituto Colombiano de Normas Técnicas y Certificación (ICONTEC). Normas Técnicas colombianas NTC 121 y 321 - Ingeniería y Arquitectura. Cemento Portland Especificaciones físicas, mecánicas y químicas. 1982
- [59] Irwin G.R., Paris P.C., Tada H. *The Stress Analysis of Cracks Handbook. 3rd.ed. ASME Press(2000)*
- [60] Ke Y., Ortola S., Beaucour A.L., Dumontet H. Micro-stress analysis and identification of lightweight aggregate's failure strength by micromechanical modeling. *Mech.Materials 68 (2014) 176-192*
- [61] Kevrekidis I.G., Li J., Yip S., Nonlinear Dynamics analysis through molecular dynamics simulations. En: Attinger S., Koumoutsakos P. (Eds.). Multiscale modeling and simulation. *Lecture notes in computational science and engineering No.39*
- [62] Khalfallah S., Ouchenane M. Prediction of Bond Between Steel and Concrete by Numerical Analysis. *Op. Civ.Eng. J. (2008) 2, 1-8*
- [63] Kittel C. *Introduction to Solid state Physics. 8th ed. John Wiley & sons. 2005*
- [64] Kontoleonos F., Tsakiridis P., Marinos A., Katsiotis N., Kaloidas V., y Katsioti M. Dry-grinded ultrafine cements hydration. Physicochemical and microstructural characterization. *Mater. Research (2013). 16(2) 404-416*
- [65] Koch E., Pavarini E. Multiple scales in Solid State Physics. En: Multiscale modeling and simulation in Science. Engquist B., Lötstedt P., Runborg O. (Eds.). *Lecture notes in computational Science and Engineering Vol.66. Barth T., Griebel M. y otros (eds.) Springer. 2009*
- [66] Koumoutsakos P. y Parrinello M. (Organizers). *Multiscale Modeling and Simulation : Bridging Scales and Disciplines. CECAM. 2010*
- [67] Kovler K., Roussel N. Properties of fresh and hardened concrete. *Cem.Conc.Res. 41 (2011) 775-792*

- [68] Kwon Y.W., Allen D.H., Talreja R. (Eds.) Multiscale modeling and simulation of composite materials and structures. Springer. 2008
- [69] Landis E.N., Bolander J.E. Explicit representation of physical processes in concrete. *J. Fracture. Phys. D: Appl. Phys.* 42(2009)1-17
- [70] Lee Y.-H., Joo Y.T., Lee T., Ha D.-H. Mechanical properties of constitutive parameters in steel-concrete interface. *Eng.Structures* 33 (2011) 1277-1290
- [71] Liang L.H., Wei H., Li X.N., Wei Y.G. Size-dependent interface adhesive energy and interface strength of nanostructured systems. *Surface & coat. Tech.* 236 (2013) 525-530
- [72] Lin Y., Lin Y.-F., Hsiao Ch. Evaluation of bond quality at the interface between steel bar and concrete using the small-dimension Break-off test. *Mat. & Str.* (2010) 43:583-595
- [73] Liu J.X., Liang N.G. Algorithm for simulating fracture processes in concrete by lattice modeling. *Theor.App.Frac.Mech.* 52 (2009) 26-39
- [74] Lomboy G., Sundararajan S., Wang K. Micro- and macroscale coefficients of friction of cementitious materials. *Cem.Conc.Res.* 54 (2013) 21-28
- [75] Love C.A., Richardson I.G., Brough A.R. Composition and structure of C-S-H in white Portland cement -20 % metakaolin pastes hydrated at 25°C. *Cem.Conc.Res.* 37 (2007)109-117
- [76] Maekawa K., Ishida T., Kishi T. Multi-scale modeling of concrete performance. Integrated material and structural mechanics. Japan Concrete Institute. *J.Adv.Conc.Tech. Vol.1 No.2 (2003)* 91-126
- [77] Maekawa K., Ishida T., Kishi T. Multi-scale Modeling of Structural Concrete. Taylor&Francis. 2009
- [78] Maia L., Azenha M., Faria R., Figueiras J. Identification of the percolation threshold in cementitious pastes by monitoring the *E*-modulus evolution. *Cem.Conc.Composites* 34 (2012) 739-745
- [79] Mantilla I.D. Exploración de la Nanotecnología y perspectivas de investigación. *Tesis de Grado. Universidad Industrial de Santander.* 2005
- [80] Manzoli O.L. Predição de propagação de fissuras através de modelos constitutivos locais e técnica de construção progressiva da trajetória de descontinuidade. *Rev. int. métodos numér. cálc. diseño ing.* 2011;27(3):180-188
- [81] Marcomini R.F., de Souza D.M.P. Caracterização microestrutural de materiais cerâmicos utilizando o programa de processamento digital de imagens Image J. *Cerâmica vol.57 no.341 São Paulo jan.-mar.* 2011
- [82] Marcotte T.D., Hansson C.M. Corrosion products that form on steel within cement paste. *Mat. Struct.*(2007) 40:325-340
- [83] Matschei T., Lothenbach B. y Glasser F.P. The role of Calcium carbonate in cement hydration. *Cem.Conc.Res.* 37 (2007) 551 - 558
- [84] Mehta S.D., Nathan S.D., Selvarajan A. Holographic Interferometry Study of Chemical Bond of Concrete to Smooth Steel Rods. *ASTM.* 1978

- [85] Michel A., Slogaard A.O.S., Pease B.J., Geiker M.R., Stang H., Olesen J.F. Experimental investigation of the relation between damage and the concrete-steel interface and initiation of reinforcement corrosion in plain and fibre reinforced concrete. *Corr.Sci.* 77 (2013) 308-321
- [86] Miller M., Bobko C., Vandamme M., Ulm F.-J. Surface roughness criteria for cement paste nanoindentation. *Cem.Conc.Res.* 38 (2008) 467-476
- [87] Moore A., Taylor H.F.W. Crystal structure of Ettringite. *Nature* Vol. 218 June 15 (1968) 1048-1049
- [88] Moreno-Trigo A.P., Libardi-Liborio J.P. Doping technique in the interfacial transition zone between paste and lateritic aggregate for the production of structural concretes. *Mat.Res.* 2013A
- [89] Neal-Sturgess C.E. Direct Derivation of the Griffith-Irwin Relationship using a Crack tip Unloading Stress Wave Model. Emeritus Professor's lecture of Mechanical Engineering, The University of Birmingham, UK. 2008
- [90] Nemati K., Monteiro P.J.M. A new method to observe three-dimensional fractures in concrete using liquid metal porosimetry technique. *Cem.Conc.Res. Volume 27 No.9 (2007) 1333-1341*
- [91] Nguyen V.P., Stroeven M., Sluys L.J. Multiscale failure modeling of concrete: Micromechanical modeling, discontinuous homogenization and parallel computations. *Comput.Methods Appl.Mech.Engrg.* 201-204 (2012) 139-156
- [92] Niezgodá T. y Derewońko A. Multiscale Composite FEM Model. Mesomechanics 2009. *Proced. Eng.* 1 (2009) 209-212
- [93] Novák J., Kaczmarczyk L., Grassl P., Zeman J., Pearce C.J. A micromechanics-enhanced finite element formulation for modelling heterogeneous materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 201-204 (2012) 53-64
- [94] Olivier J., Maso J.C., Bourdette B. Interfacial Transition Zone in Concrete. *Advn.Cem.Bas.Mat.* 2 (1995) 30-38
- [95] Oiver J., Mora D.F., Huespe A.E., Weyler R. A micromorphic model for steel fiber reinforced concrete. *Int.J.Solids and Strct.* 49 (2012) 2990-3007
- [96] Omran M.G.H. Particle Swarm Optimization methods for Pattern recognition and image processing. *Doctoral Tesis. University of Pretoria.* 2004
- [97] Patrykiewicz A., Borówko M. Computer Simulations and Theory of Adsorption on Energetically and Geometrically Heterogeneous Surfaces. En: *Computation Methods in Surface and Colloid Science.* Chapter 5, pp. 245-292. Surfactant Science Series Vol. 89. Marcel Dekker, Inc. 2000
- [98] Pero-Sanz J.A. Aceros. Metalurgia física, selección y diseño. Primera ed. Cie Inversiones Editoriales Dossat. 2004
- [99] Pierce J.S. Mixing and curing water for concrete. En: *Significance of tests and properties of concrete and concrete-making materials.* STP 169D. Lamond J.F., Pielert J.H. (Eds.) ASTM International. 2006
- [100] Plé O., Bayard O. Preliminary study of multiscale analysis in fibre reinforced concrete. *Mat.Strct.* 35 (2002) 279-284

- [101] Raki L., Beaudoin J.J., Alizadeh R., Makar J., Sato T. Cement and Concrete Nanoscience and Nanotechnology. *Materials* 3 (2010) pp. 918-942
- [102] Ray S., Chandra Kishen J.M. Fatigue crack propagation model and size effect in concrete using dimensional analysis. *Mech.Mat.* 43 (2011) 75-86
- [103] Reigada R., Sagués F., Costa J.M. A Monte Carlo simulation of localized corrosion. *J.Chem.Phys.* 101 (1994) 2329-2337
- [104] Ren X., Li J. Multi-scale based fracture and damage analysis of steel fiber reinforced concrete. *Eng.Failure Analysis* 35 (2013) 253-261
- [105] Richard B., Ragueneau F., Cremona Ch., Adelaide L., Tailhan J.L. A Three dimensional steel/concrete interface model including corrosion effects. *Engrg.Fract.Mech.* 77 (2010) 951-973
- [106] Richardson I.G. Silicate Calcium Hydrates. *Cem.Conc.Res.* 38 (2008) 137-158
- [107] Roque L. S. P. and Wolnei I. S. Simão. Object oriented implementation of reinforcement and bond-slip finite element Models for nonlinear analysis of reinforced Concrete Structures. Department of Structural Engineering Federal University of Minas Gerais Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil. 2002
- [108] Roussel N. (Ed.) Understanding the Rheology of Concrete. Woodhead Publishing. 2012
- [109] Sakulich A.R., Li V.C. Nanoscale characterization of Engineered Cementitious Composites (ECC). *Cem.Conc.Res.* 41 (2011) 169-175
- [110] Satoh A., Yamada K., Ishiyama S. Simplified two-dimensional mesoscopic model for evaluating mechanical properties and crack paths near interfaces in concrete. *Eng.Frac.Mech.* 108 (2013) 222-237
- [111] Schlangen E., Garboczi E.J. Fracture simulations of concrete using lattice models: computational aspects. *Engr.Frac.Mech.* 57-2/3 (1997) 319-332
- [112] Sha W. Steels: from material science to structural engineering. Springer(2013)
- [113] Sharma A., Shishodia M.S., Reddy G.B. Numerical simulation of inhomogeneous and nonlinear diffusion. *Phys.Stat.So. (b)* 243, No. 6, 1193-1204 (2006)
- [114] Slattery J.C., Sagis L., Oh E.-S. Interfacial Transport Phenomena. 2nd. ed. Springer Science+Business Media LLC. 2007
- [115] Sorelli L., Constantinides G., Ulm F.-J., Toutlemonde F. The nano-mechanical signature of Ultra High Performance Concrete by Statistical nanoindentation techniques. *Cem.&Concr.Res.* 38 (2008) 1447-1456
- [116] Söylev T.A. François R. Effect of bar-placement conditions on steel-concrete bond. *Mat.Str.* (2006) 39: 211-220
- [117] Speziale S., Jiang F., Mao Z., Monteiro P.J.M., Wenk H-R, Duffy T., Schilling F.R. Single-crystal elastic constants of natural ettringite. *Cem. Conc. Res.* 38 (2008) 885-889
- [118] Spiegel M. Ecuaciones diferenciales aplicadas. Prentice Hall-Hispanoamericana. Traducción de H. Rivera-García. 1983

- [119] Stutzmann P. Scanning electron microscopy imaging of hydraulic cement microstructure. *Cem.&Concr.Comp.* 26 (2004) 957 - 966
- [120] Suo Z., Shih C.F. Models for Metal/Ceramic interface Fracture. En: Metal Matrix Composites. Mortensen A., Needleman S., Suresh S. Butterworth-Heinemann.1993
- [121] Suzuki S., Sinn E. Observation of Calcium silicate hydrate by the Precipitation Method. *J. Mater. Sci. Lett.* 13 (1994) 1058-1060
- [122] Tadmor E.B., Miller R.E. Modeling Materials: continuum, atomistic and multiscale techniques. Cambridge University Press. 2011
- [123] Tawie R., Lee H.K. Piezoelectric-based non-destructive monitoring of hydration of reinforced concrete as an indicator of bond development at the steel-concrete interface. *Cem.Conc.Res.* 40 (2010) 1697-1703
- [124] Tobon J.I., Restrepo O.J., Paya J. Comparative analysis of performance of Portland cement with nanosilica fume. *DYNA*, Vol.77, núm. 163 (2010)
- [125] Van Mier L.G.M. Concrete Fracture: a multiscale approach. CRC Press. 2013
- [126] Walter R., Østergaard L., Olesen J.F., Stang H. Wedge splitting test for a steel-concrete interface. *Eng.Frac.Mech.* 72 (2005) 2565-2583
- [127] Wheeler B.D. Chemical Analysis of Portland Cement by Energy Dispersive X-Ray Fluorescence *ASTM.* 1983
- [128] Widom B. Surface Tension of Fluids. En: *Domb.C, Green M.S. (Eds.). Phase Transitions and critical phenomena. Vol.2. Academic Press. 1972*
- [129] Xi Y., Jennings H.M. Shrinkage of cement paste and concrete modelled by a multiscale effective homogeneous theory. *Mater.Struct.* 30 (1997) 329-339
- [130] Yin Chan L., Andrawes B. Characterization of the uncertainties in constitutive behavior of carbon nanotube/cement composites. *Sci.Technol.Adv. Mater.* 10 (2009)
- [131] Zapata L.E. Evaluación de la velocidad de corrosión inducida por cloruros en hormigón armado con aditivo por medio de pulso galvanostático. Universidad Industrial de Santander. 2008
- [132] Zinin P.V., Manghnani M.H., Newston C., Livingston R.A. Acoustic Microscopy imaging of steel reinforcement in Concrete. *J.Nondestructive Eval.* Vol. 21, No. 4 (2002-2003)
- [133] Zhang, M., Ye G., van Bruegel K., Multiscale lattice Boltzmann-finite element modelling of chloride diffusivity in cementitious materials. Part I: Algorithms and implementation. *Mech.Res.Commun.* (2013)
- [134] Zhao Y., Yu J., Wu Y., Jin W. Critical thickness of rust layer at inner and out surface cracking of concrete cover in reinforced concrete structures. *Corr.Sci.* 59 (2012) 316-323
- [135] Zhu W., Bartos P.J.M. Application of depth-sensing microindentation testing to study of interfacial transition zone in reinforced concrete. *Cem.Conc.Res.* 30 (2000) 1299-1304

ANEXOS

ANEXO A

ÍNDICE DE MATERIAS

Acero y acero estructural

[6] [16] [29] [37] [43] [46] [48] [56] [72] [82] [84] [85]
[98] [104] [107] [112] [116] [131] [132] [134] [135]

Adherencia y/o rugosidad

[3] [12] [16] [18] [31] [36] [44] [46] [48] [56] [57] [62]
[70] [71] [72] [74] [84] [86] [107] [116] [120] [123]

Agregados

[10] [38] [41] [43] [45] [54] [56]
[60] [67] [75] [88] [99] [110] [116]

Análisis dimensional, Análisis de sensibilidad

[102]

Análisis no lineal

[4] [12] [15] [17] [18] [21] [36] [39] [40] [50] [57]
[61] [65] [70] [80] [91] [92] [113] [114] [125] [130]

Caos y geometría fractal

[21] [22] [50] [103]

Cemento

[7] [10] [11] [27] [34] [38] [45] [49] [54] [55] [56] [58]
[64] [67] [74] [75] [76] [77] [78] [82] [83] [86] [87] [88]
[91] [94] [99] [101] [106] [108] [109] [110] [117] [119]
[121] [123] [125] [127] [129] [130] [133] [135]

Concreto y concreto estructural

[5] [10] [11] [12] [13] [16] [20] [22] [32] [37] [38] [40] [41]
[44] [45] [48] [50] [53] [54] [56] [57] [60] [62] [67] [69] [72]
[73] [76] [77] [84] [85] [86] [90] [91] [92] [94] [95] [99] [100]
[104] [107] [108] [109] [110] [111] [115] [116] [119] [123]
[124] [125] [126] [129] [130] [131] [132] [133] [134] [135]

Concretos modificados

[3] [12] [16] [20] [32] [40] [54] [55] [57] [60] [67]
[84] [92] [95] [100] [104] [109] [115] [124] [130]

Corrosión y daño químico

[28] [37] [46] [76] [77] [82] [85] [103] [105] [131] [134]

Difusión

[4] [14] [22] [35] [39] [51] [54] [56] [76] [77] [78]
[82] [90] [113] [114] [118] [128] [131] [133] [134]

Dinámica de fluidos

[51] [52] [76] [77] [78] [99] [108] [113] [114] [128]

Diseño y análisis estructural

[5] [10] [17] [29] [76] [77]

Diseño de experimentos, Validación computacional y/o experimental

[3] [16] [17] [20] [22] [25] [27] [48] [56] [62] [64] [69]
[72] [74] [78] [80] [84] [85] [86] [90] [91] [92] [93] [99]
[102] [107] [110] [113] [115] [116] [123] [131]

Electroquímica interfacial

[8] [14] [19] [76] [77] [85] [97] [114] [123] [131] [134]

Fenómenos de transporte

[4] [8] [19] [35] [39] [51] [53] [55] [76] [77] [78]
[82] [113] [114] [118] [128] [133]

Física del estado sólido y Materia condensada

[1] [4] [8] [14] [15] [17] [19] [22] [25] [26] [35]
[39] [52] [63] [65] [113] [114] [121] [122] [128]

Fisicoquímica de superficies

[2] [8] [14] [20] [28] [51] [82] [97] [123] [128] [131] [134] [135]

Hidratación, C-S-H, ITZ

[27] [34] [38] [45] [49] [55] [60] [64] [67] [75] [76] [77] [83]
[87] [91] [94] [99] [101] [106] [108] [117] [121] [124] [135]

Interfaz Acero/concreto

[3] [12] [16] [31] [36] [37] [48] [56] [62] [70] [72] [82] [84] [85]
[95] [105] [107] [116] [120] [123] [126] [131] [134] [135]

Matemática aplicada

[15] [17] [20] [22] [23] [25] [27] [31] [35] [39] [41] [42] [45] [48]
[52] [65] [97] [102] [103] [113] [114] [118] [120] [122] [133]

Materiales Compuestos, modificaciones

[3] [12] [13] [16] [17] [18] [20] [23] [24] [26] [29] [32] [37] [40]
[43] [47] [52] [54] [55] [57] [60] [64] [68] [75] [81] [84] [93] [95]
[97] [98] [100] [104] [108] [109] [110] [112] [113] [114] [115]
[119] [122] [124] [125] [130] [131] [133] [134] [135]

Medición y caracterización

[3] [5] [6] [7] [10] [12] [16] [17] [18] [20] [22] [23] [26] [27] [28]
[29] [30] [32] [34] [37] [38] [43] [44] [45] [46] [48] [49] [51] [52]
[53] [54] [55] [56] [59] [64] [67] [72] [74] [75] [81] [82] [83] [84]
[85] [86] [87] [88] [90] [94] [96] [97] [98] [99] [101] [106] [108]
[109] [112] [113] [115] [116] [117] [119] [121] [123] [124] [125]
[126] [127] [130] [131] [132] [134] [135]

MEF y Entramados

[12] [13] [17] [18] [30] [33] [36] [40] [47] [50] [57]
[61] [62] [69] [73] [76] [77] [80] [85] [91] [92] [93]
[95] [104] [105] [107] [110] [111] [125] [130] [133]

Métodos computacionales, Métodos numéricos

[4] [15] [17] [18] [21] [22] [25] [27] [30] [31] [32] [33] [34]
[35] [39] [40] [41] [42] [47] [48] [50] [57] [61] [62] [73] [76]
[77] [80] [85] [91] [92] [93] [95] [96] [97] [102] [103] [104]
[110] [111] [113] [114] [130]

Micro- nano- estructura, estructura cristalina

[4] [8] [14] [18] [19] [22] [23] [25] [26] [27] [28] [30] [34] [35] [37]
[38] [39] [43] [46] [47] [49] [52] [53] [54] [55] [56] [60] [61] [64]
[70] [74] [75] [76] [77] [81] [87] [88] [90] [91] [92] [94] [95] [98]
[101] [106] [109] [113] [115] [117] [119] [120] [121] [122] [124]
[127] [128] [129] [130] [131] [132] [133] [134] [135]

Modelamiento multiescala

[9] [15] [17] [18] [24] [25] [30] [33] [40] [41] [42] [47]
[57] [61] [65] [66] [68] [73] [74] [76] [77] [91] [92] [93]
[95] [100] [104] [110] [115] [120] [122] [125] [129] [133]

Modelamiento molecular

[4] [8] [9] [15] [19] [27] [28] [34] [35] [39] [50] [54]
[61] [65] [66] [87] [106] [117] [122]

Modelamiento, teoría y simulación

[4] [9] [13] [15] [17] [19] [21] [25] [26] [30] [31] [35] [36] [39] [42]
[45] [48] [51] [52] [61] [62] [63] [65] [66] [68] [69] [71] [73] [76] [77]
[80] [85] [89] [91] [92] [93] [95] [97] [100] [102] [104] [105] [106]
[107] [110] [111] [113] [114] [115] [120] [122] [125] [128] [133]

Nanotecnología

[3] [19] [34] [71] [79] [88] [101] [109] [115] [124] [130]

Normatividad y estándares

[5] [6] [7] [10] [11] [58]

Optimización, IA, AG, PSO, OOP

[15] [25] [30] [31] [42] [48] [61] [91] [96] [107]

Procesos electroquímicos

[8] [14] [19] [28] [46] [76] [77] [82] [85] [123] [131] [134]

Procesos estocásticos

[4] [17] [18] [19] [21] [22] [31] [35] [39] [41] [42]
[48] [76] [77] [86] [97] [103] [111] [113] [115] [130]

Propiedades elásticas, Mecánica de fatiga y fractura

[12] [13] [16] [17] [18] [20] [22] [24] [29] [30] [31] [32] [33] [38]
[40] [41] [44] [45] [47] [48] [50] [52] [57] [59] [60] [62] [69] [70]
[71] [72] [73] [74] [76] [77] [78] [80] [84] [85] [86] [88] [89] [90]
[91] [92] [93] [95] [102] [104] [107] [109] [110] [111] [112] [115]
[116] [117] [120] [122] [123] [125] [126] [129] [135]

Rheología de materiales

[23] [32] [52] [54] [67] [76] [77] [99] [101] [108] [122]

Termodinámica y mecánica estadística

[15] [20] [27] [30] [35] [36] [39] [45] [51] [54] [55] [65] [76] [77]

[83] [97] [108] [113] [114] [122] [128]

PROBLEMA		ARTÍCULO	LIBRO	OTRAS PUBL.
CARACTERIZACIÓN	E	[3][16][19][20]		
	X	[27][32][34][37]		
	P	[38][43][44][46]		
	E	[49][52][53][55]		
	R	[56][64][67][70]		
	I	[71][72][74][75]		
	M	[78][81][82][83]		
	E	[84][85][86][87]	[98][108][112]	
	N	[88][90][94][99]		
	T	[106][109][115]		
A	[116][117][119]			
L	[121][123][124]			
		[126][127][130]		
		[131][132][134]		
		[135]		
	T	[8][9][14][19]	[2][4][17][23]	
	E	[35][39][45][52]	[26][28][29][51]	
	O	[59][79][82][83]	[54][63][98][108]	
	R	[94][97][99][101]	[112][114][118]	
	I	[106][113][128]	[122][125]	
	C			
	O			
	SIMULACIÓN	[1][34][46][69]		
		[96][97][103]		
		[113][117]		
	ESTÁNDARES	[99]		[5][6][7][10]
				[11][58]
MODELAMIENTO	TEORÍA	[15][25][35][39]	[21][24][68]	
		[42][52][59][65]	[77][122][125]	
		[66][69][76][89]		
		[100][102][120]		
		[128]		
	FEM	[12][13][33][36]		
		[47][57][61][80]		
		[91][92][93][95]		
		[104][105][110]		
		[133]		
	LATTICE	[18][40][50][62]		
		[73][100][107]		
		[111][129][133]		
	POO.	[22][30][31][41]		
		[48][60][96][107]		
DISEÑO	METODOLOGIA	[15][61]		
	ELEMENTOS		[29]	
SÍNTESIS	MODIFICACIÓN	[3][12][18][20]		
		[32][40][48][57]		
		[71][88][93][95]		
		[100][104][109]		
		[115][124][130]		
	PROTOTIPOS	[130][121]		
APLICACIONES	CÓDIGO	[30][107]		

ANEXO C - RESUMEN COMPARATIVO DE MODELOS

PROBLEMA	PROCESOS	MODELO	AUTOR(ES)	AÑO	DESCRIPCIÓN	VENTAJAS	DESVENTAJAS	PERSPECTIVAS
Mecánico	Fatiga y Fractura bajo cargas cíclicas sostenidas.	·Matriz compuesta fibrosa ·Matriz compuesta laminada ·Medio hereditario ·Analítico y numérico	Bolotin [17]	1983	·Propagación unidireccional de agrietamiento. ·Comportamiento elástico lineal. ·Solido viscoelástico con Fuerza/Desplazamiento controlados	·Teórico validable experimentalmente ·Predice comportamiento y vida útil	·Limitado a la escala microscópica ·Variaciones isocrónicas debidas a deformaciones hereditarias o transmitidas ·No tiene en cuenta grietas relacionadas a termoplasticidad	· Articulado por otros autores en [24] [50] ·Efectos térmicos podrían incluirse adoptando metodologías alternativas
Mecánico	Fractura-Deformación inelástica	Modelos de adhesión (Crack-bridging models)	Suo & Shih [120]	1993	·Modelo analítico de escala atómica ·Asume ligamento ductil ·Crecimiento constante de discontinuidades ·Adhesión alternada · Tiene en cuenta salto de discontinuidades	·Describe interacciones fuertes ·Predice altos valores de resistencia a la fractura ·Sinergia ·Predice alta capacidad de disipación de energía ·Modelos pueden operar simultáneamente.	·Magnitud de separación < 10e-11m ·Solo aceros policristalinos y cerámicas con inclusión metálica.	·Referencia teórica importante. Revisar [13] [17] [24] [47] [52] [59] [125]
Fisicoquímico	Electroquímico	Simulación Monte Carlo para corrosión localizada	Reigada et al. [107]	1994	·Simulación MonteCarlo basada en efecto tunel. ·Supone condiciones estables ·Frente de corrosión bidimensional analizado por a) Respuesta electroquímica. b) Morfología superficial	·Minimiza conjunto de parámetros de control. ·Utiliza conceptos básicos de Geometría fractal. · Favorece resultados con respecto a Corriente debida al proceso de corrosión. · Ofrece una buena descripción morfológica · Modelo invariante, i.e., puede ser usado en cualquier escala de estudio.	·Comportamiento multifractal · Inestabilidad abrupta en fronteras · No considera traslapo.	·Admite extensión 3D · Comparar con modelo [97]
Fisicoquímico	·Termodinámicos ·Mecánicos	Interfaz acero/concreto Adherencia-deslizamiento (bond-slip)	Désir et al. [33]	1998	· Modelo constitutivo: Considera interfaz como discontinuidad Asume isotropía y deterioro plástico continuo. · Modelo numérico: Considera desplazamientos relativos en la interfaz Asume isotropía y deterioro plástico continuo. Barra de acero en matriz de concreto sometida a esfuerzo uniaxial. Implementación MEF con 6 grados de libertad.	·Predice comportamiento macroscópico de interfaz · Tiene en cuenta comportamiento elastoplástico · Considera inestabilidad (salto) de propagación. · Admite análisis inverso utilizando Redes Neuronales en la determinación de parámetros más realistas.	· Análisis numérico micromecánico es necesario siempre que sea necesario un modelo más realista.	· Realizar pruebas teniendo en cuenta las diferentes configuraciones de interfaz · Actualizar Bases de datos con resultados de pruebas pull-out.
Mecánico	Daño microestructural	Computacional multinivel para análisis de daño en materiales porosos	Ghosh et al. [47]	2000	·Material elasto-plástico ·Crea jerarquías y subdominios con diferente resolución y escalamiento. · Utiliza la variante Celda de Voronoi (VCFEM) Para resolver el problema microescala. ·Homogenización asintótica entre nivelesde escala.	·Predice evolución de variables en escala estructural y microestructural ·VCFEM permite cambios continuos en topología de acuerdo con el progreso del daño ·Minimiza errores de discretización y modelamiento. ·Es autoadaptativo y relativamente preciso.	·Efectos adversos por establecimiento de fronteras entre elementos en iteraciones entre niveles son comunes .	· Modelar niveles uno a uno posteriormente homogeneizar

ANEXO C - RESUMEN COMPARATIVO DE MODELOS

PROBLEMA	PROCESOS	MODELO	AUTOR(ES)	AÑO	DESCRIPCIÓN	VENTAJAS	DESVENTAJAS	PERSPECTIVAS
Mecánico	Bond-slip/ Adherencia	Interfaz acero/concreto Como <i>lattices</i> planas	Roque & Volnei [107]	2002	· Modelamiento FEM y aplicación a partir de Programación Orientada a Objetos	· Simulación iterativa · Geométrica y mecánicamente sencillo.	· No se ha validado experimentalmente · Requiere generación de código fuente.	· Trabajo de referencia que abre el campo de desarrollo de software. · Analizar interfaz como interacción.
Fisicoquímico	Termodinámicos	Modelo multiescala concreto	Maekawa et al. [76][77]	2003	· Teórico. Identifica parámetros relacionados con la microestructura del material que relacionan con Macroparámetros elásticos como E y v.	· Tiene en cuenta parámetros micro y escalamiento · Modelos analíticos validables por experimentación.	· No se centra en interfaces acero/concreto · Utiliza rutinas de software privativo para análisis dinámico y modelamiento molecular.	· Se recomienda un estudio interdisciplinario en la formulación de modelos fisicoquímicos completos
Mecánico	Propagación fractura	OOP para modelamiento simulación de agrietamiento en estructuras bajo carga cíclica	Cojocarú & Karlsson [30]	2008	· Dominios continuos 2D (constitutivo del material) · Dominios de interfaz lineales (topológico) · Programación Orientada a Objetos	· Desarrollo de software · Flexible: puede usar diversos criterios de propagación de acuerdo con la base de datos	· Depende de software comercial · Incapaz de determinar valores críticos	· Es posible una programación POO de objetos sencillos e interfaces de espesor nulo.
Fisicoquímico	Hidratación	Modelo multiescala para caracterización de concreto UHPC de alto rendimiento.	Sorelli et al. [115]	2008	· Experimental y metodológico · Propone composición química del material en diferentes escalas de aproximación.	· Validación por medio de técnicas de indentación y observación SEM	· Inversión importante en equipos y personal	· Es posible aplicar otros métodos de Caracterización, e.g. Microscopía acústica e integrarlos a las bases de datos existentes para posterior análisis multiobjetivo.
Mecánico	Comportamiento elastoplástico	Modelamiento multiescala para materiales compuestos	Niezgoda & Derewońko [92]	2009	· Implementación en MEF 3D · Análisis en macroelementos generan parámetros elásticos que alimentan el modelo a escala meso y microscópica.	· Tiene en cuenta tres escalas diferentes · Análisis no lineal global 3D · Analiza estados de carga térmica en nivel micro	· Depende de caracterización de la interfaz detallada.	· Es posible abordar la programación de objetos de geometría sencilla. e interacciones fisicomecánicas básicas.
Mecánico	Adherencia de Interfaz	Modelo ANN de Interfaz	Dahou et al. [31]	2009	· Uso de Perceptrón Multicapa de Entrada · Define categorías de Entrada · Escoge adecuadamente datos salida	· Requiere tiempo obtener errores mínimos	· Requiere datos de ensayo Pull-Out con un adecuado diseño de experimentos. ·	· Conformación de bases de datos a partir de ensayos pull-out. · Programar Red mínima.
Mecánico	Deformación inelástica	Patrón multifractal de agrietamiento	Carpinteri et al. [22]	2010	· Define superficies fractales de agrietamiento · Evalúa la variación del crecimiento de fisuras contra factores de intensidad de esfuerzos. usando la ley Erdogan-Paris de propagación de agrietamiento por fatiga.	· El modelo puede aplicarse en cualquier escala aprovechando la invariabilidad de la geometría fractal	· Modelo teórico. Uso solo para interpretación. No probado en criterios de diseño.	· Revisar antecedentes y referencias · Es posible plantear modelos sencillos basados en el conjunto fractal de Koch.
Fisicoquímico Mecánico	Daño estructural	Interfaz 3D a/c + Corrosión	Richard et al. [105]	2010	· Parte mecánica: incluye daño, deformaciones inelásticas y fricción y pérdida de adherencia. · Parte termodinámica: dinámicas de hidratación y formación de porosidad y endurecimiento.	· Teóricamente riguroso · Es un modelo completo.	· Elementos de contacto no definidos · No articula un procedimiento confiable y automatizado de Identificación de parámetros de entrada.	· Medición de datos, caracterización y validación en conjunto con solución del problema de definición de interfaz

ANEXO C - RESUMEN COMPARATIVO DE MODELOS

PROBLEMA	PROCESOS	MODELO	AUTOR(ES)	AÑO	DESCRIPCIÓN	VENTAJAS	DESVENTAJAS	PERSPECTIVAS
Mecánico	Resistencia a cortante	Modelo triple multiescala no lineal para interfaces en FRPC	Baky et al. [12]	2012	· Simulación pull-out MEF (4 nodos) para encontrar resistencia a cortante en interfaces de concreto reforzado con bandas poliméricas · Modelos independientes multiescala de resistencia entre componentes	· Validable mediante experimentación · Validable por comparación resultados otros trabajos	· Numerosos muestras y ensayos · Consumo de tiempo y almacenamiento ~48h/cálculo/especímen	· Supercomputador con procesadores en paralelo
Mecánico	Zona de Proceso de Fractura	Modelo eso-escala para evaluar efecto de tamaño gran	Grassl et al. [50]	2012	· Aproximación FEM usando lattices discretos. · Parámetros basados en pruebas experimentales. · Fractura como una medida de distribución espacial Aleatoria de la energía disipada	· El enfoque probabilístico proporciona una visión realista del proceso de agrietamiento	· Algunos resultados para diferentes longitudes y profundidades no se obtienen directamente. · Algunos resultados locales no validados. · No considera la fase metálica	· Optimizado por otros autores en [57] y [95]
Mecánico	· Adherencia	Modelo micromórfico para concretos fibrosos	Oliver et al. [95]	2012	· Descripción cinemática de la fricción entre fases usando Teoría Multicampo · Uso de Teoría de Mezclas en constitución de elementos	· Tiene en cuenta las 3 fases componentes del concreto · Articula las escalas Meso y Macro desde el análisis Micromórfico	· Algunos resultados locales no validados.	· El modelo es de los más completos · Revisar metodología de aplicación
Fisicoquímico	Termodinámicos Adherencia	Adherencia de interfaz A/C	Domínguez & Ibrahimbegovic [36]	2012	· Deterioro tangencial acoplado con decohesión normal en FEM con relaciones esf./def.	· Articula procesos mecánicos de daño con procesos termodinámicos de forma explícita	· No incluye definición de la interfaz	Definir elemento de interfaz. Ver p.ej. [92] [107]
			Huespe et al. [57]	2013				Complementario de [95]
Mecánico	Adherencia de Interfaz	Modelo ANN y Lógica Fuzzy	Golafshani et al. [48]	2012	· Define categorías de Entrada y genera red inteligente que predice daño	· El modelo es Autoadaptativo	· Requiere de una vasta base de datos	· Recopilar datos en literatura o generarlos mediante experimentación · Plantear la red. Ver también [31]
Mecánico	Deformación elástica	Modelo discreto de grilla discreta en materiales fracturables	Brighenti et al. [18]	2013	· Material discretizado como un arreglo de elementos reticulados o tipo viga	· Comparaciones con modelos continuos de EF	· Solo considera régimen elástico	Revisar posible articulación con [40]

NOTA DEL AUTOR: El presente trabajo ha sido elaborado en L^AT_EX por medio de la aplicación L_YX, versión 1.6.7 (Julio 10, 2010), desarrollada por Matthias Ettrich (1995).