

Validação analítica e numérica do problema termo-químico do concreto nas primeiras idades

Flávio Mamede Pereira Gomes^{1*}

^{1*}FM FURNAS ENGENHARIA & INSTITUTO ROY CARLSON.

Corresponding author(s). E-mail(s): flaviomamede.gomes@gmail.com;

Abstract

Internal heat generation is the driving force behind the thermal phenomenon of mass concrete, capable of bringing structures to their ultimate limit state in the early stages when, under restrained conditions, thermal deformations generate internal tensile stresses that exceed the strength of the material. Adiabatic, semi-adiabatic or isothermal tests, passive or active, are proposed to obtain this important property. However, the exothermic nature of hydration reactions leads to a certain complexity and non-linearity in the treatment of test data. The influence of temperature and the degree of hydration at each moment of the reaction on the speed of hydration itself can be described by the activation energy parameter. Two formulations are possible and often found in the literature: the isothermal formulation, more common in mechanical, materials and chemical engineering, and the adiabatic formulation, more common in civil engineering where dams are the focus. The aim of this work is to show the validity and interconversion between the two formulations and an analytical-numerical verification of both.

Keywords: adiabatic, isothermal, calorimeter, activation energy, interconversion

1 Introdução

A taxa de geração interna de calor é o termo *fonte* ($\dot{Q}$) da equação diferencial governante do balanço de energia, também conhecida como equação do calor de Souza (2005), para efeitos práticos aqui apresentada com a equação constitutiva da condução de calor (*Lei de Fourier* da condução de calor) particularizada para material isotrópico:

$$\rho_e c_e \dot{T} = k \nabla^2 T + \dot{Q} \quad (1)$$

onde, ρ_e é a massa específica do material, c_e é o calor específico a pressão constante, k é a condutividade térmica e T a temperatura do material, que varia espacialmente e com o tempo.

A taxa de geração interna de calor é influenciada pela temperatura, uma vez que é originada pela reação química do cimento com a água. A reação exotérmica é termoativada (Ulm and Coussy, 1995, 1996), isto é, a velocidade da reação se processa mais rapidamente a uma temperatura mais alta, para um mesmo estágio de evolução da hidratação.

Têm-se imediatamente três conceitos-chave a serem abordados entre os conceitos, diríamos, *avançados* sobre a geração interna de calor: a) o parâmetro (alguns autores dizem propriedade) que quantifica a influência da temperatura na geração interna de calor, conhecida como *Energia de Ativação* ASTM Standard C1074 (2004); Schindler and Folliard (2005); b) o *grau de hidratação*, ou mais corretamente, o grau de avanço da geração interna de calor Ulm and Coussy (1995, 1996); e c) a maturidade ou *tempo equivalente* Freiesleben Hansen and Pedersen (1977); Carino (1984); Carino and Lew (1983).

As recomendações da Azenha et al (2021) (RILEM TC 287-CCS) registram as duas abordagens — maturidade (tempo equivalente) e grau de hidratação — de validade equivalente para a simulação termo-mecânica.

A metodologia de ensaio para obtenção da geração interna de calor também requer distinguir em três categorias: a) ensaios adiabáticos; b) ensaios isotérmicos; c) ensaios de temperatura variável (semi-adiabáticos). Enquanto os ensaios adiabáticos são mais comuns para a tecnologia de concreto massa Fairbairn et al (2007); Faria (2004), os segundos se mostram melhores para a obtenção da Atividade Térmica, bem como para análise dos produtos da hidratação em função do tipo de cimento e adições utilizadas Schindler and Folliard (2005);

ASTM Standard C1074 (2004). Já entre os ensaios semi-adiabáticos, é comum a garrafa de *Langavant de Normas Técnicas* (1990) para ensaios com cimento em argamassa. Se embasados por uma correta formulação termoquímica, podem servir de orientação preliminar da geração interna de calor em obras de qualquer porte, ou mesmo uma confirmação *in situ* da propriedade medida em laboratório [Smolana et al \(2021, 2022\)](#). As três categorias de ensaios fornecem um resultado bruto diferente, mas que analisados ou processados de acordo com a formulação termoquímica correta, conseguem fornecer a geração interna de calor intrínseca, isto é, independente do processo.

Por último, é possível distinguir entre duas formulações termoquímicas diferentes, embora parecidas: a) a formulação baseada em processo adiabático; b) a formulação baseada em processo isotérmico. A diferença é sutil. A formulação baseada em processo isotérmico utiliza uma temperatura fixa em relação à qual é calculado um fator em função da temperatura atual para corrigir a taxa de geração interna de calor em um dado estágio de evolução da hidratação [Ulm and Coussy \(1995, 1996\)](#). Na formulação baseada em processo adiabático, também é calculado um fator em função da temperatura atual para corrigir a taxa de geração interna de calor, mas com a diferença que a temperatura de referência é variável e igual à “elevação adiabática do processo” [Cervera et al \(1999, 2002\)](#). A recomendação da [Azenha et al \(2021\)](#) (RILEM TC 287-CCS) não discute a distinção sutil entre as suas temperaturas de referência (constante na primeira, variável e igual à elevação adiabática na segunda), distinção que motiva o procedimento de interconversão aqui proposto, que será melhor explicado adiante.

Cumprir observar que uma parcela considerável da produção recente sobre modelagem térmica de concreto massa em ferramentas comerciais de elementos finitos — a exemplo de [Nguyen et al \(2021\)](#); [Vieira and Coelho \(2025\)](#) — adota a curva de elevação adiabática medida em laboratório como termo-fonte $\dot{Q}$ aplicado diretamente em todos os pontos da estrutura, sem corrigir o avanço da hidratação via uma função da temperatura do tipo Arrhenius. Esta simplificação introduz desvios sistemáticos cuja magnitude depende da diferença entre a temperatura máxima da estrutura e a temperatura adiabática do ensaio, e é precisamente uma das razões pelas quais um procedimento explícito de interconversão entre formulações é necessário. As recomendações do [Azenha et al \(2021\)](#) registram que “*é um erro comum desconsiderar a ativação térmica na simulação, o que pode conduzir a imprecisões de modelagem*”.

O presente artigo pretende responder a uma lacuna específica, que é a possibilidade de adotar uma solução analítica fechada para um problema térmico típico, adotando-se uma *geração interna de calor* $\dot{Q}$ particular (válida apenas para o processo que está sendo modelado) e uniforme (a mesma para todos os pontos, independente do histórico de temperaturas de cada ponto). Para alcançar este objetivo é necessário recorrer à técnica de interconversão entre a $\dot{Q}$ de um processo na $\dot{Q}$ requerida por outro processo — procedimento raramente tratado de forma geral na literatura, embora passagens pontuais entre calor isotérmico e elevação adiabática apareçam em modelos previsores de hidratação [Schindler and Folliard \(2005\)](#) e, mais recentemente, na predição da elevação adiabática a partir de calorimetria isotérmica dependente da temperatura [Al-Hasani et al \(2022\)](#). Funções de maturidade aplicadas a concretos submetidos a cura adiabática [Soutsos and Kanavaris \(2020\)](#) reforçam a necessidade de compatibilizar históricos térmicos distintos, sem contudo oferecer um procedimento geral de interconversão da $\dot{Q}$. Um procedimento geral de interconversão é proposto, que permite interconverter entre processos adiabáticos, isotérmicos e semi-adiabáticos. A simplificação em adotar uma solução analítica encontra respaldo no dizer atribuído a Albert Einstein: *everything must be made as simple as possible, but not one bit simpler*, citado por [Smolana et al \(2022\)](#), embora aqui o sentido de *analítico* seja até mais apropriado, como se verá adiante, pois é derivado imediatamente da física do fenômeno, sendo dadas a geometria, as condições iniciais e de contorno.

A ampla e recente revisão bibliográfica do estado da arte em modelagem do fenômeno exotérmico [Klemczak et al \(2024\)](#); [Klemczak and Smolana \(2024\)](#) confirma sobre as duas formulações distintas e mostra as duas formas de expressar e resolver o problema não-linear da dependência térmica da geração de calor: a do tempo equivalente e a do grau de hidratação, baseada na afinidade química. Como nas recomendações da RILEM TC 287-CCS [Azenha et al \(2021\)](#), essas abordagens são usualmente apresentadas como escolhas paralelas, sem explicitar referências térmicas distintas (temperatura constante *versus* elevação adiabática) nem interconversão entre processos adiabático, isotérmico e semi-adiabático. Como ilustração recente em [Schmid et al \(2019\)](#), a formulação isotérmica de [Ulm and Coussy \(1995, 1996\)](#) com $E_a = E_a(\xi)$ é estendida a partir exclusivamente de calorimetria isotérmica, sem que a formulação ou interpretação adiabática equivalente seja aventada. Cada uma dessas abordagens representa uma equação diferencial que forma com a equação do balanço de energia (1) um sistema de equações não-lineares. Ambas requerem uma função da temperatura dada pela equação de Arrhenius. Ambas derivam tipicamente de calorimetria isotérmica (com temperatura de referência constante), porém raramente deixam explícito quando a formulação é adiabática, como quando se usa o modelo de afinidade química orientado à elevação adiabática em [Cervera et al \(1999, 2002\)](#).

2 Definição e harmonia entre os conceitos-chave

Os conceitos-chave a serem abordados para a descrição da geração interna de calor são: o *grau de hidratação*, o *tempo equivalente* e a *energia de ativação*.

Grau de hidratação – α . O grau de hidratação pode ser definido como a relação entre a massa de hidratos em determinado instante e a massa de hidratos ao final da reação – $\alpha(t) = m(t)/m_\infty$ –, segundo [Ulm and Coussy \(1995, 1996\)](#). Alguma outra variável é sempre adotada em substituição à massa de hidratos devido à impossibilidade prática de sua determinação experimental. É comumente adotado o grau de avanço da geração interna de calor ($\alpha(t) = Q(t)/Q_\infty$), tendo sido relatado também o grau de avanço da geração de hidróxido de cálcio ou o grau de avanço da resistência à compressão [Fairbairn et al \(2007\)](#).

Assim, a equação da energia (1) pode ser reescrita como:

$$\rho_e c_e \dot{T} = k \nabla^2 T + L \dot{\alpha} \quad (2)$$

sendo L , referido originalmente como *calor latente* por [Fairbairn et al \(2007\)](#), é propriamente o calor total acumulado gerado internamente, em J/m^3 , dado por $L = Q_\infty = C Q_\infty$, segundo [Azenha \(2009\)](#), onde C é o consumo de cimento em kg/m^3 e Q_∞ o calor total por kg de cimento gerado em ensaio de geração interna de calor, podendo ser determinado experimentalmente por quaisquer dos métodos: adiabático, semi-adiabático ou isotérmico. Porém, no caso de ensaio adiabático, medido somente em termos de elevação de temperatura, o calor total Q_∞ é simplesmente a elevação adiabática final (ΔT_∞^{adi}) multiplicada pela a massa específica e o calor específico, conforme a equação:

$$Q_\infty = (T_\infty - T_0) \rho_e c_e = \Delta T_\infty^{adi} \rho_e c_e \quad (3)$$

Tempo equivalente – t_{eq} . O tempo equivalente pode ser definido com a medida do tempo interno do material, afetado pela influência da temperatura. Inicialmente ligado à ideia de maturidade, isto é, a evolução da resistência à compressão com o tempo e com a temperatura ([De Schutter, 2004](#)), foi proposto por Nurse-Saul que esta maturidade podia ser descrita como uma função linear. Em 1954, a fórmula foi alterada por Rastrup para denotar a mesma unidade de tempo, introduzindo então o conceito de tempo equivalente.

$$M = t_{eq} = \int_0^t \frac{T(t) - T_0}{T_{ref} - T_0} dt = \int_0^t g[T(t)] dt \quad (4)$$

onde T_{ref} é uma temperatura de referência geralmente adotada como 20°C ou 25°C.

Documentado em uma revisão crítica por Malhotra (1974, *apud* [Zhang et al \(2008\)](#)), a maior fraqueza do conceito de maturidade como sinônimo de tempo equivalente era a falta de significado físico. [Freiesleben Hansen and Pedersen \(1977\)](#) acrescentaram significado físico ao conceito de tempo equivalente, descrevendo a taxa de hidratação do cimento em analogia a uma reação química como função do próprio grau de hidratação e da temperatura.

$$\frac{d\alpha}{dt} = f(\alpha) \cdot g(T) \quad (5)$$

Mais tarde, um consistente quadro teórico termodinamicamente admissível foi desenvolvido por [Ulm and Coussy \(1995, 1996\)](#) em função do grau de hidratação. O grau de hidratação, a despeito da complexidade das reações de hidratação do cimento em um meio poroso termoquimicamente reativo, pode ser pragmaticamente descrito em termos da conhecida equação de *Arrhenius*. No Brasil, a COPPE foi quem mais estudou e desenvolveu trabalhos na linha dos acoplamentos termo-químico-mecânicos, tanto experimentalmente como em modelagens computacionais ([de Carvalho \(2002\)](#); [Silvoso \(2002, 2003\)](#); [Faria \(2004\)](#); [Fairbairn et al \(2007\)](#); [Ferreira \(2008\)](#); [Fonseca \(2008\)](#)).

A harmonia entre os conceitos de grau de hidratação e tempo equivalente foi demonstrada primeiramente por [Ulm and Coussy \(1998\)](#) e, em seguida, por [Jensen and Freiesleben Hansen \(1999\)](#). Segundo [Ulm and Coussy \(1998\)](#), a derivada do grau de hidratação em relação à maturidade é diretamente proporcional à afinidade química normalizada, que é função exclusivamente do grau de hidratação. [Jensen and Freiesleben Hansen \(1999\)](#) demonstraram que, se o conceito de maturidade é aplicável a certa propriedade P, então a função da temperatura aplicável à maturidade é a mesma para o grau de hidratação. Pode ser demonstrado também que a derivada do grau de hidratação em relação ao tempo equivalente é exatamente a função $f(\alpha)$.

$$\frac{d\alpha}{dt} = f(\alpha) \cdot g(T) = \frac{d\alpha}{dt_{eq}} \cdot \frac{dt_{eq}}{dt} \quad (6)$$

Portanto,

$$f(\alpha) = \frac{d\alpha}{dt_{eq}} \quad \text{e} \quad g(T) = \frac{dt_{eq}}{dt} \quad (7)$$

Energia de Ativação – E_a . Foi logo reconhecido que a maturidade não é uma função linear da temperatura. A função mais conhecida para descrever a função da temperatura é a equação de Arrhenius:

$$g(T) = K \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = K \exp\left(-\frac{A^T}{T}\right) \quad (8)$$

sendo E_a a chamada energia de ativação e R a constante universal dos gases ideais ($8.314 \text{ J.mol}^{-1}\text{K}^{-1}$). Por definição, $A^T = E_a/R$, onde A^T é chamada de *Atividade Térmica*, dada em Kelvin, e K uma constante a ser determinada experimentalmente em conjunto com a A^T . Escolhida uma temperatura de referência para a qual $dt_{eq} = dt$ durante toda a reação, tem-se que:

$$dt_{eq}/dt = g(T) = 1 = K \exp\left(-\frac{A^T}{T_{\text{ref}}}\right) \therefore K = \exp\left(\frac{A^T}{T_{\text{ref}}}\right) \quad (9)$$

donde que:

$$g(T) = \exp\left[-A^T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\text{ref}}}\right)\right] \quad (10)$$

2.1 Consideração crítica sobre a *Energia de Ativação*

Dois pontos sobre o conceito de Energia de Ativação, amplamente citados na bibliografia (de Carvalho (2002); Fairbairn et al (2007); Azenha (2009)) permitem questionamento: 1) que a energia de ativação é relacionada à quantidade de energia necessária para se iniciar a reação química e 2) que a formulação é baseada na constante dos gases ideais.

Sobre o primeiro, segundo Fairbairn et al (2007):

“A energia é transferida através das colisões entre as moléculas. Existe um fator de frequência que traduz o número de colisões e a probabilidade de que elas possuam uma orientação favorável para que ocorra a reação, com átomos convenientemente posicionados para formar novas ligações. Com temperaturas mais altas, esse fator de frequência aumenta em função de haver um número maior de moléculas com um mínimo de energia cinética para reagir. Assim, a sensibilidade térmica de uma reação é indicada pela energia de ativação. Maiores valores de E_a indicam a necessidade de uma quantidade de energia maior para iniciar a reação, implicando assim que esta reação será mais vulnerável à influência da temperatura. Segundo Courtault e Briand e Paulini, citados por Carvalho, *o conceito de reação química ativada não é muito fácil de ser entendido dentro da química do cimento, em virtude do caráter espontâneo das reações de hidratação*. Ainda assim, esse conceito mostra-se apropriado para o entendimento da influência da temperatura na hidratação e conveniente para a determinação da maturidade das argamassas e concretos. Em função do elevado grau de complexidade das reações de hidratação do cimento, a energia de ativação é determinada a partir de uma função que relaciona a modificação de uma propriedade particular ao longo do tempo, a uma determinada temperatura. Uma dessas propriedades pode ser a liberação de calor de hidratação ou o grau de hidratação. Grande parte dos trabalhos publicados, comprovam que a E_a da hidratação do cimento portland pode ser determinada a partir das curvas relativas entre o progresso da hidratação e o calor de liberado a uma dada temperatura. Como na hidratação do cimento portland estão envolvidas diversas reações interdependentes, o valor da energia de ativação obtido por meio de métodos globais de determinação, como é o caso dos métodos que utilizam o desprendimento de calor, é chamado de energia de ativação aparente.”

Os autores citados confessam a dificuldade de se entender o conceito de *energia mínima para se iniciar a reação do cimento com a água, sendo que esta é espontânea*. Contudo, afirmam que este conceito é apropriado para o entendimento da influência da temperatura na hidratação. Partindo do fato que a reação do cimento com a água é espontânea e, portanto, incompatível com a ideia de uma energia mínima a ser inserida no sistema, pode-se entender perfeitamente a influência da temperatura na hidratação e demais propriedades que evoluem a partir dela em termos do princípio da superposição tempo-temperatura (STT), que significa basicamente transladar curvas de evolução temporal (de hidratação ou de calor ou de elevação adiabática) na escala $\ln(t)$. Convém abordar o tópico sobre o cálculo da Energia de Ativação a partir de dados experimentais somente depois de abordar os métodos de ensaios da geração interna de calor, mas desde já informamos que a metodologia adotada aqui é a do ASTM Standard C1074 (2004), modificado de acordo com Schindler and Folliard (2005); Poole et al (2007); Poole (2007); Brooks et al (2007); Pinto and Schindler (2010); Poole et al (2010, 2011); Riding et al (2012); Siddiqui and Riding (2012).

Sobre o segundo, a constante dos gases apareceu gratuitamente, advinda de outro tipo de formulação, baseada também em reação química. Na verdade, o parâmetro independente é a *Atividade Térmica*, dada por E_a/R (geralmente entre 3500 K e 6000 K), por isso entendemos desnecessário utilizar a *constante universal dos*

gases para descrever a influência da temperatura nas propriedades de líquidos e sólidos. Para todos os efeitos, entretanto, o que se segue vale tanto para a Energia de Ativação quanto para a Atividade Térmica.

2.2 Fatores influentes na Energia de Ativação - ou na Atividade Térmica

Os conceitos de maturidade e grau de hidratação foram estudados em ampla perspectiva por [De Schutter \(2004\)](#), em artigo que gerou frutuosa discussão técnica em [Zhang and Beaudoin \(2005\)](#). O primeiro demonstrou a harmonia entre os conceitos de grau de hidratação e tempo equivalente, considerando também o modo como a temperatura afeta a fluência básica do concreto, que poderia ser modelada por ambas as metodologias. Na discussão que se seguiu, [Zhang and Beaudoin \(2005\)](#) mostraram a formulação do conceito de maturidade em termos mais gerais do que o comumente adotado em termos da equação de Arrhenius, cuja variável de controle é a *Energia de Ativação*. Acrescentam a afirmação que uma mesma função de maturidade pode não ser adequada para todas as propriedades, uma vez que propriedades diferentes são afetadas diferentemente com o avanço da hidratação, mas esta afirmação vai de encontro ao que foi demonstrado antes por [Jensen and Freiesleben Hansen \(1999\)](#). Em outro estudo mais aprofundado, [Zhang et al \(2008\)](#) propõem outro modo de se calcular a energia de ativação, além do método das taxas indicado pelo [ASTM Standard C1074 \(2004\)](#). O estudo mostra a energia de ativação descrevendo a influência da temperatura em uma propriedade, mas não sendo considerada uma “propriedade” do material ou de certa dosagem, mas tão somente um parâmetro de “ajuste” (“*curve-fit*”). Concluindo então que:

- a) Diferentes propriedades podem ter diferentes E_a para um dado concreto;
- b) Diferentes concretos podem ter diferentes E_a para uma dada propriedade;
- c) Diferentes estágios de desenvolvimento de uma dada propriedade podem ter E_a ’s diferentes.

Esta linha interpretativa da energia de ativação pode ser encontrada mais recentemente em [Schmid et al \(2019\)](#), que caracterizou um cimento tipo CEM I 42.5 R por calorimetria de fluxo de calor isotérmica em três temperaturas (22,6, 31,6 e 40,6 °C) e demonstrou que nenhum valor único de E_a é capaz de fazer as curvas de afinidade $A(\xi)$ gerarem uma curva unívoca. Partes distintas da reação – o pico de silicato, o pico de depleção de sulfato e a cauda – “exigem E_a diferentes”. Os autores então propõem uma extensão da lei clássica de [Ulm and Coussy \(1995, 1996\)](#), fazendo $E_a = E_a(\xi)$, em torno de uma temperatura de referência fixa. É o que foi mostrado também em [Granja et al \(2023\)](#), em que a energia de ativação foi calculada pelo método das taxas.

Os trabalhos do grupo de pesquisa da COPPE/UFRJ sobre concreto massa e barragens [Faria \(2004\)](#); [de Carvalho \(2002\)](#); [Silvoso \(2002, 2003\)](#); [Ferreira \(2008\)](#), sintetizados em relatório de P&D não-publicado [Fairbairn et al \(2007\)](#) e os trabalhos em torno do índice de massividade [Kanavaris et al \(2021\)](#); [Azenha et al \(2021\)](#), adotam-se de fato o *método das taxas* para o cálculo da energia de ativação aparente: a partir de calorimetria adiabática ou isotérmica em várias temperaturas, comparam-se os ensaios *duas a duas*, estimando-se E_a (ou A^T) pelo coeficiente angular do ajuste linear associado à lei de Arrhenius. Procedimento análogo empregam [D’Aloia and Chanvillard \(2002\)](#) — que sublinha o caráter *aparente* de E_a e a sua possível dependência em relação ao grau de hidratação — e, mais recentemente, [Granja et al \(2023\)](#), no estudo do módulo de elasticidade nas primeiras idades.

Paralelamente à dependência em relação ao grau de hidratação ou à propriedade considerada, a literatura documenta que a E_a aparente também pode variar com a temperatura de ensaio ou de cura: [Freiesleben Hansen and Pedersen \(1977\)](#); [Benameur et al \(2000\)](#); [Xiong and van Breugel \(2001\)](#); [Pang et al \(2020, 2021\)](#). Nessa linha, os trabalhos em calorimetria isotérmica de [Benameur et al \(2000\)](#); [Broda et al \(2002\)](#) utilizam ensaio a várias temperaturas e estimativa global de E_a aparente por procedimento similar ao de $E_a(\xi)$; contudo, os autores reportam que o valor obtido pode variar com a temperatura de ensaio, limitando extrapolações para faixas térmicas muito distintas da calibrada, considerando então $E_a(T)$ distinta da formulação $E_a(\xi)$ proposta posteriormente por [Schmid et al \(2019\)](#). Em síntese, todos os trabalhos citados permitem considerar incompatível com os dados experimentais, *a priori*, a adoção de um único E_a invariante em todo o intervalo considerado.

Em particular, [Pang et al \(2021\)](#) propõem E_a constante abaixo de uma temperatura crítica e decrescente acima dela; [Pang et al \(2020\)](#) tratam cinética sob temperatura variável. Isso não invalida o uso de um único E_a como parâmetro de ajuste em faixas estreitas — como em [Schmid et al \(2019\)](#); [Granja et al \(2023\)](#) —, mas limita extrapolações fora do intervalo calibrado.

As conclusões de [Zhang et al \(2008\)](#), [Azenha \(2009\)](#), [Schmid et al \(2019\)](#) e [Granja et al \(2023\)](#), bem como de [Freiesleben Hansen and Pedersen \(1977\)](#); [Benameur et al \(2000\)](#); [Xiong and van Breugel \(2001\)](#); [Pang et al \(2020, 2021\)](#), são compatíveis com a hipótese de estarem influenciadas pelo método de cálculo da Energia de Ativação e pela escolha do modelo de ajuste dos dados.

Esta percepção — de que o método de cálculo da energia de ativação afeta o resultado — é compartilhada pelas recomendações de [Azenha et al \(2021\)](#), afirmando que diferentes abordagens de modelagem do processo de hidratação — por exemplo, os métodos de Reinhardt e Jonasson — podem exigir valores distintos da grandeza denominada *energia de ativação* para o mesmo cimento, de modo a produzir saída térmica equivalente. Em

consequência, é recomendado a calibração com ensaios isotérmicos e não-isotérmicos sempre que possível, sem oferecer, contudo, um procedimento sistemático para conciliar os resultados quando estes divergem.

De forma análoga a Schmid et al (2019), Azenha (2009) determinou a energia de ativação aparente a partir de calorimetria de condução isotérmica em várias temperaturas para pastas com cimento Portland tipo CEMI42,5,R, adotando um valor único de E_a no intervalo considerado (método das taxas, conforme D'Aloia and Chanvillard (2002)), parâmetros depois empregados em modelagem termo-mecânica do concreto nas primeiras idades Azenha et al (2011). Concordando com estes autores que a *Energia de Ativação (ou Atividade Térmica)* pode ser considerada um parâmetro de ajuste, por outro lado, se adotado outro método, como o do princípio da Superposição Tempo-Temperatura (STT), ou como reportou Granja et al (2023) utilizando o método do tempo equivalente, e a escolha de funções de ajuste por um somatório de termos de três parâmetros—pelo menos um termo para cada reação ocorrendo simultaneamente, como usado pela equipe Team 3 na COST TU1404 Jedrzejewska et al (2018), metodologia que será descrita no item 4.2 (Figura 9)—, conduziria a uma função da temperatura $g(T)$ invariante com o estágio de desenvolvimento da reação que, no caso de se utilizar a função de Arrhenius, é equivalente a considerar uma única E_a para todo o estágio de desenvolvimento de uma dada propriedade, e assim concluiria que até mesmo diferentes propriedades podem ter a mesma E_a .

Conclui experimentalmente De Schutter (2004) que para fluência básica, usando o conceito de grau de hidratação, a função de maturidade é a mesma aplicável à evolução da resistência à compressão. Este resultado foi confirmado independentemente por Gutsch (2002). Até mesmo adotando-se funções do tempo para o módulo de elasticidade e resistência à compressão conforme modelos previsores, a energia de ativação pode ser determinada de modo independente para ambas as propriedades e o valor encontrado é o mesmo. Pode ser demonstrado numericamente que a E_a da elevação adiabática é a mesma da geração interna de calor em calorímetro isotérmico. Segundo o modelo predictor mais completo de geração interna de calor em calorímetro isotérmico, cuja formulação foi inserida no software *ConcreteWorks* Schindler and Folliard (2005); Poole et al (2007); Poole (2007); Brooks et al (2007); Pinto and Schindler (2010); Poole et al (2010, 2011); Riding et al (2012); Siddiqui and Riding (2012), a energia de ativação foi obtida exclusivamente em calorímetro isotérmico e utilizada como sendo a mesma da geração interna de calor em processo não isotérmico, corroborando o que foi dito antes.

3 Metodologia de cálculo da Atividade Térmica

O método de cálculo da atividade térmica encontra-se descrito no ASTM Standard C1074 (2004). Outros autores descreveram o método de cálculo da Atividade Térmica ligeiramente diferente, tal como o método das taxas e o método das taxas modificado Fairbairn et al (2007). A revisão bibliográfica destes autores afirma que:

“Pode-se determinar E_a experimentalmente através de testes de resistência à compressão (ASTM C 1074/93), ou ainda, através de testes de calor em condições adiabáticas (D'Aloia and Chanvillard (2002)) ou isotérmicas. Estes últimos dois métodos citados são similares, diferenciando-se no modo de obter as curvas de calor gerado pela reação de hidratação no tempo com históricos de temperatura diferentes”.

3.1 Aplicação dos conceitos em processo isotérmico

Antes de descrever pormenorizadamente o cálculo da Atividade Térmica, convém mostrar o conceito de tempo equivalente e grau de hidratação de forma gráfica e a influência da Atividade Térmica em processos de temperaturas diferentes para melhor entendimento.

Da equação (4) e (10), temos que:

$$t_{eq} = \int_0^t \exp \left[-A^T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] dt \quad (11)$$

Portanto,

$$dt_{eq} = \exp \left[-A^T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] dt \quad (12)$$

Para um intervalo de tempo $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$, temos que:

$$\Delta t_{eq,i} = \Delta t_i \exp \left[-A^T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (13)$$

Por fim:

$$t_{eq,i} = \Delta t_{eq,i} + t_{eq,i-1} \quad (14)$$

É possível implementar em planilha a função do tempo equivalente em função do tempo, supondo uma atividade térmica conhecida. O resultado pode ser visualizado nas Figuras 1 e 2, nas escalas normal e logarítmica.

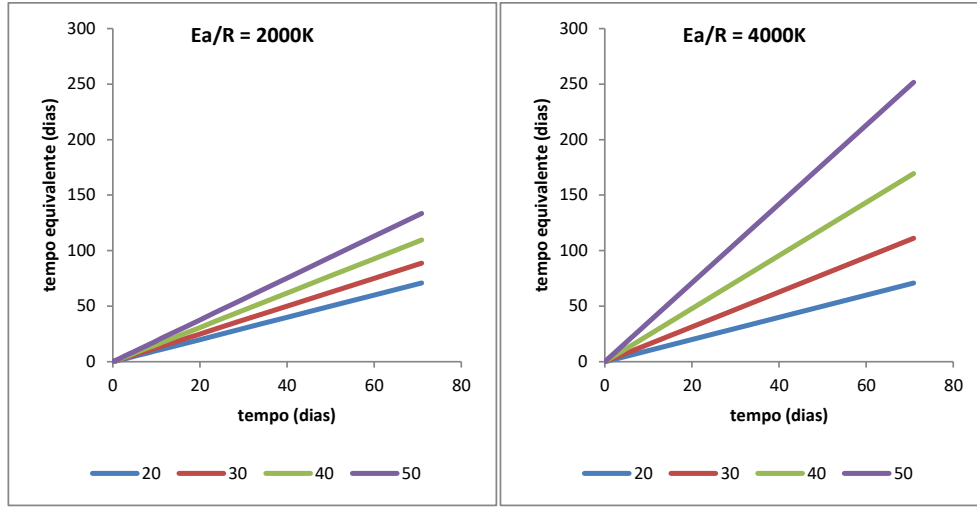


Fig. 1 Tempo equivalente *versus* tempo *versus* $T - E_a/R$ 2000K e 4000K, escala normal

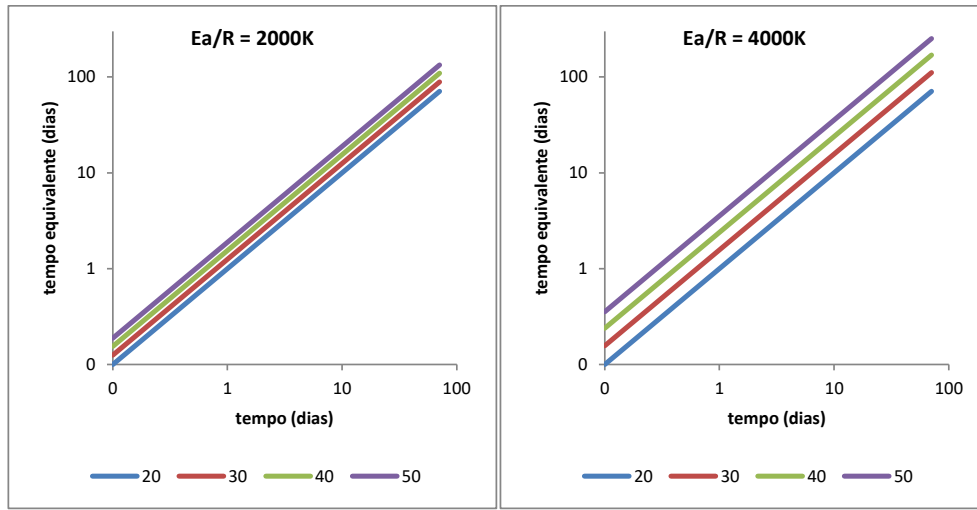


Fig. 2 Tempo equivalente *versus* tempo *versus* $T - E_a/R$ 2000K e 4000K, escala logarítmica

Tal resultado pode ser facilmente entendido a partir da equação (12), sendo que a função exponencial conhecida como *função de Arrhenius* é a derivada do tempo equivalente em relação ao tempo. Para uma dada temperatura T , a derivada dt_{eq}/dt é constante e igual ao coeficiente angular da reta $t_{eq} \times t$.

O gráfico na escala logarítmica ilustra o fato que, se a derivada $dt_{eq} \times t$ é constante, a diferença entre as curvas é uma diferença constante nessa escala. E, em todos os casos, tanto maior quanto maior a temperatura em relação à temperatura de referência.

Supondo agora uma propriedade qualquer, que é função do tempo e da temperatura devido ao desenvolvimento do processo de hidratação do cimento. Por exemplo, resistência à compressão, resistência à tração, módulo de elasticidade, e tantas outras, ou mesmo a própria geração interna de calor. Sendo assim, esta propriedade pode ser descrita pragmaticamente pelo grau de *avanço* da propriedade, ou simplesmente grau de hidratação.

A equação (5) mostra que a taxa do grau de hidratação é função do próprio grau e da temperatura. Mas a função do grau de hidratação $f(\alpha)$ é a derivada do grau de hidratação em relação ao tempo equivalente, que independe da temperatura. A rigor, independe do processo. Significa que a equação do grau de hidratação em relação ao tempo equivalente é uma função unívoca para um processo qualquer. Já a equação do grau de hidratação em função do tempo mostra exatamente a dependência da temperatura, podendo ser descrita pela função de Arrhenius, o que pode ser visto graficamente na Figura 3.

Seja, por exemplo, a seguinte equação do grau de hidratação em relação ao tempo equivalente:

$$\alpha = \frac{t_{eq}^c}{a_{T_{ref}}^c + t_{eq}^c} \quad (15)$$

com $a_{T_{ref}} = 0.8$ (dia) e $c = 2.0$. A Figura 3 mostra graficamente a equação (15).

Já em função do tempo, o grau de hidratação exibe curvas diferentes em função da temperatura, mostrando uma velocidade maior de hidratação quanto maior a temperatura do processo.

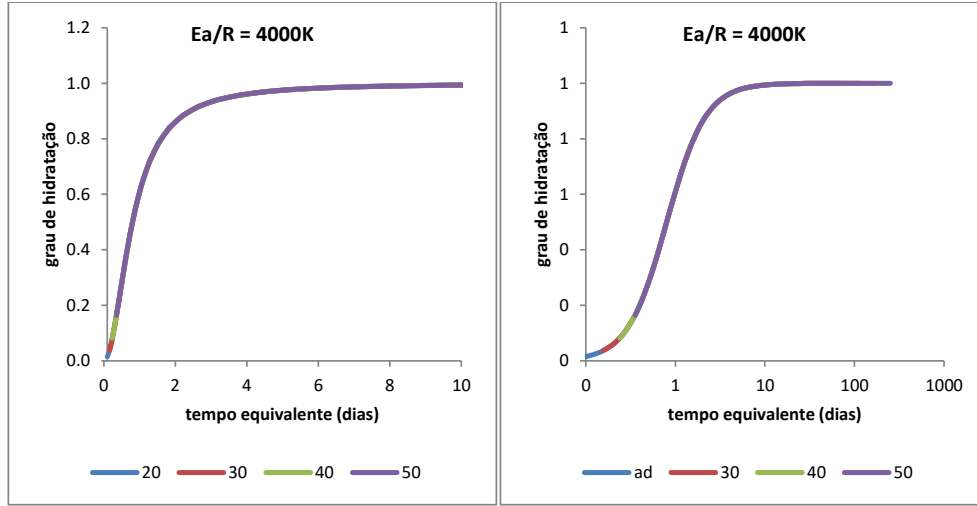


Fig. 3 Grau de hidratação *versus* tempo equivalente *versus* T - função unívoca, escalas normal e logarítmica (consertar o erro na escala vertical do 2o. gráfico)

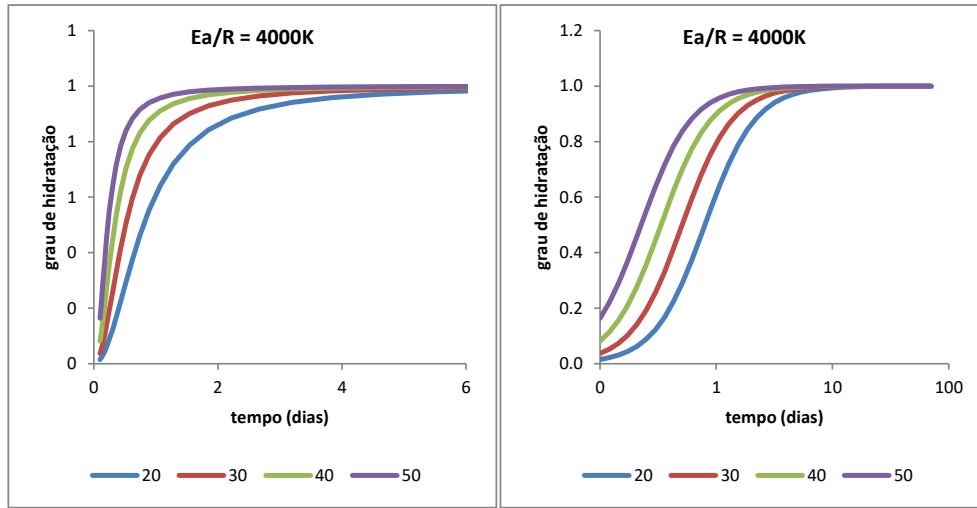


Fig. 4 Grau de hidratação *versus* tempo - dependência da temperatura, escalas normal e logarítmica

É notável que na escala logarítmica a curva do grau de hidratação se diferencie em função da temperatura simplesmente pela translação horizontal. Tal comportamento é facilmente explicado pelo fato que a função $g[T(t)]$ na equação (8), no processo isotérmico, representa um fator constante multiplicando o tempo. Fazendo na equação (15) o tempo equivalente igual a $g[T(t)] \cdot t$. Dividindo-se ambos os membros pela mesma $g[T(t)]$, tem-se a seguinte equação decorrente de (15):

$$\alpha = \frac{t^c}{\left[\frac{a(T_{ref})}{g(T)} \right]^c + t^c} = \frac{t^c}{[a(T)]^c + t^c} \quad (16)$$

Assim, quanto maior a temperatura, maior o fator g e menor o parâmetro $a(T_{ref})/g(T) = a(T)$ que está ligado ao tempo que ocorre o ponto de inflexão da função $\alpha(t)$, conforme pode ser visto no gráfico da Figura 3. Para um processo de temperatura constante igual a 50°C, a velocidade da evolução do grau de hidratação é maior, o que pode ser visto pela translação da curva à esquerda das demais.

3.2 Aplicação dos conceitos em processo de temperatura variável – elevação adiabática

Se porventura o processo não for de temperatura constante, e sim de temperatura variável, por exemplo, como ocorre nos ensaios de elevação adiabática de temperatura, pode-se observar o que ocorre com o tempo equivalente e o grau de hidratação neste tipo de processo. É evidente que o processo vai se desenvolver mais rapidamente que o processo isotérmico na temperatura de referência, mas não tão rápido quanto um processo na temperatura constante igual à temperatura máxima de 50°C.

Observa-se também que o grau de hidratação em função do tempo equivalente continua sendo uma curva unívoca. A propósito, é justamente isto que o tempo equivalente traduz: *a equação temporal intrínseca da propriedade, independente da temperatura do processo, seja esta temperatura constante ou variável.*

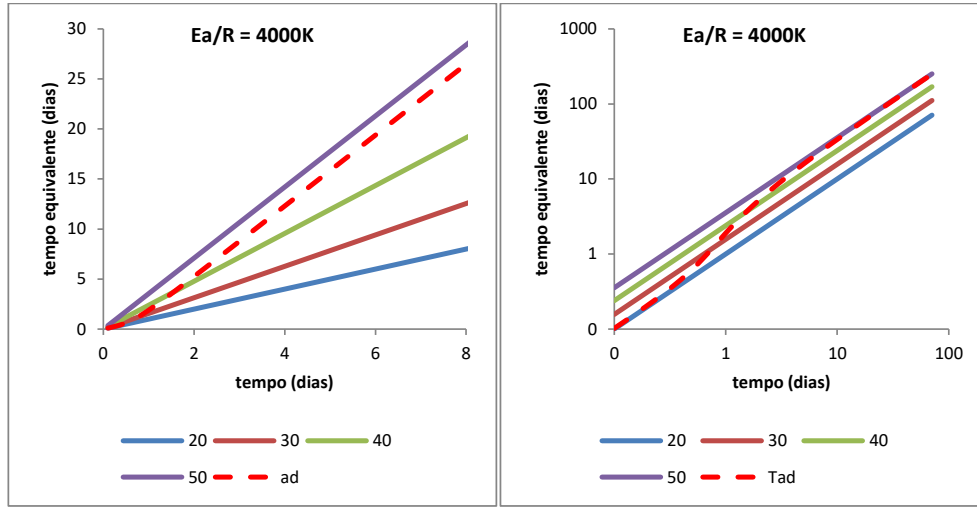


Fig. 5 Tempo equivalente de processo isotérmico e adiabático *versus* tempo, escalas normal e logarítmica

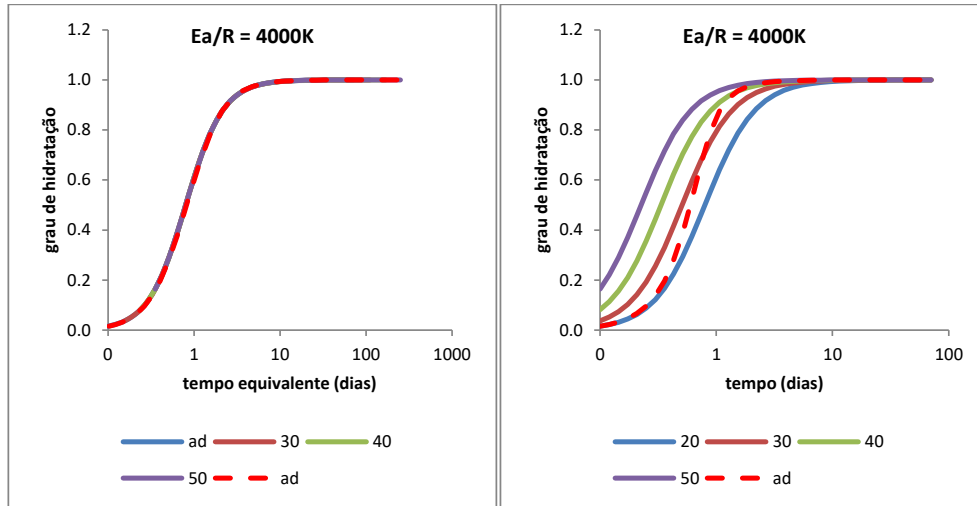


Fig. 6 Grau de hidratação de processo isotérmico e adiabático *versus* tempo equivalente e tempo - escalas normal e logarítmica

3.3 Afinidade Química Normalizada e Não-Normalizada

Além dos gráficos já mencionados, convém analisar os gráficos da taxa do grau de hidratação, que é sua derivada em relação ao tempo. A equação (6) descreve genericamente a equação diferencial do grau de hidratação em função de $d\alpha/dt_{eq}$ e em função de dt_{eq}/dt , que é a própria $g[T(t)]$, adotada como sendo a função de Arrhenius. Se a equação do grau de hidratação em relação ao tempo equivalente (por exemplo, a equação (15)) é uma função unívoca, intrínseca, válida para um processo de temperatura constante ou variável, sua derivada também o é. Esta derivada pode ser chamada de Afinidade Química Não-Normalizada, para fazer referência ao nome adotado por diversos autores [Freiesleben Hansen and Pedersen \(1977\)](#); [Benameur et al \(2000\)](#); [Xiong and van Breugel \(2001\)](#) para as parcelas da equação (5).

$$\frac{d\alpha}{dt} = f(\alpha) \cdot g[T(t)] = \frac{d\alpha}{dt_{eq}} \frac{dt_{eq}}{dt} = \bar{f}(\alpha) \times \bar{g}[T(t)] = \tilde{A}(\alpha) \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (17)$$

Segundo [Fairbairn et al \(2007\)](#) (p.13 e 27),

“na equação acima a evolução da reação é função da afinidade química normalizada $\tilde{A}(\alpha)$, que é uma função intrínseca do material, independente da temperatura, mas dependente do estado atual de hidratação. A função $\tilde{A}(\alpha)$ representa a cinética da reação de hidratação e é fundamental para a

modelagem na determinação dos efeitos da reação, como deformações, resistência e geração de calor, como será visto mais adiante no presente Relatório. A afinidade química normalizada é um parâmetro que engloba os efeitos físicos correspondentes ao aumento da massa de hidratos, difusão, viscosidade e à afinidade química propriamente dita. A afinidade normalizada é também a propriedade do concreto que independe da temperatura, sendo o termo da equação (17) responsável pela termo-ativação a exponencial de E_a/RT . Neste modelo, a energia de ativação aparente (E_a) é considerada constante ao longo do tempo. Assim, se for possível conhecer uma curva $\tilde{A}(\alpha) - \alpha$, será possível resolver a equação (2) desde que, para cada passo de tempo calculem-se, além das temperaturas T , os graus de hidratação α . O que é desejável, já que para a solução do problema mecânico (ou termomecânico) os parâmetros característicos de diversos fenômenos, como evolução da resistência, módulo de elasticidade, retração autógena e fluência serão correlacionados ao grau de hidratação. Os valores de $\tilde{A}(\alpha)$, que são uma medida intrínseca da cinética da reação, podem ser obtidos experimentalmente, seja através de ensaios adiabáticos, seja através de ensaios de compressão uniaxial realizados em diversas idades, como será mostrado em detalhe no item que se segue”.

Da equação (17), pode-se constatar que a $f(\alpha)$, chamada aqui de Afinidade Química Não-Normalizada, guarda a seguinte relação com a $\tilde{A}(\alpha)$:

$$\tilde{A}(\alpha) = \bar{f}(\alpha) = f(\alpha) \exp(E_a/RT_{\text{ref}}) \quad (18)$$

Na formulação mostrada em Azenha (2009), a equação diferencial do grau de hidratação também derivada de (6), leva a uma função do grau de hidratação ligeiramente diferente, uma vez que é a $f(\alpha)$ dividida pela taxa do grau máxima ($\dot{Q}_{\text{pico}}$).

Em todos os casos, se requer construir uma curva da taxa do grau de hidratação em função do próprio grau de hidratação, que torna possível a solução da equação diferencial do grau de hidratação e em seguida a do calor.

3.4 Descrição das formas de equações diferenciais do grau de hidratação

De acordo com o exposto, pode-se determinar facilmente a $\tilde{A}(\alpha)$ ou a $f(\alpha)$, pois elas estão diretamente relacionadas com a equação do grau de hidratação em função do tempo equivalente. Tomando-se como exemplo a equação (16), é possível determinar a $f(\alpha)$, partindo-se da sua derivada em relação ao tempo.

$$\dot{\alpha} = [a(T)]^c \cdot c \cdot \frac{t^{c-1}}{([a(T)]^c + t^c)^2} \quad (19)$$

Isolando o t na (16) e substituindo na (19), tem-se:

$$\dot{\alpha} = \frac{c}{a(T)} \cdot \alpha^{c-\frac{1}{c}} \cdot (1 - \alpha)^{c+\frac{1}{c}} \quad (20)$$

Como $a(T) = a_{T_{\text{ref}}}/g(T)$, tem-se que:

$$\dot{\alpha} = \frac{c}{a(T_{\text{ref}})} \cdot \alpha^{c-\frac{1}{c}} \cdot (1 - \alpha)^{c+\frac{1}{c}} \cdot g(T) \quad (21)$$

Comparando (21) com (5), segue que:

$$f(\alpha) = \frac{c}{a(T_{\text{ref}})} \cdot \alpha^{c-\frac{1}{c}} \cdot (1 - \alpha)^{c+\frac{1}{c}} \quad (22)$$

Ou ainda, a Afinidade Química Normalizada:

$$\tilde{A}(\alpha) = \frac{c}{a(T_{\text{ref}})} \cdot \alpha^{c-\frac{1}{c}} \cdot (1 - \alpha)^{c+\frac{1}{c}} \exp\left(\frac{E_a}{RT_{\text{ref}}}\right) \quad (23)$$

A equação (20) convém ser mostrada graficamente, bem como a taxa em função da temperatura e do tempo.

A equação (23) foi utilizada por Lackner e Mang Lackner and Mang (2004) na seguinte forma, um pouco mais genérica:

$$\tilde{A}(\alpha) = k_1 \cdot \alpha^{k_2} \cdot (1 - \alpha)^{k_3} \quad (24)$$

Outros dois modelos importantes pela ampla utilização e suas respectivas equações diferenciais do grau de hidratação podem ser vistos na Tabela 1.

4 Interconversão adiabático-isotérmico

Uma vez apresentado o quadro teórico dos conceitos-chave envolvidos, a interconversão *isotérmico-adiabática* é aqui descrita e será posteriormente objeto de *verificação* no item 4.4, por modelagem numérica por elementos finitos como método de solução, como é feito em diversos trabalhos (Mardmomen and Chen, 2023). No entanto, parece conveniente antes ilustrar a consequência dos conceitos apresentados sobre geração interna de calor expostos anteriormente.

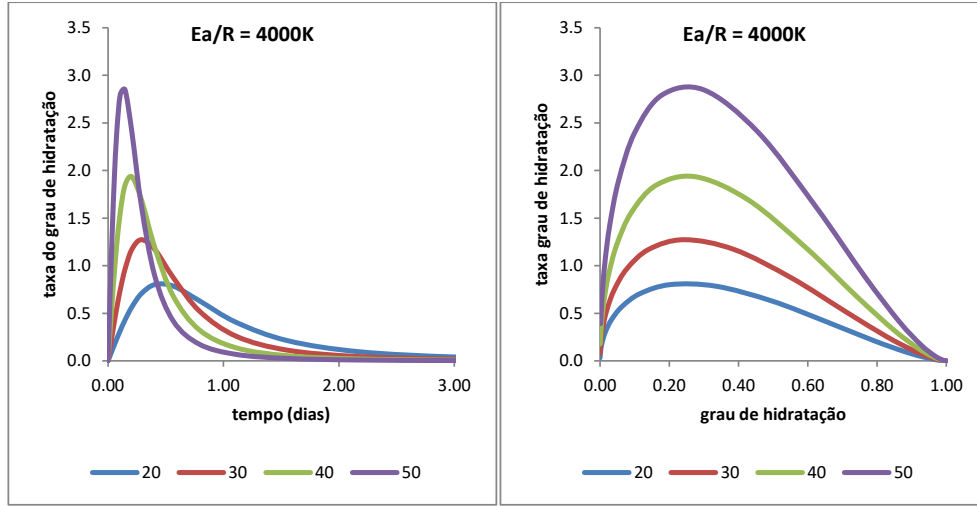


Fig. 7 Taxa do grau de hidratação de processo isotérmico *versus* tempo e *versus* grau em diversas temperaturas

Table 1 Modelos de funções do tempo e respectivas equações diferenciais

Modelo	Função do tempo e eq. diferencial	Referências
Avrami-Erofeev	$\alpha = 1 - \exp \left[- (k_{(T)} \cdot t)^n \right]$ $\dot{\alpha} = k_{(T)} \cdot n \cdot (1 - \alpha) \cdot [-\ln(1 - \alpha)]^{1-\frac{1}{n}}$	D'Aloia and Chanvillard (2002); Bishnoi and Scrivener (2009)
ConcreteWorks	$\alpha = \exp \left[- (k_{(T)}/t)^n \right]$ $\dot{\alpha} = \frac{n}{k_{(T)}} \cdot \alpha \cdot [-\ln(\alpha)]^{1+1/n}$	Schindler and Folliard (2005); Poole (2007)

4.1 Determinação da geração interna de calor isotérmica

O objetivo deste tópico é partir de uma curva de elevação adiabática originada de um ensaio e determinar a geração interna de calor isotérmica.

4.1.1 Formulação isotérmica

Seja a seguinte formulação isotérmica¹:

$$\rho_e c_e \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + C \cdot \dot{Q}(t, T) \quad (25)$$

O resultado de $C \cdot \dot{Q}(t, T)$ é dado em W/m^3 . Como $Q(t, T)$, que é *função do tempo e da temperatura*, advém diretamente do ensaio com pasta de cimento, pode-se dizer que é invariante, isto é, independe das propriedades térmicas ρ_e , c_e e k dos agregados inseridos no concreto.

$$\frac{dQ}{dt} = f(t) \cdot g(T) = \frac{dQ}{dt_{eq}} \frac{dt_{eq}}{dt} = \frac{dQ}{dt_{eq}} \exp \left[- \frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (26)$$

Pelo próprio conceito de tempo equivalente, para uma temperatura igual a temperatura de referência, o tempo equivalente é idêntico ao tempo corrente. Portanto, a equação de Q em função do tempo equivalente é simplesmente a função de Q com o tempo na temperatura de referência.

Hipótese de trabalho 1: a *Energia de Ativação* independe do processo.

A energia de Ativação (ou a Atividade Térmica) independente do processo é uma *Proposição* validada tecnicamente. Por deferência aos autores que consideram a Energia de Ativação como sendo também função da temperatura e do grau de hidratação (supra citados no item 3.3), para efeito desta exposição trata-se de uma *Hipótese de trabalho*. Considerar a Energia de Ativação como função da temperatura ou do grau de hidratação, parece ser decorrência do modo de se calcular, a cada instante do processo, o fator exponencial dado pela função de Arrhenius, como se a E_a pudesse explicar as diferenças entre a resposta do modelo de hidratação e os dados experimentais das diversas reações ocorrendo simultaneamente no processo de hidratação complexo real. Não é o caso da hipótese de trabalho aqui adotada. A energia de Ativação pode ser convenientemente considerada constante, não variando nem com o grau de hidratação, tampouco com a temperatura (nem mesmo com a propriedade, podendo ser extrapolada para a resistência à compressão, módulo de elasticidade, fluência, etc.). Sendo assim, é independente da temperatura do processo. Por conseguinte, é a mesma para a geração interna de calor obtida por ensaio adiabático ou isotérmico.

¹ *Formulação isotérmica*, não *processo isotérmico*. O processo é de temperatura variável, conforme a eq. diferencial transiente delimitada por condições iniciais e de contorno quaisquer. Relembrando: a formulação é isotérmica quando a temperatura de referência da função $g(T)$ é constante.

4.1.2 Formulação adiabática

A geração interna de calor de um processo adiabático (ensaio de elevação adiabática) inicia-se a uma temperatura inicial T_0^{adi} . A geração interna de calor de um processo isotérmico tem como temperatura de referência uma temperatura constante qualquer, em geral 20°C ou 25°C. Seja um processo adiabático cuja temperatura inicial é igual à temperatura de referência de um processo isotérmico, digamos $T_0^{adi} = 25^\circ\text{C}$. As curvas de geração interna de calor em termos de temperatura ($Q/\rho_e c_e$), adiabática e isotérmica, têm evolução temporal diferentes devido à termoativação. Seja a seguinte equação da evolução temporal de elevação adiabática dada por uma função *Hill* (Faria, 2004), com a temperatura inicial sendo a temperatura de referência ($T_{0,\text{ref}}^{adi} = 25^\circ\text{C}$):

$$T^{adi}(t) = T_0^{adi} + \Delta T^{adi}(t) = T_0^{adi} + \Delta T_\infty^{adi} \frac{t^c}{a^c + t^c} = 25 + 30 \frac{t^2}{12^2 + t^2} \quad (27)$$

onde t é dado em horas e a elevação adiabática – ΔT_∞^{adi} – é 30°C.

Considerando uma Atividade Térmica (E_a/R ou A^T) igual a 4000K, é possível demonstrar que a elevação adiabática começando em temperaturas diferentes da $T_{0,\text{ref}}^{adi} = 25^\circ\text{C}$ teria por curvas as seguintes equações mostradas na Tabela 2:

Table 2 Funções temporais da elevação adiabática em diversas temperaturas iniciais

T_0	Elevação adiabática em função do tempo	T_{final}
$T_{\text{inicial}} = 35^\circ\text{C}$	$30 \cdot \frac{t^2}{7.76^2 + t^2}$	65°C
$T_{\text{inicial}} = 45^\circ\text{C}$	$30 \cdot \frac{t^2}{5.16^2 + t^2}$	75°C
$T_{\text{inicial}} = 55^\circ\text{C}$	$30 \cdot \frac{t^2}{3.52^2 + t^2}$	85°C

A Figura 8 mostra as quatro curvas — a de referência da eq. (27) e as três da Tabela 2 — e, na mesma linha, $a(T_{\text{ref}})/a(T)$ versus $1/T$ (em kelvin). Nesta representação a curva passa por 1 em $1/T_{\text{ref}}$ e o ajuste exponencial tem por coeficiente a atividade térmica E_a/R .

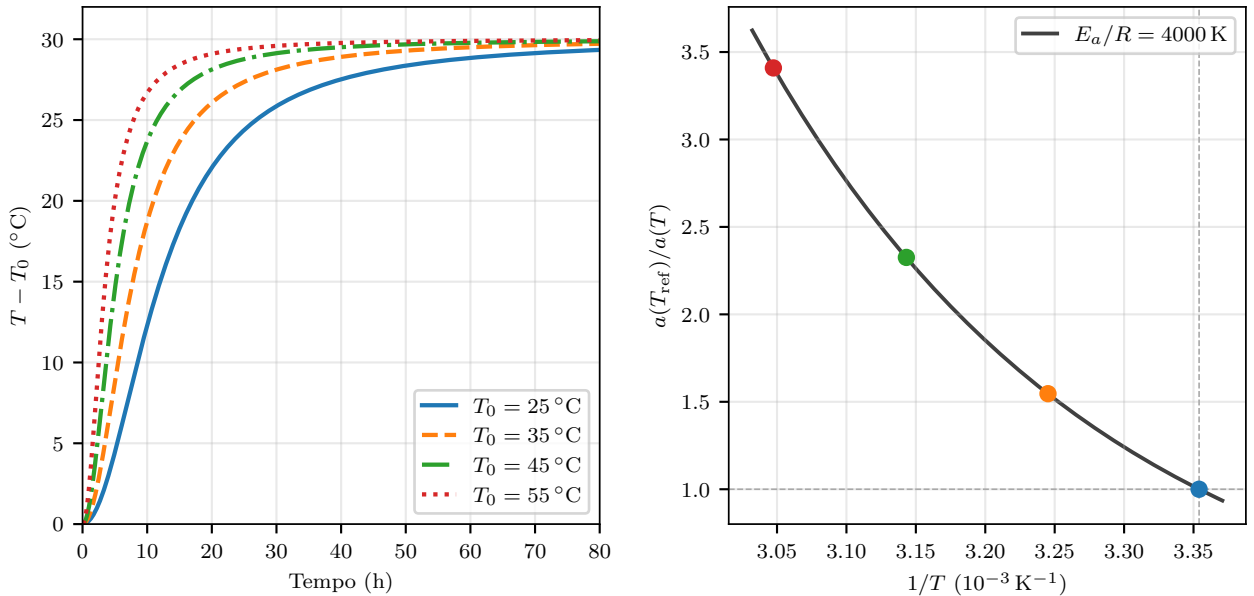


Fig. 8 À esquerda, $\Delta T^{adi}(t) = T(t) - T_0$ para $T_0 = 25, 35, 45$ e 55°C (Hill com a da Tabela 2 e $a_{25} = 12 \text{ h}$). À direita, $a(T_{\text{ref}})/a(T)$ versus $1/T$; o ajuste $a(T_{\text{ref}})/a(T) = \exp[-(E_a/R)(1/T - 1/T_{\text{ref}})]$ vale 1 em $T = T_{\text{ref}}$.

Da mesma maneira que para qualquer função do tempo e da temperatura, a $\Delta T^{adi}(t, T)$ (Tabela 2) pode ser colocada como uma função unívoca do tempo equivalente – $\Delta T^{adi}(t_{eq})$ – que, por definição, é igual à função $\Delta T^{adi}(t)$ na temperatura de referência (temperatura inicial 25°C), isto é $\Delta T^{adi}(t_{eq}) = \Delta T_{\text{ref}, 25^\circ\text{C}}^{adi}(t)$.

$$\Delta T^{\text{adi}}(t_{eq}) = \Delta T_{\infty}^{\text{adi}} \frac{t_{eq}^c}{(a)^c + t_{eq}^c} = \Delta T_{\infty}^{\text{adi}} \frac{t^c}{(a_{25^\circ\text{C}})^c + t^c} \quad (28)$$

ou ainda, segundo o exemplo da Tabela 2,

$$\Delta T^{\text{adi}}(t_{eq}) = 30 \frac{t_{eq}^2}{12^2 + t_{eq}^2} \quad (29)$$

É possível reescrever a equação (25) para a formulação adiabática da seguinte maneira:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = h^2 \nabla^2 T + \frac{\partial T^{\text{adi}}}{\partial t} \quad (30)$$

sendo que $h^2 = k/\rho_e c_e$ é a difusividade térmica e T^{adi} é a “elevação adiabática”.

Da mesma maneira que na formulação isotérmica, temos:

$$\frac{dT^{\text{adi}}}{dt} = \frac{dT^{\text{adi}}}{dt_{eq}} \frac{dt_{eq}}{dt} \quad (31)$$

onde dT^{adi}/dt_{eq} é facilmente determinável a partir de (29) e dt_{eq}/dt pode ser descrito como:

$$dt_{eq}/dt = \exp \left[-A^T \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\text{ref}}^{\text{adi}}} \right) \right] \quad (32)$$

Somente pelo detalhe de $T_{\text{ref}}^{\text{adi}}$ a formulação adiabática difere da formulação isotérmica. A divisão por $\rho_e c_e$ na (30) não é essencial nem necessária, podendo ser feita também para a formulação isotérmica. Resta entender o que é $T_{\text{ref}}^{\text{adi}}$. É a “elevação adiabática” do processo. Se o processo for adiabático, é a própria elevação adiabática. Se o processo for não-adiabático é a geração interna de calor expressa em termos de temperatura (dividindo-se por $\rho_e c_e$), lembrando que dentro da função exponencial as temperaturas devem ser inseridas em Kelvin.

$$T_{\text{ref}}^{\text{adi}} = T_{0,\text{ref}}^{\text{adi}} + \Delta T^{\text{adi}}(t_{eq}) = 25 + 30 \frac{t_{eq}^2}{12^2 + t_{eq}^2} \quad (33)$$

Uma vez que esta formulação termoquímica pretende conseguir modelar qualquer processo (de temperatura variável), parece equívoco chamar $\Delta T^{\text{adi}}(t_{eq})$ de “elevação adiabática” de um processo de temperatura variável não-adiabático. Para facilitar a desambiguação, seria vantajoso substituir a notação T^{adi} por T^Q .

$$\frac{\partial T}{\partial t} = h^2 \nabla^2 T + \frac{\partial T^Q}{\partial t} \quad (34)$$

O entendimento da formulação adiabática da maneira exposta, como sendo a “elevação adiabática” do processo $-T_{0,\text{ref}}^{\text{adi}} + Q / (C \cdot \rho_e c_e) -$, e não simplesmente uma curva de elevação adiabática em função do tempo, foi deduzido e apresentado em Gomes (2011), a partir da discretização numérica apresentada nos trabalhos de Van Breugel (1991) e Azenha (2004). Posteriormente, o mesmo resultado foi encontrado em Cervera et al (1999).

4.2 Resumo e roteiro de cálculo da interconversão Adi-Iso

Proposição 1. *Existe, para uma dada função temporal de elevação adiabática na temperatura de referência e uma dada Energia de Ativação, uma função temporal de Q para a formulação isotérmica capaz de modelar qualquer processo ou problema de valores de contorno.*

Seja Q a função temporal que se deseja encontrar, cujo valor final (assíntota horizontal) seja Q_{∞} .

$$Q = Q_{\infty} f(t_{eq}) \quad (35)$$

A demonstração da *Proposição* consiste em encontrar: 1) Q_{∞} e 2) $f(t_{eq})$.

1) Considere-se a equação (25), que rege o balanço de energia segundo a formulação isotérmica, sobre um domínio em condições de isolamento perfeito com o ambiente (sem troca de calor, situação adiabática). O termo $k \nabla^2 T$ é nulo, uma vez que sem troca de calor com o meio, todos os pontos tem uma elevação uniforme de temperatura (variação temporal sem variação espacial, portanto, sem gradiente de temperatura, $\nabla T = 0$).

Não havendo troca com o meio externo, todo o calor gerado é armazenado em forma de variação de temperatura. Sendo assim, a solução do problema na situação adiabática é uma curva de evolução de temperatura cujo valor final é T_{final} , a partir da qual é possível conhecer Q_{∞} :

$$C \cdot Q_{\infty} = \rho_e c_e (T_{\text{final}} - T_{\text{inicial}}) \implies Q_{\infty} = \frac{\rho_e c_e \Delta T_{\infty}}{C} \quad (36)$$

Este $\Delta T_{\infty} = T_{\text{final}} - T_{\text{inicial}}$ é exatamente a elevação adiabática de temperatura. E é diretamente proporcional ao consumo de cimento, tal que o valor de $Q_{\infty}/\rho_e c_e$ é conhecido como *coeficiente de elevação adiabática* (ζ).

Nota: Se Q é invariante (independente da dosagem e dos materiais constituintes), o coeficiente ζ não o é, pois $\rho_e c_e$ depende da dosagem e dos materiais constituintes.

2) Como $dt_{eq}/dt > 0$ e $T(t)$ é uma função contínua, basta o que se segue. A função $f(t_{eq})$ é uma função temporal de um processo isotérmico na temperatura de referência. Conhecendo-se $f(t)$ da elevação adiabática e, é claro, a temperatura em cada instante, basta calcular o t_{eq} desse processo. Logo, o gráfico da elevação adiabática $\Delta T_{(t)}^{adi} \times t_{eq}$ já fornece a resposta procurada (c.q.d.).

A única dificuldade é que $\Delta T_{(t)}^{adi}$ é um conjunto de dados discretos, conhecidos em certo número limitado de tempos, seja oriundo de ensaio ou análise por elementos finitos. Convém, então, fazer um ajuste de curva para obter a função contínua que melhor representa o conjunto de dados. O modelo de função para a curva de ajuste pode ser qualquer um. No caso deste, resolveu-se adotar o mesmo modelo da elevação adiabática, mas em forma de série visando obter melhor ajuste.

4.2.1 Roteiro de cálculo

A implementação do que foi exposto pode seguir o roteiro na forma de passo-a-passo abaixo:

Passo 1) Implementar nas colunas (A) e (B) a equação (27).

Passo 2) Calcular o tempo equivalente na coluna (C), a partir de (A) e (B), segundo a equação (37). Para um intervalo de tempo $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$, temos que:

$$\Delta t_{eq,i} = \Delta t_i \exp \left[-A^T \left(\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \quad (37)$$

Passo 3) (dispensável) Criar uma escala de tempo idêntica ao tempo equivalente, (D) = (C).

Passo 4) Implementar na coluna (E) um modelo de função para $f(t_{eq})$. No caso, foi implementado o seguinte modelo (poderia ser qualquer outro):

$$\Delta T_{(t)}^Q = \Delta T_{\infty,1}^Q \frac{t^{n_1}}{k_1^{n_1} + t^{n_1}} + \Delta T_{\infty,2}^Q \frac{t^{n_2}}{k_2^{n_2} + t^{n_2}} \quad (38)$$

Sendo que o t desta equação refere-se ao da coluna (D) que é idêntico ao t_{eq} da coluna (C).

Passo 5) Encontrar por ajuste de curva (mínimos quadrados) os parâmetros: $\Delta T_{\infty,1}^Q$, k_1 , n_1 , $\Delta T_{\infty,2}^Q$, k_2 , e n_2 . Sabe-se de antemão que $\Delta T_{\infty,1}^Q + \Delta T_{\infty,2}^Q = \Delta T_{\infty}^Q = \Delta T_{\infty}^{adi}$. Para o chute inicial, considerar $\Delta T_{\infty,1}^Q = \Delta T_{\infty,2}^Q$, $k_1 = a$, $k_2 = 2k_1$ e $n_1 = n_2 = 0.8c$.

Passo 6) Considerar na modelagem uma $Q(t) = \rho_e c_e \Delta T_{(t)}^Q / C$, sendo C o consumo de cimento do material reativo.

4.3 Comparativo analítico-numérico da interconversão

Resta demonstrar via análise numérica se a formulação isotérmica, com Q especificada segundo este modelo de função e com exatamente estes parâmetros, consegue reproduzir a elevação adiabática de temperatura da equação (27) e demais da Tabela 2 para diversas temperaturas iniciais.

Para demonstrar numericamente (em programa de elementos finitos) a questão da interconversão isotérmico-adiabático, far-se-á a modelagem de um concreto homogêneo segundo a formulação isotérmica na situação adiabática e verificar-se-á o histórico de temperatura do corpo, se é uniforme e varia com o tempo conforme a equação original da elevação adiabática (27).

4.3.1 Informações da modelagem

Equação da geração interna de calor isotérmica da Figura 9:

$$C \cdot Q(t_{eq}) = \rho_e c_e \left[16.4 \frac{t_{eq}^{1.93}}{(0.43 \cdot 24)^{1.93} + t_{eq}^{1.93}} + 13.6 \frac{t_{eq}^{1.57}}{(1.35 \cdot 24)^{1.57} + t_{eq}^{1.57}} \right] \quad (39)$$

com o valor das constantes a_1 e a_2 convertidos para horas.

- Consumo de cimento: $C = 300 \text{ kg/m}^3$
- Temperatura inicial: $T_0 = 25^\circ\text{C}$
- Temperatura de referência: $T_{ref} = 25^\circ\text{C}$
- Atividade térmica (E_a/R): $A^T = 4000K$
- $k = 9.36 \text{ kJ/m}^\circ\text{C}$
- $\rho = 2300 \text{ kg/m}^3$

(A)	(B)	(C)	(D)	(E)
...	...	...	...	...
T_0	25		T_0	25
ΔT_{∞}^{adi}	30		$\Delta T_{\infty,1}^Q$	16.400
a	0.5		$k1$	0.430
c	2		$n1$	1.933
			$\Delta T_{\infty,2}^Q$	13.600
	Ea/R	4000	$k2$	1.345
	T_{ref}	25	$n2$	1.571
			=SOMAXMY2((B);(E))	0.03550
t (dia)	$T^{adi}(t)$	teq	t (dia)	$T^Q(t)$
0.00	25.0		0.00	25.0
0.001	25.0	0.00	0.00	25.0
0.10	26.2	0.10	0.10	26.2
0.11	26.4	0.11	0.11	26.4
0.12	26.7	0.12	0.12	26.7
0.13	27.0	0.14	0.14	27.0
...	...	...	...	...
127.19	55.0	431.23	431.23	55.0
139.91	55.0	474.60	474.60	55.0
153.90	55.0	522.29	522.29	55.0
115.63	55.0	391.81	391.81	55.0

Fig. 9 Implementação passo-a-passo da interconversão Adi-Iso

- $c_e = 0.900 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}$
- Elevação adiabática final: 30°C ($16.4 + 13.6$)

A geometria modelada é a de um corpo de 1m por 1m , com isolamento perfeito em todo o contorno ($q = 0$).

4.4 Verificação numérica da interconversão

A modelagem foi realizada no software educacional **FlexPDE**, versão *student*. O *script* utilizado encontra-se no arquivo **ExoTermicoIsoTeqHomo.pde**.

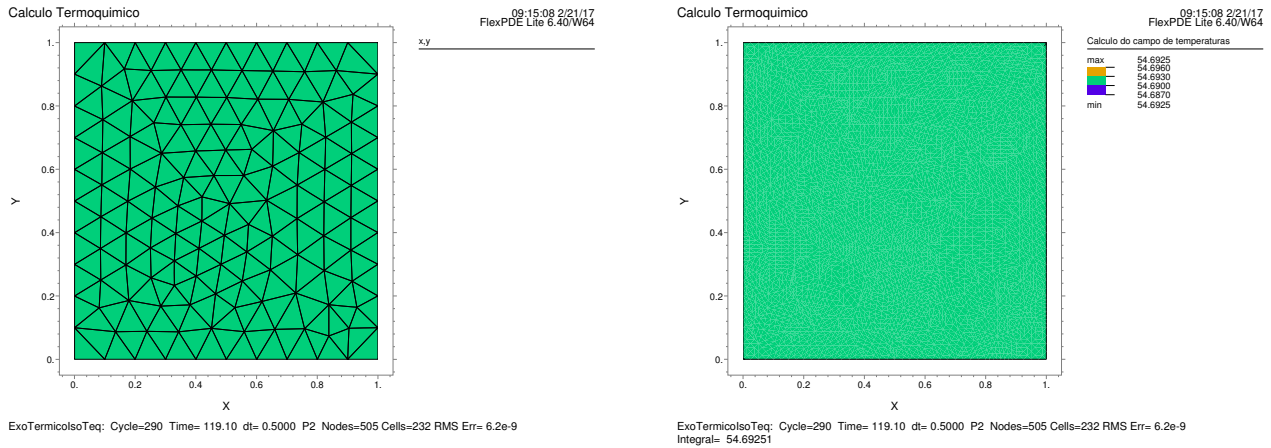


Fig. 10 Geometria e malha de elementos finitos (*esquerda*) e contorno de temperatura – notadamente uniforme (*direita*).

4.5 Interconversão considerando a escala da pasta

O resultado da modelagem pela formulação isotérmica na condição de contorno adiabática mostra que a energia total gerada pelo cimento é imediatamente (a cada instante) armazenada na forma de energia térmica. A energia térmica é a variação de temperatura vezes a capacidade térmica – $E_{termica} = \rho_e c_e \Delta T_{\infty}^{adi}$.

No entanto, observando o que ocorre na microescala, existe um sistema de agregados inertes de diferentes tamanhos, vazios (poros de diferentes tamanhos) e a pasta de cimento, que é a parte reativa do sistema.

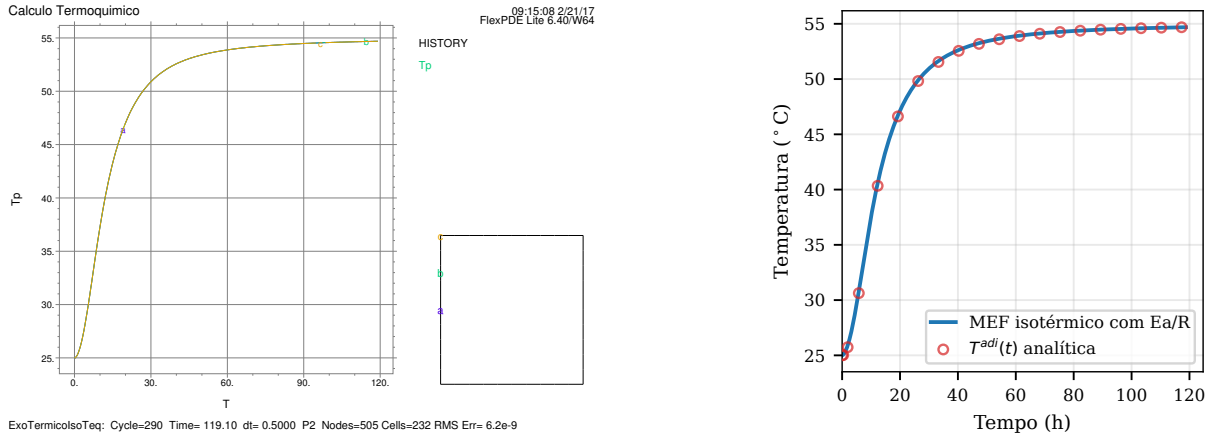


Fig. 11 Histórico de temperatura pelo MEF com E_a/R no FlexPDE (*esquerda*) e comparativo analítico-numérico (*direita*).

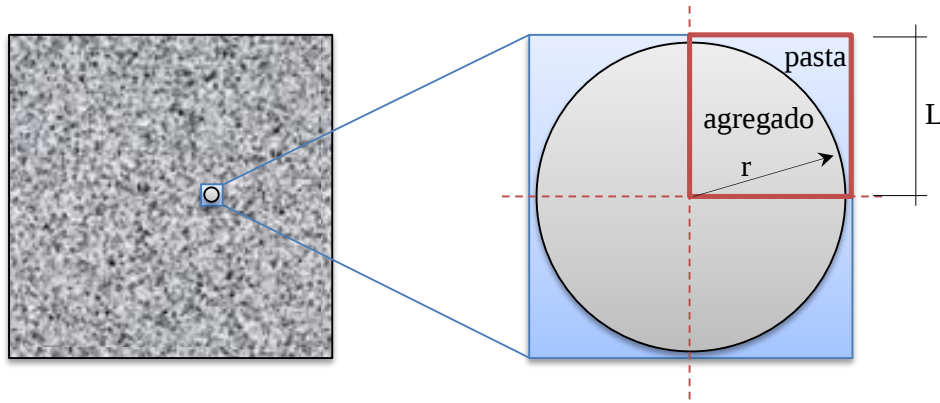


Fig. 12 Modelagem da microescala

O calor gerado pela pasta de cimento deve elevar primeiro a temperatura da pasta e depois, por condução, elevar a temperatura da parte inerte. Então, o consumo de cimento da pasta deve entrar de algum modo na formulação do problema. Ou ainda, o tempo de difusão de calor da pasta para o agregado afetaria ou não a evolução da hidratação da pasta? A questão do *upscaling* de dados da pasta para a escala do concreto é mencionada explicitamente em [Azenha et al \(2021\)](#) como uma limitação da calorimetria isotérmica. As recomendações registram que a interação cisalhante entre partículas de cimento e agregado graúdo durante a mistura, omitida em ensaios calorimétricos em escala de pasta, pode introduzir uma subestimação do calor liberado em relação ao concreto real. É reportado na literatura que a E_a pode ser distinta entre a pasta de cimento e o concreto [Granja et al \(2023\)](#); [Tan and Tang \(2024\)](#); no eixo de massividade e risco de fissuração nas primeiras idades [Kanavaris et al \(2021\)](#); [Azenha et al \(2021\)](#), consta a explicação de que tal discrepância associa-se sobretudo à zona de transição interfacial, à escala do ensaio ou ao procedimento de extração de E_a , mais do que a gradientes térmicos locais no regime adiabático.

No entanto, a proposta deste artigo é demonstrar que é possível considerar um único E_a para a pasta de cimento e o concreto integral. Porém, convém verificar se a diferença de temperatura entre o ponto mais interno da pasta e o ponto mais interno do agregado permanece desprezível mesmo para um tamanho máximo de agregado relativamente grande, como 10 cm. A análise numérica desta seção demonstra, no entanto, que — ao menos no que tange à elevação de temperatura e à condução de calor no interior do concreto — a diferença de temperatura entre o ponto mais interno da pasta e o ponto mais interno do agregado permanece desprezível mesmo para o tamanho máximo de agregado de 10 cm, o que justifica o uso de propriedades térmicas médias na modelagem do concreto massa.

Para demonstrar esta questão, é proposta uma geometria simplificada (Figura 12) em que a proporção de agregado e pasta é a mesma que a do concreto integral. O volume de pasta em relação ao volume total é de 30%.

4.5.1 Dados da modelagem:

Foi escolhida como ponto de partida uma dosagem de concreto com o seguinte traço unitário:

- cimento: 1.00 kg
- agregado: 6.30 kg

Table 3 Informações da dosagem

	cimento	agregado	w/c	total	R/L
Peso (kg)	1.00	6.30	0.67	7.97	0.944
massa esp. (kg/l)	3.00	2.70	1.00	2.39	
Vol (l)	0.33	2.33	0.67	3.33	
C (kg/m³)	300	%pasta	30.0%	Cpasta	1000

- relação água/cimento: 0.667 kg

As demais informações da dosagem podem ser vistas na Tabela 3:

Cálculo do consumo de cimento:

$$C = \frac{1000}{1/\gamma_c + m/\gamma_m + w/c} = 300 \quad (40)$$

A proporção de pasta em relação ao volume total é:

$$\%_{pasta} = \frac{1/\gamma_c + w/c}{1/\gamma_c + m/\gamma_m + w/c} = \frac{1.00}{3.33} = 30\% \quad (41)$$

Se não houvesse o agregado, somente cimento e água, o consumo de cimento da pasta seria:

$$C = \frac{1000}{1/\gamma_c + w/c} = 1000 \quad (42)$$

Foi escolhido o raio do agregado para a geometria a ser modelada de acordo com o volume de pasta:

- área do volume todo: L^2
- área do agregado: $\frac{\pi r^2}{4}$
- área de pasta: $L^2 - \frac{\pi r^2}{4}$

$$\%_{pasta} = 0.30 = \frac{L^2 - \frac{\pi r^2}{4}}{L^2} \Rightarrow r = 0.944L \quad (43)$$

Foi adotado $L = 0.05m$ pois seria equivalente a um agregado de $100mm$ ou $10cm$ estritamente como um argumento de limite superior (o 'pior caso' do ponto de vista da condução térmica), e não como uma representação de uma dosagem real. Na prática o tamanho médio dos agregados graúdos e miúdos é muito menor (um parâmetro que representa isso seria o módulo de finura) e, portanto, o caminho de difusão de calor do ponto mais interior da pasta, onde ocorre a temperatura máxima, para o centro da partícula, é substancialmente menor. Esta seria, portanto, a pior situação para o que se quer demonstrar.

4.5.2 Resultado

O *script* utilizado encontra-se no arquivo [ExoTermicoIsoTeqHeteroFix.pde](#). Para esta simulação heterogênea, aplicou-se rigorosamente a mesma curva de geração interna de calor isotérmica $Q(t_{eq})$ definida na Seção 4.3.1 (Figura 9 e equação (39)). Deixa-se claro, portanto, que não houve qualquer recalibração de parâmetros ao transitar da abordagem macroscópica homogênea para a microscópica heterogênea.

O comparativo da Figura 14 revela que o histórico de temperatura da modelagem em microescala (agregado de 10 cm, volume de pasta 30%, consumo local da pasta $C_{pasta} = 1000 kg/m^3$) reproduz de forma idêntica a elevação adiabática da formulação homogênea ($C = 300 kg/m^3$). Fica evidenciado que o calor nasce exclusivamente na pasta, atuando o agregado apenas como uma massa inerte e absorvedora. O fato de a curva de temperatura média $T(t)$ coincidir com o modelo homogêneo é, exatamente, a prova matemática que autoriza o uso das propriedades térmicas médias espacialmente homogeneizadas ($\rho_e c_e$ e k) no cálculo de estruturas de concreto massa.

Adicionalmente, a diferença máxima de temperatura registrada entre o ponto mais interno da pasta e o núcleo do agregado inerte não supera $0,3^\circ C$. Cumpre observar que esse desnível ínfimo ocorre exclusivamente no regime transitório durante a fase de subida íngreme da curva (instante de maior taxa de geração de calor). Ao atingir o pico térmico e ao longo de toda a cauda de resfriamento, o contorno apresenta-se totalmente uniforme e esse gradiente local se dissipa. A interconversão baseada em um único E_a/R em conjunto com propriedades térmicas médias permanece, portanto, plenamente válida nesta escala.

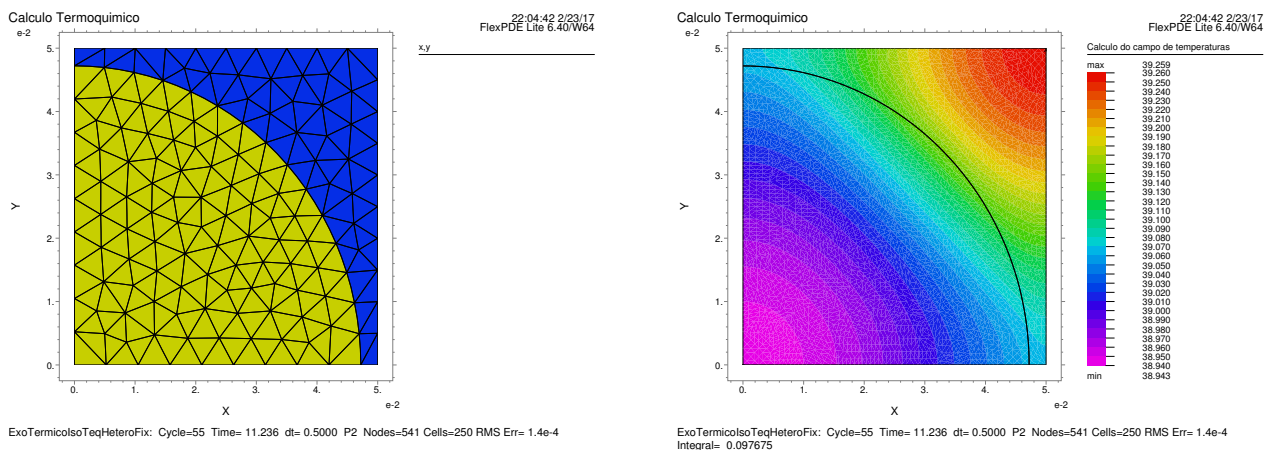


Fig. 13 Geometria e malha de elementos finitos (*esquerda*) e contorno de temperatura – relativamente uniforme (*direita*).

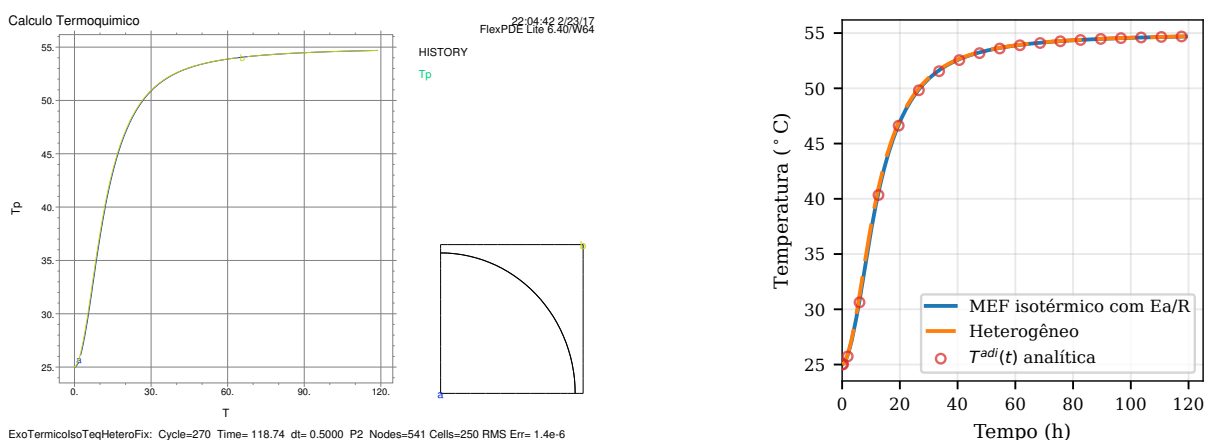


Fig. 14 Histórico de temperatura pelo MEF com E_a/R no FlexPDE (*esquerda*) e comparativo analítico-numérico (*direita*).

5 Resfriamento de laje infinita com geração interna de calor

5.1 Objetivos desta seção

O presente trabalho apresentou os conceitos-chave envolvidos na modelagem termoquímica do processo de hidratação do cimento Portland, bem como a interconversão entre as formulações adiabática e isotérmica (Seção 4) e a demonstração numérica da validade de ambas formulações. A possibilidade e a vantagem de considerar uma única E_a para a pasta de cimento e o concreto integral foi demonstrada na Seção 4.5. Considerando que a interconversão é possível e relativamente simples usando uma única E_a entre os casos mais extremos — isotérmico e adiabático, seja na escala da pasta, seja na escala do concreto integral —, é possível e facilmente verificável que o resultado de uma modelagem termoquímica em termos de temperatura e da geração interna de calor de um ponto, por exemplo, o ponto de temperatura máxima, é igualmente interconversível, isto é, permite recuperar a geração interna de calor geral, aquela que serviu como ponto de partida da modelagem.

Foi demonstrado por Gomes (2011) que a comparação entre a modelagem feita ao modo antigo, somente com a geração interna de calor do processo, tomada pela elevação adiabática na temperatura de referência e sem a energia de ativação ($E_a = 0$), em comparação com a modelagem termoquímica completa, leva a resultados tão mais próximos, quanto mais a temperatura máxima da estrutura se aproxima da temperatura máxima do ensaio de elevação adiabática. No entanto — e não é propriamente intuitivo — a modelagem com a geração interna de calor do processo, aquela obtida do ponto de temperatura máxima, em comparação com a modelagem termoquímica completa, **é literalmente exata**, independente de qual seja essa temperatura máxima.

Ampliando essa ideia, é possível adotar a geração interna de calor do processo do ponto de temperatura máxima como sendo a geração interna de calor de todos os pontos. Isso equivale a dizer que a geração interna de calor não varia com o histórico de temperaturas do ponto, isto é, não varia com o ponto. Essa geração interna de calor do processo é dita *particular*, porque é correspondente àquele histórico de temperatura específico daquele ponto de temperatura máxima. No entanto, ela é interconversível na geração interna de calor isotérmica ou adiabática, seja qual for a formulação adotada.

Com base nessa mesma ideia, torna-se não só possível, mas viável e com aplicação prática, encontrar soluções analíticas para casos típicos de estruturas massivas, como lajes infinitas, tubulões cilíndricos, lajes sobre fundação e até mesmo o problema da pós-refrigeração. De fato, uma solução analítica para cilindro infinito já foi encontrada por [Gomes \(2016\)](#) e validada de acordo com esta ideia.

Comparando-se com a formulação termoquímica isotérmica e adiabática pelo método dos elementos finitos em modelagem termoquímica completa, ficou demonstrado que a aproximação de adotar a geração interna de calor de um ponto (particular) pela de todos os pontos da maneira exposta é literalmente exata.

Uma validação exaustiva desse conceito foi realizada pelo autor, documentada em diversos relatórios de pesquisa no PPGE (UnB) entre 2014 e 2018, embora não-publicados, para os casos dos problemas típicos citados acima.

O presente trabalho trata apenas do caso da laje infinita como prova do conceito. Primeiramente, a Seção 5 apresenta a dedução analítica do resfriamento de laje infinita com geração interna de calor genérica (Apêndice A) e culmina na equação (A31), na qual a integral $\chi_m(t)$ depende da taxa $\partial T^Q/\partial t$ do ponto de temperatura máxima, com $E_a/R = 0$ na implementação analítica.

Em seguida, é apresentado o mesmo caso variando-se a temperatura de lançamento, verificando que a comparação entre a modelagem termoquímica completa e a modelagem com a geração interna de calor do processo do ponto de temperatura máxima é praticamente exata.

Por fim, é apresentado outra aplicação prática desta metodologia, que é equivalente a uma retroanálise ou a um problema inverso: uma vez que se está de posse da solução analítica, é possível por mera via de regressão (não-linear) encontrar a geração interna de calor particular do processo do ponto de temperatura máxima e, em seguida, a geração interna de calor geral, a partir de um simples histórico de temperatura medido. Esta aplicação prática foi realizada para o caso da UHE São Manoel, a partir do monitoramento de temperatura de um ponto central da estrutura do pilar do vertedouro daquela obra.

5.2 Validação analítico-numérica de uma laje infinita

5.2.1 Parâmetros do problema

A solução da equação (A31) para uma laje infinita de espessura L , com temperatura inicial T_0 , temperatura imposta T_∞ iguais nas duas faces opostas e com geração interna de calor, pode ser realizada de quatro maneiras distintas, três numéricas e uma analítica:

Por via numérica, pelo Método dos Elementos Finitos:

(i) pela formulação adiabática da Seção 4;

(ii) pela formulação isotérmica, com os parâmetros da função de geração de calor obtidos na mesma interconversão;

(iii) pela geração de calor particular $T^Q(t)$ com $E_a/R = 0$ do ponto de temperatura máxima.

Por via da solução analítica, usando a mesma geração de calor particular $T^Q(t)$ com $E_a/R = 0$ do ponto de temperatura máxima.

As formulações adiabática e isotérmica empregam os parâmetros da função Hill e as propriedades térmicas obtidos na Seção 4 (elevação adiabática de referência, eq. (27); curva isotérmica de dois termos e propriedades térmicas do comparativo analítico-numérico da mesma seção).

As duas primeiras alimentam a modelagem por elementos finitos com termoativação ($E_a/R = 4000$ K). A terceira, e a solução analítica da equação (A31), empregam a mesma geração de calor particular $T^Q(t)$ com $E_a/R = 0$.

Os dados de entrada encontram-se nas Tabelas 4–7. Convém registrar que as formulações adiabática e isotérmica descrevem o *mesmo material*, referenciadas a temperaturas de referência distintas na função de Arrhenius, porém com $T_{\text{ref}} = 25^\circ\text{C} = T_{0\text{ref},\text{adi}}$; a curva particular, por sua vez, é a geração interna de calor do processo no ponto de T_{max} .

Table 4 Propriedades térmicas — validação de laje infinita

Grandeza	Valor	Unidade
Condutividade k	9,36	kJ/(m h °C)
Massa específica ρ	2300	kg/m ³
Calor específico c_e	0,900	kJ/(kg °C)
Difusividade $h^2 = k/(\rho c_e)$	$4,52 \times 10^{-3}$	m ² /h
Consumo de cimento C	300	kg/m ³

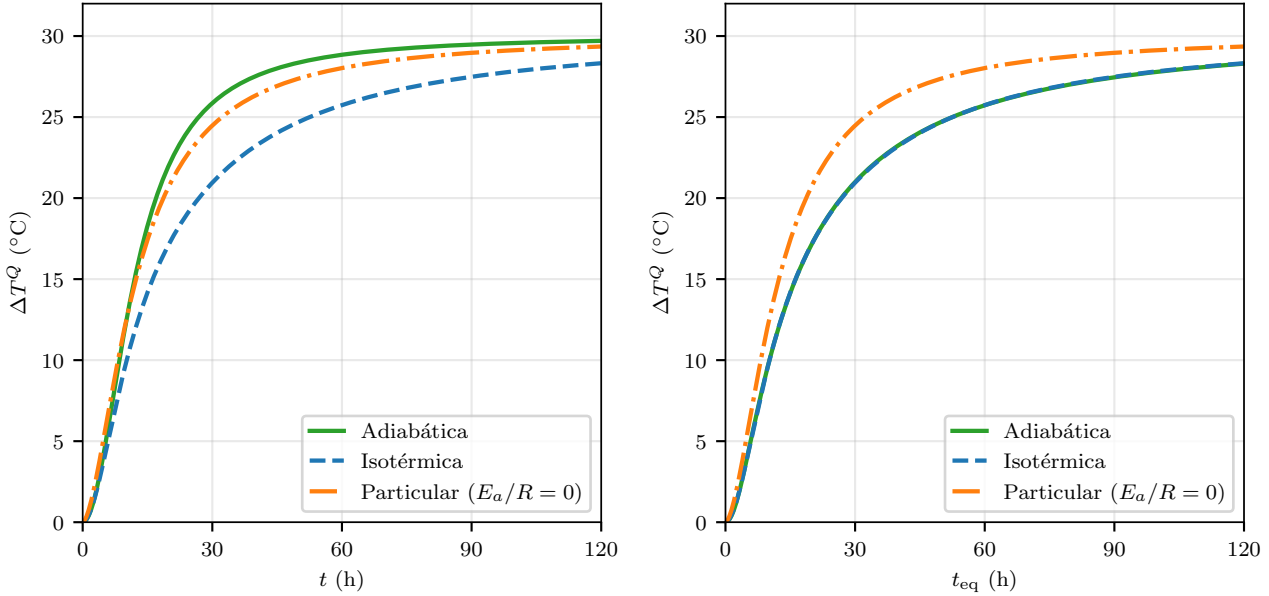
Table 5 Geometria e condições de contorno — caso de validação

Item	Valor	Obs.
Espessura L	1,0 m	
Ponto monitorado x	$L/2$	
Temperatura inicial T_0	25 °C	
Temperatura imposta nas faces T_∞	25 °C	(= T_0)
Contorno lateral	laje infinita	faces opostas isotérmicas

Table 6 Geração interna de calor — três formulações do caso de validação

Formulação	Função	Parâmetros Hill	E_a/R	T_{ref}
Adiabática	$T^{\text{adi}}(t) = T_0 + \Delta T_\infty^{\text{adi}} t^c / (a^c + t^c)$	$a = 12 \text{ h}; c = 2,0; \Delta T_\infty^{\text{adi}} = 30 \text{ °C}; T_0 = 25 \text{ °C}$	4000 K	variável, $T_{0\text{ref}}^{\text{adi}} = 25 \text{ °C}$
Isotérmica	$T^Q(t) = T_0 + \sum_{i=1}^2 \Delta T_{\infty,i}^{\text{adi}} t^{c_i} / (a_i^{c_i} + t^{c_i})$	$a_1 = 10,32 \text{ h}; c_1 = 1,93; \Delta T_1 = 16,4 \text{ °C}; a_2 = 32,28 \text{ h}; c_2 = 1,57; \Delta T_2 = 13,6 \text{ °C}; T_0 = 25 \text{ °C}$	4000 K	25 °C
Particular (analítico)	$T^Q(t) = T_0 + \Delta T_\infty^Q t^c / (a^c + t^c)$	$a = 12,35 \text{ h}; c = 1,678; \Delta T_\infty^Q = 30 \text{ °C}; T_0 = 25 \text{ °C}$	0	—

Nota. A elevação adiabática final somada na formulação isotérmica ($16,4 + 13,6 = 30 \text{ °C}$) coincide com $\Delta T_\infty^{\text{adi}}$ da formulação adiabática. A curva particular trava a mesma amplitude ($\Delta T_\infty^Q = 30 \text{ °C}$); a e c absorvem a particularização no ponto de T_{max} e a ausência de termoativação na equação analítica. Adotou-se $T_{\text{ref}} = 25 \text{ °C}$.

**Fig. 15** As três gerações internas de calor da Tabela 6. Esquerda: ΔT^Q versus tempo físico. Direita: ΔT^Q versus tempo equivalente ($E_a/R = 4000 \text{ K}$).**Table 7** Métodos de solução — numérico e analítico

Software / método	Configuração
FlexPDE (adi / iso)	ExoTermicoIsoTeqFormAdi.pde, ExoTermicoIsoTeq.pde
Solução analítica	Laje.m; implementação lajeinfinita_appweb
Modos Fourier m	10–15

5.2.2 Comparativo analítico–numérico

Para efeito de comparação da solução analítica, primeiramente é apresentado o resultado da solução analítica implementada em script no Octave (**Laje.m**) e comparada à modelagem por elementos finitos. A modelagem foi realizada no software FlexPDE (**ExoTermicoQparticularEa0.pde**). Foi utilizado em ambas as soluções a geração de calor particular $T^Q(t)$ do ponto de temperatura máxima, com $E_a/R = 0$.

Extraindo o histórico de temperatura dos dois pontos de interesse para efeito de comparação ($x/L = 0,25$ e $x/L = 0,5$), é apresentado para cada ponto o gráfico comparativo entre as modelagens por elementos finitos e a

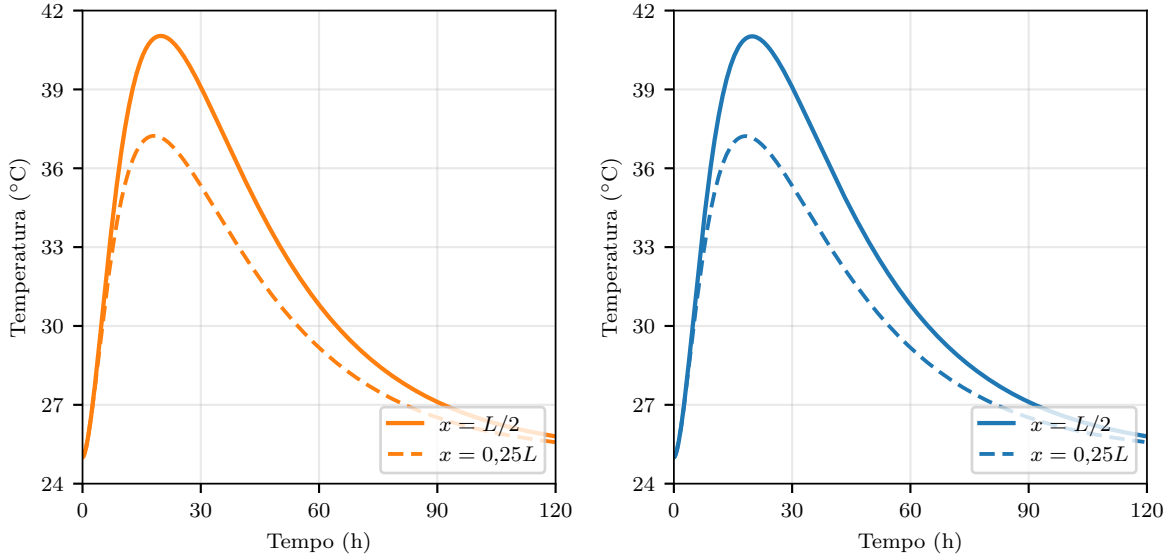


Fig. 16 Caso canônico: histórico de temperatura no centro da laje ($T_0 = T_\infty = 25^\circ\text{C}$). Esquerda: solução analítica com $E_a/R = 0$ (Laje.m); direita: FlexPDE com $Q_{\text{particular}}$ e $E_a/R = 0$.

solução analítica (Figura 17). As modelagens por elementos finitos são as três referidas anteriormente: baseada na formulação isotérmica, baseada na formulação adiabática e baseada na $Q_{\text{particular}}$, com $E_a/R = 0$.

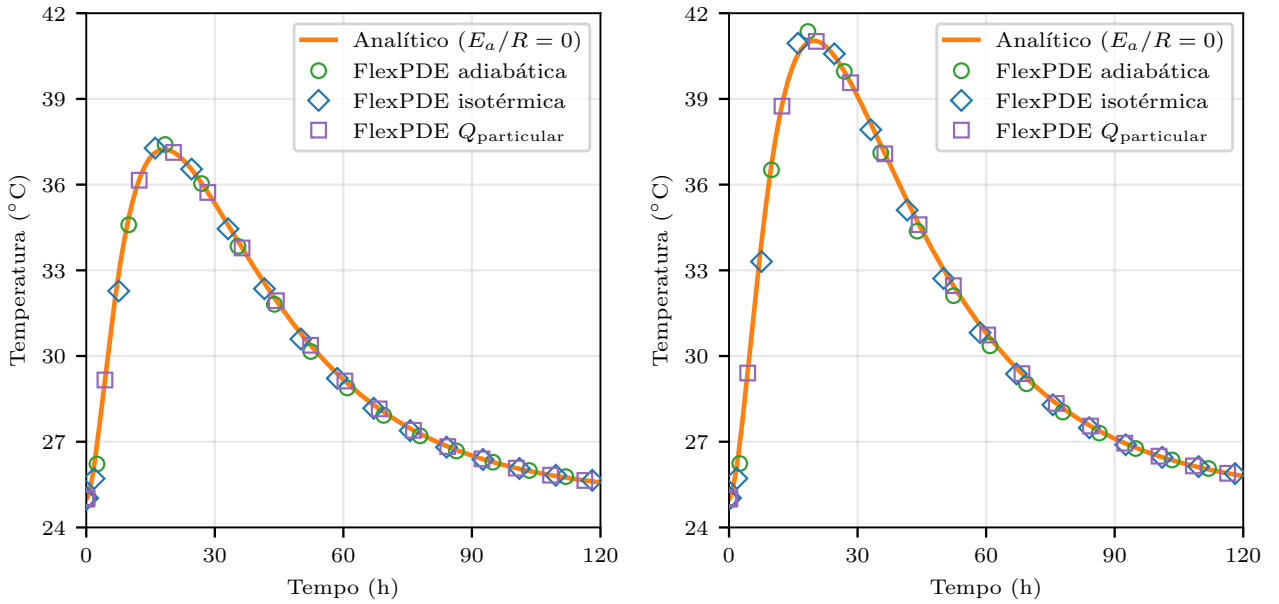


Fig. 17 Caso canônico: histórico de temperatura — solução analítica ($E_a/R = 0$), formulações adiabática e isotérmica (FlexPDE com $E_a/R = 4000\text{ K}$) e $Q_{\text{particular}}$ ($E_a/R = 0$). Esquerda: $x = 0,25L$; direita: $x = L/2$.

Os perfis de temperatura (Figura 18) mostram em três instantes de tempo diferentes a temperatura ao longo da espessura da laje. Os instantes de tempo escolhidos são o instante em que a temperatura subiu a metade do valor da temperatura máxima ($\Delta T_{\text{max}}/2$ antes do pico) e o instante em que a temperatura desceu a metade do valor da temperatura máxima $\Delta T_{\text{max}}/2$. Em algumas modelagens o instante exato não tem disponível no pós-processamento, sendo então interpolado o valor de temperatura a partir dos instantes de tempo anterior e posterior.

Os valores encontrados podem ser vistos na Tabela 8.

Como T_{max} difere em menos de $0,12^\circ\text{C}$ entre modelagens, os quatro painéis mostram sobreposição exata; pequenos desvios residuais refletem diferenças de T_{max} de referência e de malha temporal do FlexPDE.

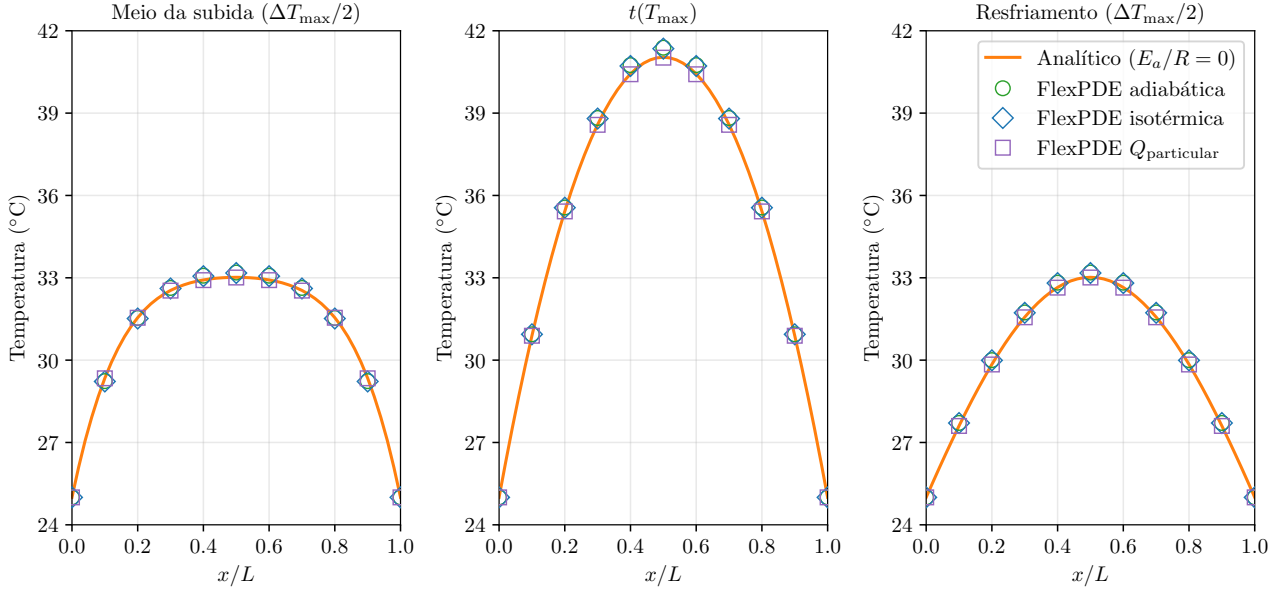


Fig. 18 Caso canônico: perfil de temperatura ao longo da espessura (x/L) em três instantes característicos — analítico ($E_a/R = 0$), FlexPDE adiabática, isotérmica e $Q_{\text{particular}}$. Cada curva corresponde ao instante próprio da modelagem (Tabela 8).

Table 8 Instantes característicos detectados a partir de $T(t)$ no centro da laje ($T_0 = 25^\circ\text{C}$). Meio da subida: primeiro cruzamento de $T_0 + \Delta T_{\text{max}}/2$ na subida (interpolação linear); resfriamento: primeiro cruzamento após $t(T_{\text{max}})$ na descida. Cada curva da Figura 18 usa o instante próprio da modelagem.

Modelagem	$t(\Delta T_{\text{max}}/2 \uparrow)$	$t(T_{\text{max}})$	$t(\Delta T_{\text{max}}/2 \downarrow)$	$T_{\text{max}} (^\circ\text{C})$
Analítico ($E_a/R = 0$)	6,85	19,92	50,12	41,04
FlexPDE adiabática	7,48	19,40	48,10	41,38
FlexPDE isotérmica	7,49	19,08	48,29	41,35
FlexPDE $Q_{\text{particular}}$	6,88	19,86	50,16	41,02

O mesmo perfil de temperatura na forma de contorno de temperaturas é apresentado na Figura 19. Para $T_0 = T_\infty = 25^\circ\text{C}$ e $E_a/R = 0$ na solução analítica, a curva particular $T^Q(t)$ da Tabela 6 reproduz o histórico de temperatura no centro da laje com concordância visual idêntica em relação ao FlexPDE (Figura 16).

Estes resultados confirmam que a equação (A31), alimentada por T^Q do ponto de temperatura máxima, representa corretamente o processo simplificado sem a termoativação, desde que adotado corretamente a $Q_{\text{particular}}$ do processo.

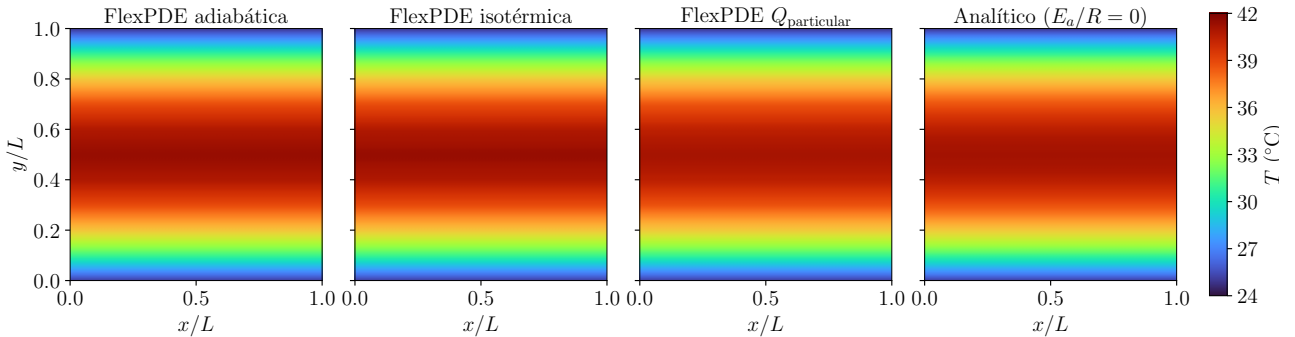


Fig. 19 Caso canônico: mapas de temperatura em $t(T_{\text{max}})$ (FlexPDE e analítico). Campo efetivamente unidimensional; faixas horizontais refletem $T(x/L)$ constante na direção transversal.

5.3 Validação de outros casos: LEVAR PARA OUTRO ARTIGO

5.3.1 Propósito, escopo e relação com a proposta original

A Subseção 5.2 reproduziu a calibração da Seção 4 ($\Delta T_{\infty}^{adi} = 30^{\circ}\text{C}$, Hill de dois termos, $T_{\text{ref}} = 25^{\circ}\text{C}$). A campanha que se segue adota, por sua vez, a calibração isotérmica de um termo com $\Delta T_{\infty}^{adi} = 50^{\circ}\text{C}$ e $T_{\text{ref}} = 20^{\circ}\text{C}$, coerente com os estudos paramétricos integrados à bancada de validação dos três motores analíticos do trabalho. Trata-se de *material de referência distinto*, mas submetido ao *mesmo protocolo conceitual*: uma única curva $Q(t_{\text{eq}})$ isotérmica alimenta o FlexPDE; o que se verifica é se a amplitude calibrada permanece invariante quando muda o processo (aqui, via T_0) e se a solução analítica com $\partial T^Q/\partial t$ do ponto de T_{max} e $E_a/R = 0$ reproduz o FEM.

A proposta de reorganização dos resultados previa, adicionalmente, a comparação FlexPDE adiabático $\times$ FlexPDE isotérmico na laje infinita para três valores de T_0 , como teste direto da função de Arrhenius sem recalibrar $Q(t_{\text{eq}})$ (Tabela 9). Essa comparação constitui o complemento natural da presente subseção e será acrescentada ao manuscrito quando o ramo adiabático estiver implementado no HGEN Studio, evitando desorganização em planilhas isoladas. **O que esta subseção demonstra hoje** é a validação cruzada analítico–FEM na matriz 3×3 e a invariância de ΔT na regressão da curva particular; **o que completará o ciclo** é a comparação adi $\times$ iso em T_0 na laje, prevista para a mesma calibração isotérmica.

Table 9 O que varia e o que permanece fixo ao alterar T_0 de lançamento

Grandeza	Comportamento
$Q(t_{\text{eq}})$ isotérmica calibrada	invariante (propriedade do material)
Curva adiabática $T^{adi}(t; T_0)$	depende de T_0 via Arrhenius
Comparação adi $\times$ iso no FlexPDE	teste direto; complemento previsto (HGEN Studio)
Curva particular $T^Q(t)$ na analítica ($E_a/R = 0$)	nova por processo (regressão sobre FEM)
Solução analítica vs FlexPDE	validada nesta subseção (matriz 3×3)

5.3.2 Desenho experimental

Fixada a calibração isotérmica do material — equação de Hill com $\Delta T_{\infty}^{adi} = 50^{\circ}\text{C}$, $a_1 = 40,10873\text{ h}$, $c_1 = 1,54782$ e $E_a/R = 4000\text{ K}$ — varia-se somente a temperatura de lançamento do concreto $T_0 \in \{20, 30, 40\}^{\circ}\text{C}$, mantendo $T_{\infty} = 20^{\circ}\text{C}$ nas faces frias. O experimento numérico cobre os três casos analíticos canônicos do trabalho: tubulão cilíndrico, laje sobre fundação em meio semi-infinito e laje infinita.

A hipótese a verificar decorre diretamente da Seção 4. A geração interna de calor em tempo equivalente $Q(t_{\text{eq}})$, obtida no ensaio isotérmico, é propriedade do *material*: não deve ser recalibrada quando muda a temperatura de lançamento. O que muda com T_0 é a deformação temporal imposta pela termoativação — manifestada, na curva particular regressada, pelo parâmetro de tempo τ da equação de Hill — e, consequentemente, o instante e o valor da temperatura máxima no processo.

O procedimento adotado, para cada combinação geometria $\times T_0$, foi o seguinte. Primeiro, o FlexPDE resolve o problema térmico bidimensional com termoativação e fornece $T(t)$ no ponto de temperatura máxima. Em seguida, a solução analítica correspondente ajusta, por regressão não linear, a curva particular $T^Q(t)$ que melhor reproduz esse histórico, mantendo fixa a calibração isotérmica de entrada. Por fim, compara-se o histórico analítico com o FlexPDE e examina-se, no instante de T_{max} , tanto o mapa bidimensional de temperaturas quanto o perfil ao longo da seção monitorada.

5.3.3 Resultados

A Tabela 11 resume os nove ajustes. Em todos os casos, a amplitude ΔT_{∞}^{adi} regressada permanece em 50°C (desvio inferior a 0,01%), confirmando que a calibração isotérmica não foi “consumida” pelo ajuste particular: ela permanece invariante, como previsto para propriedade do material. O parâmetro τ diminui sistematicamente quando T_0 aumenta, coerente com o efeito acelerador da termoativação sobre o tempo físico de hidratação. Os RMSE entre $T(t)$ analítico e FlexPDE permanecem abaixo de $0,17^{\circ}\text{C}$ em toda a matriz; o maior desvio ocorre no tubulão com $T_0 = 40^{\circ}\text{C}$ (RMSE $0,166^{\circ}\text{C}$), geometria em que a heterogeneidade radial é mais pronunciada.

As Figuras 20–22 (páginas seguintes, em paisagem) permitem ler o resultado em três escalas. No painel (a), para cada geometria, o aumento de T_0 antecipa o pico térmico e eleva T_{max} , sem exigir nova calibração da curva isotérmica. No painel (b), os mapas de temperatura no instante de T_{max} mostram a distribuição espacial qualitativa do FlexPDE. No painel (c), os perfis de seção confirmam que a solução analítica acompanha o FEM não apenas no ponto monitorado, mas ao longo da direção principal de variação.

Em síntese desta subseção: a calibração isotérmica é propriedade do material; a curva particular regressada é propriedade do processo, parametrizada aqui por T_0 . A interconversão preserva a identidade termoquímica

Table 10 Entradas comuns — campanha de sensibilidade a T_0 (nove simulações)

Item	Valor
$Q(t_{eq})$ isotérmica (Hill, um termo)	$\Delta T = 50\text{ °C}$; $a_1 = 40,10873\text{ h}$; $c_1 = 1,54782$
E_a/R	4000 K
T_0 (lançamento do concreto)	20, 30 ou 40 °C
T_∞ (faces frias / solo)	20 °C
Concreto	$k = 9\text{ kJ}/(\text{m h °C})$; $\rho = 2400\text{ kg}/\text{m}^3$; $c_e = 0,75\text{ kJ}/(\text{kg °C})$; $h^2 = 0,005\text{ m}^2/\text{h}$
Solo	$k = 3\text{ kJ}/(\text{m h °C})$; $\rho = 1500\text{ kg}/\text{m}^3$; $c_e = 0,5$; $h^2 = 0,004\text{ m}^2/\text{h}$
Tubulão cilíndrico	raio $r = 0,5\text{ m}$ ($L_X = 5\text{ m}$ no domínio FlexPDE)
Laje sobre fundação	espessura da laje $L_Y = 2,0\text{ m}$; largura $L_X = 1,0\text{ m}$; solo semi-infinito
Laje infinita	espessura $L = 1,0\text{ m}$ (faces opostas a T_∞)
Ponto de $T_{\max}$	tubulão: eixo (0, 0); laje fund.: (0, $L_Y/2$); laje ∞ : (0, $L/2$)
Horizonte	$t_f = 480\text{ h}$

Table 11 Retroanálise analítica $\times$ FlexPDE — sensibilidade a T_0 (matriz 3×3)

Caso	T_0 (°C)	ΔT regred. (°C)	τ (h)	β	RMSE $T(t)$ (°C)	$T_{\max}$ FEM / anal. (°C)
Tubulão	20	50,00	23,63	1,549	0,012	43,3 / 43,3
Tubulão	30	50,00	15,38	1,549	0,090	52,4 / 52,6
Tubulão	40	50,00	10,35	1,549	0,166	62,8 / 63,2
Laje fund.	20	50,00	13,73	1,548	0,044	59,0 / 59,0
Laje fund.	30	50,00	12,69	1,548	0,071	68,0 / 68,1
Laje fund.	40	50,00	10,40	1,548	0,091	78,5 / 78,6
Laje ∞	20	50,00	34,27	1,548	0,008	34,7 / 34,7
Laje ∞	30	50,00	32,72	1,548	0,027	38,0 / 38,1
Laje ∞	40	50,00	30,68	1,548	0,054	43,1 / 43,1

Retroanálise com $E_a/R = 0$ na equação analítica; curva particular em tempo físico.

do material enquanto a solução analítica, com $E_a/R = 0$ e $\partial T^Q/\partial t$ do ponto de $T_{\max}$, reproduz o histórico e o campo térmico do FlexPDE com erro subcentésimal na escala de dezenas de graus Celsius.

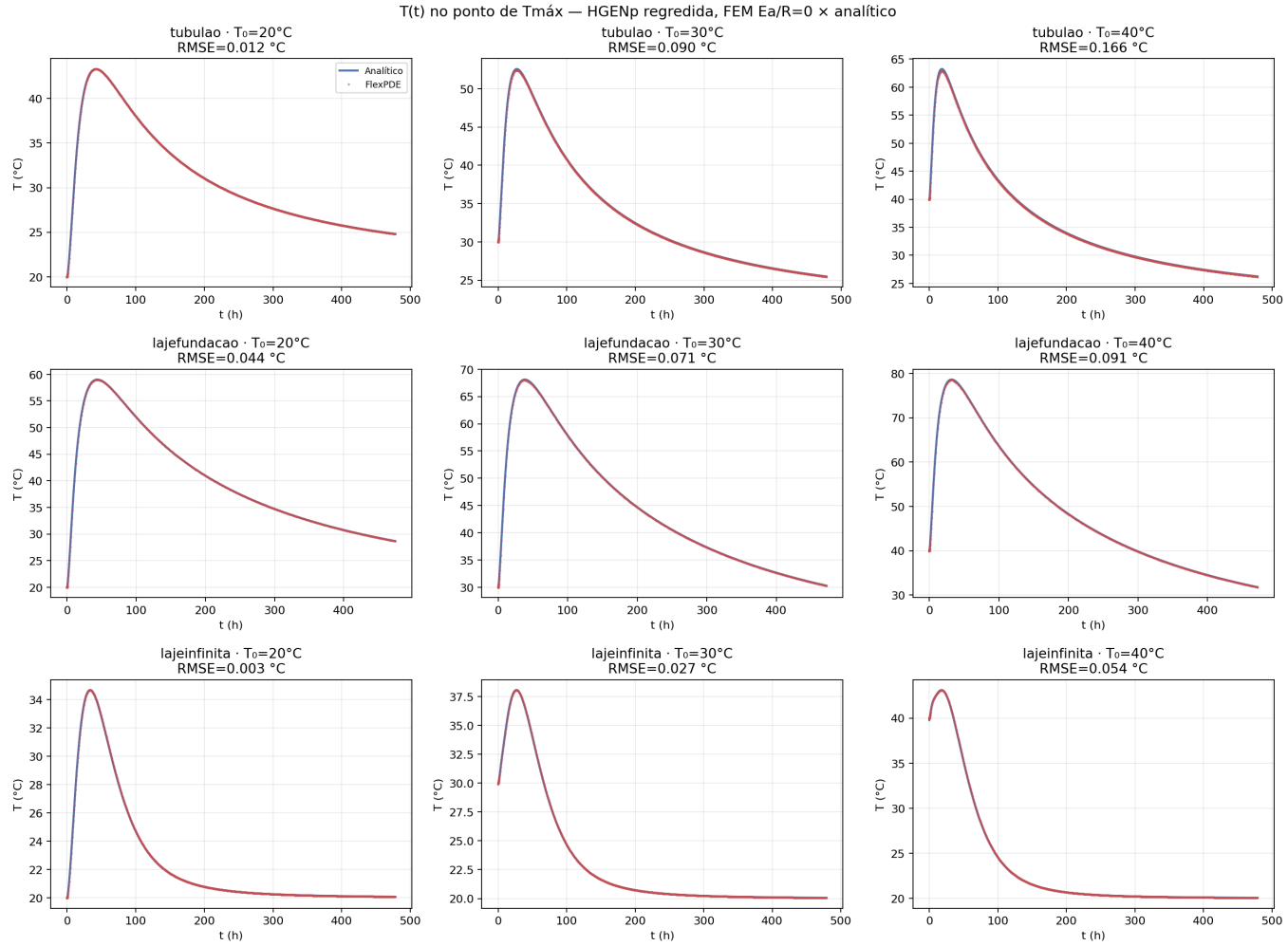


Fig. 20 Sensibilidade a T_0 — (a) históricos $T(t)$ no ponto de $T_{\max}$ (tubulão, laje sobre fundação, laje infinita $\times T_0 \in \{20, 30, 40\}$ °C). Pontos: FlexPDE; linha contínua: solução analítica com curva particular regressada; mesma calibração isotérmica de entrada.

FlexPDE — contorno de T_p no instante de T_{max} (HGENp regredida, $Ea/R=0$)

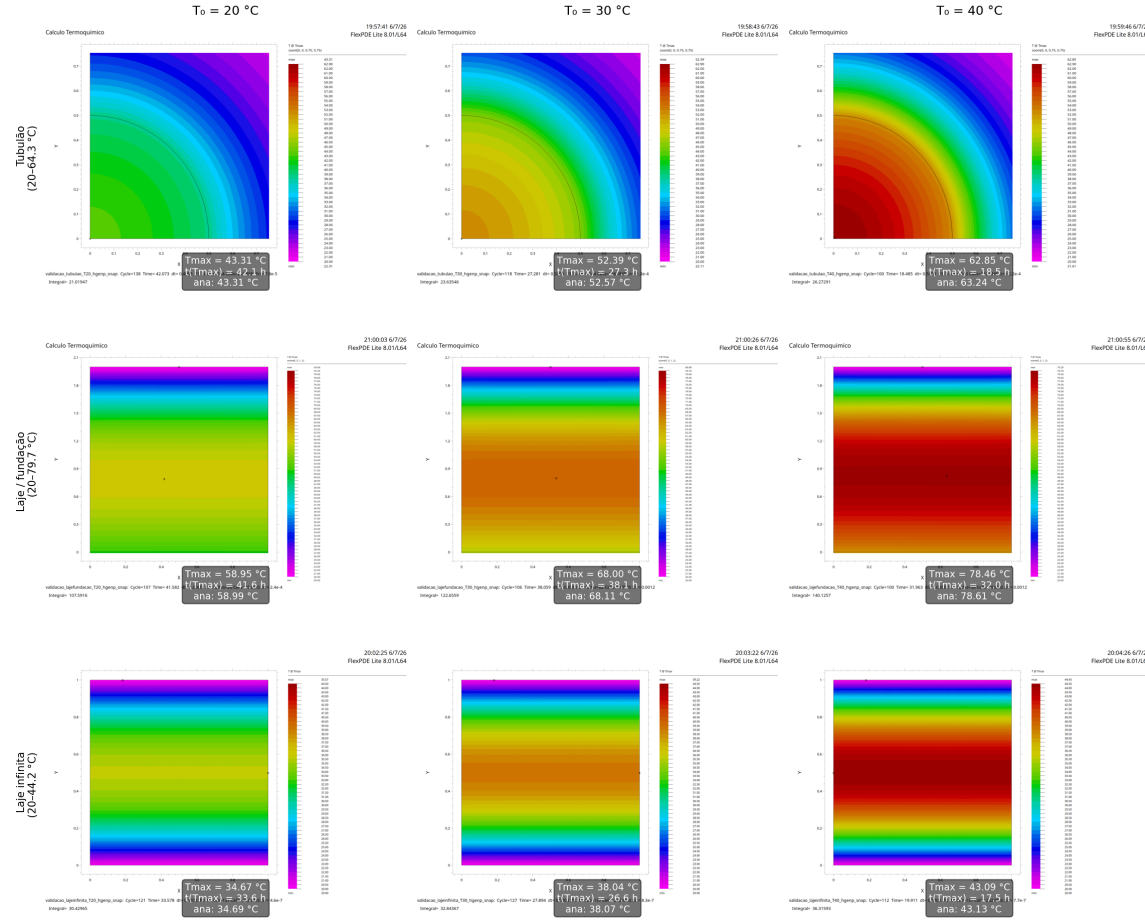


Fig. 21 Sensibilidade a T_0 — (b) mapa de temperaturas $T(x, y)$ no instante de T_{max} (FlexPDE).

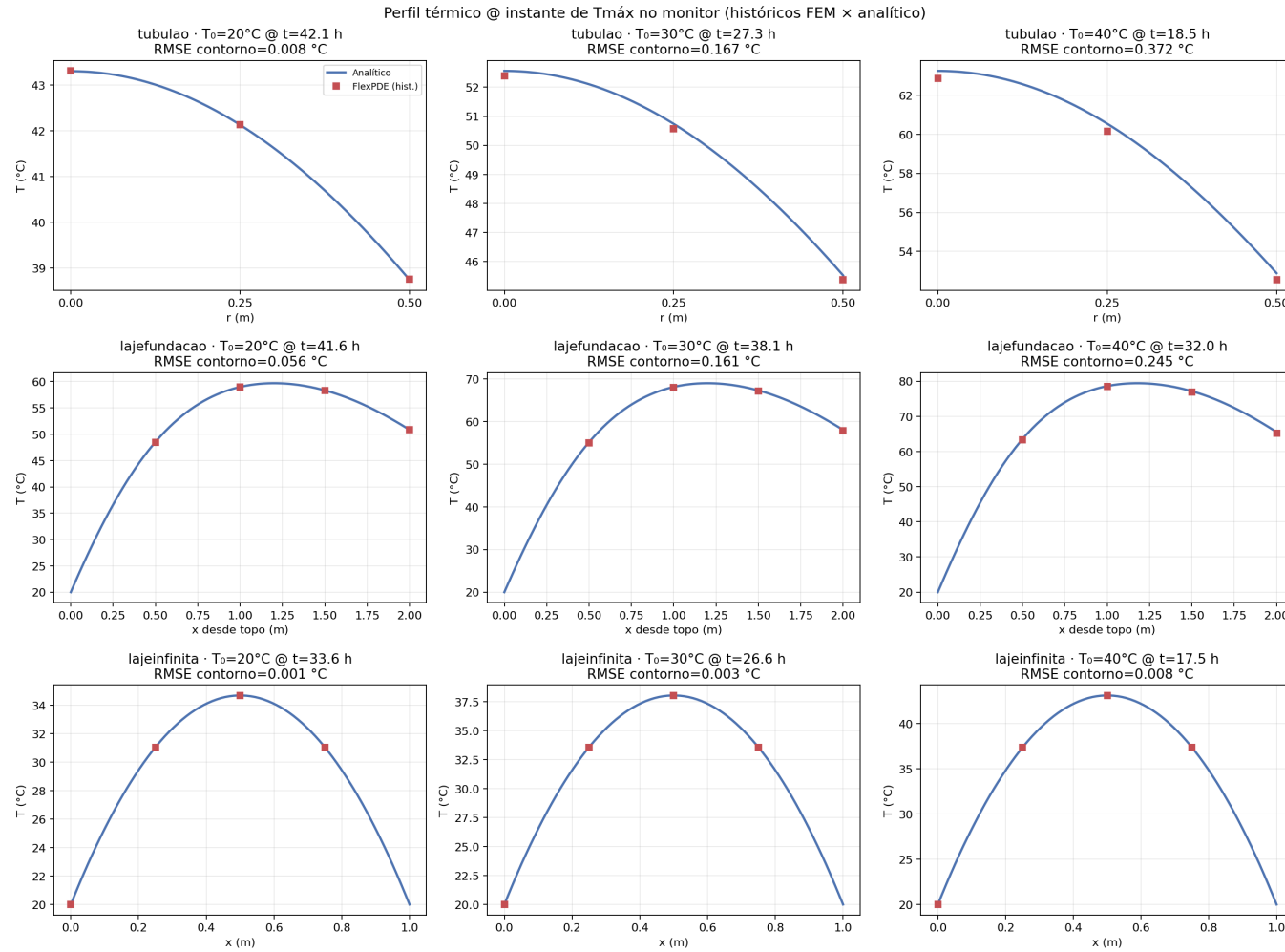


Fig. 22 Sensibilidade a T_0 — (c) perfil de temperatura ao longo da seção monitorada no instante de $T_{\max}$: FlexPDE (pontos) e solução analítica (linha).

5.4 Estudo de caso — UHE São Manoel

5.4.1 Modelagem e monitoramento

A Usina Hidrelétrica de São Manoel está localizada no rio Teles Pires, na divisa dos estados de Mato Grosso e Pará, a cerca de 950 km de Cuiabá/MT e 125 km de Paranaíba/MT, com capacidade instalada de 700 MW. No pilar do vertedouro, a modelagem térmica foi realizada com o software ANSYS em versão customizada para Furnas, capaz de representar termoativação, construção em camadas e comportamento viscoelástico com envelhecimento nas propriedades mecânicas. Esse pilar apresentava risco de fissuração térmica associado ao consumo de cimento da dosagem e ao processo construtivo em fôrma deslizante (Figura 23).



Fig. 23 Concretagem do pilar do vertedouro (UHE São Manoel)

Comparativamente, reproduziu-se o problema no FlexPDE e comparou-se ambas as abordagens com a solução analítica da equação (A31).

As medições de campo foram obtidas em visita técnica entre 21 a 25/09/2015 (Figura 24; Figura 25).

A Tabela 12 resume os lançamentos; o pilar P4 coincide com o vertedouro instrumentado no estudo original.

Table 12 Monitoramento de campo — pilares P1–P5 (UHE São Manoel)

Pilar	t_0 (lançamento)	T_0 (°C)	t_f (h)	$\overline{T}_\infty$ (°C)	n	$T_{\max}$ medido (°C)
P1	2015-09-10 22:00	26,8	319	25,8	75	57,9
P2	2015-09-11 06:00	22,9	311	25,8	73	71,5
P3	2015-09-11 22:00	22,8	295	25,7	69	67,5
P4	2015-09-15 06:00	21,5	215	26,0	49	69,8
P5	2015-09-16 06:00	21,2	191	26,1	43	70,2

Para a retroanálise analítica, adota-se a idealização de laje infinita com espessura efetiva $L = 5,0$ m e termômetro no centro ($x = L/2$). Trata-se da redução unidimensional discutida na Seção 5: em pilares de grande altura construídos em fôrma deslizante, a perda de calor pelas faces laterais domina sobre a perda pela superfície de lançamento no horizonte de interesse, de modo que o trecho instrumentado comporta-se, em primeira aproximação, como laje infinita de espessura igual à distância entre faces laterais efetivas — aqui

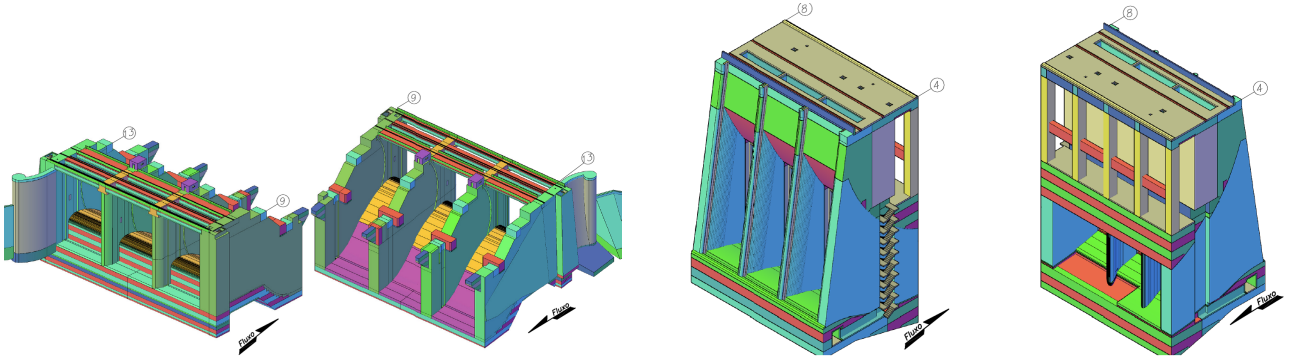


Fig. 24 a) Pilares de vertedouro. b) Pilares de tomada d'água.

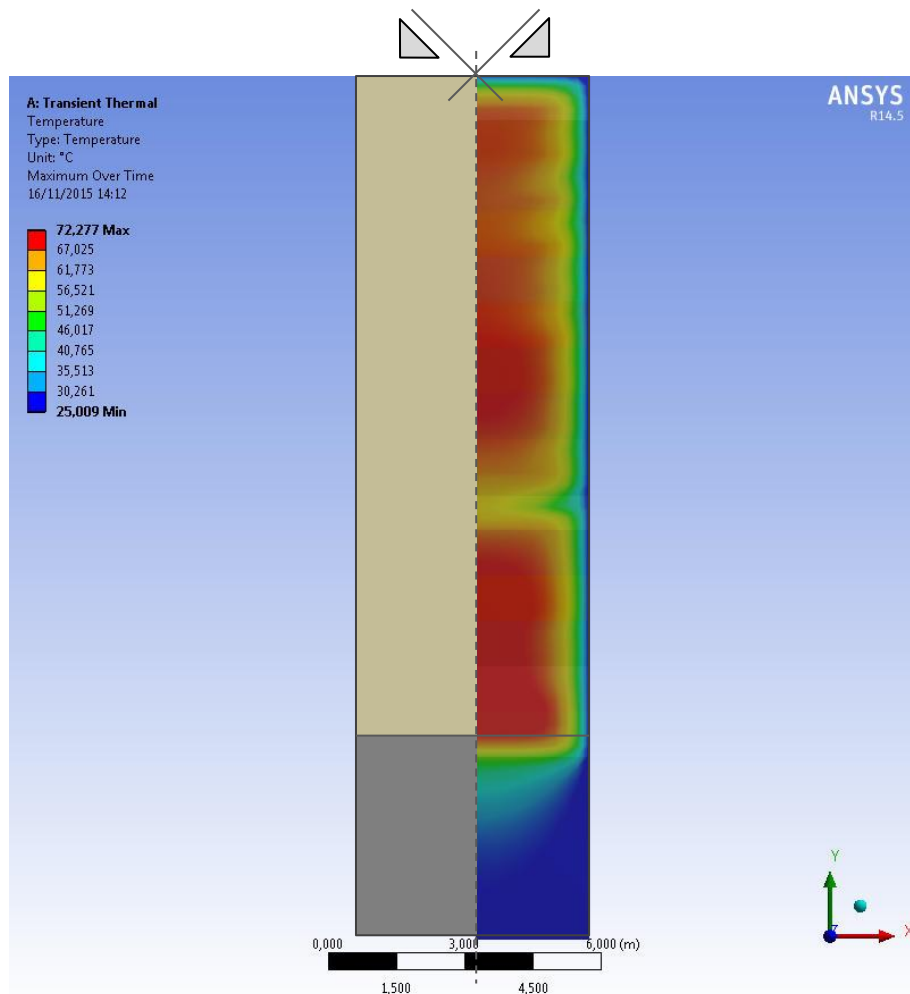


Fig. 25 Exemplo de análise térmica de pilar de vertedouro (UHE São Manoel)

estimada em 5 m a partir da modelagem tridimensional ANSYS e do fator de restrição térmica adotado nos

estudos de projeto da obra. A Tabela 13 reúne os dados adotados no pilar P4, tomado como caso de referência por concentrar o monitoramento do vertedouro.

Table 13 Dados de entrada — retroanálise analítica (pilar P4, vertedouro)

Item	Valor adotado
Modelo geométrico	laje infinita, $L = 5,0$ m
Posição do termômetro x	2,5 m ($L/2$)
T_0 (primeiro registro)	21,5 °C
T_∞ (ambiente médio)	25,0 °C
h^2 — cenário A / cenário B	0,0045 / livre (regressão)
E_a/R na retroanálise analítica	0
Parametrização de $\partial T^Q/\partial t$	Hill de dois termos

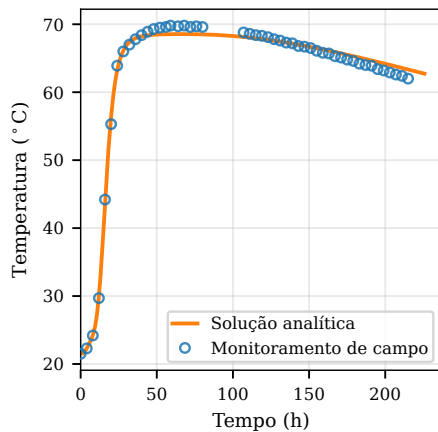
5.4.2 Retroanálise da geração interna de calor

A equação (A31) permite, a partir de um histórico monitorado $T_{\text{monit}}(t)$, estimar a geração interna de calor particular do processo construtivo — isto é, inverter o problema térmico direto com ajuda de uma solução analítica fechada, em vez de depender exclusivamente de ajustes em modelo numérico de elementos finitos. Adota-se a parametrização de Hill com dois termos para a taxa $\partial T^Q/\partial t$ no ponto de temperatura máxima e procede-se à regressão não linear que minimiza o erro quadrático entre a solução analítica e os pontos medidos. Na retroanálise analítica, mantém-se $E_a/R = 0$: a termoativação já está “embutida” no histórico particular obtido em obra, de modo análogo ao caso canônico.

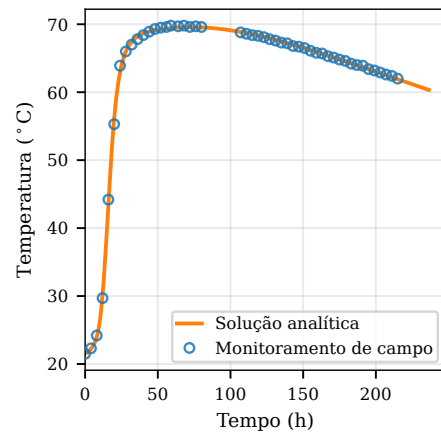
Consideraram-se dois cenários para a difusividade térmica do concreto h^2 . No *cenário A*, fixou-se $h^2 = 0,0045 \text{ m}^2/\text{h}$, valor representativo de concretos massa na faixa de temperatura do monitoramento. No *cenário B*, h^2 foi tratado como parâmetro livre do ajuste, totalizando sete grandezas regressadas (seis parâmetros Hill mais h^2).

Table 14 Retroanálise — pilar P4: h^2 fixo versus h^2 livre

Grandeza	h^2 fixo (0,0045 m ² /h)	h^2 livre
ΔT_1 (°C)	44,73	41,56
τ_1 (h)	16,68	16,66
β_1	5,50	5,53
ΔT_2 (°C)	2,36	7,19
τ_2 (h)	5,00	15,65
β_2	3,37	1,64
h^2 (m ² /h)	0,00450 (fixo)	0,00562
RMSE (°C)	0,76	0,27



h^2 fixo



h^2 livre

Fig. 26 Pilar P4 — monitoramento e solução analítica.

No pilar P4, o cenário A já reproduz qualitativamente o histórico medido, com RMSE de 0,76 °C. O cenário B reduz o erro para 0,27 °C e estima $h^2 = 0,00562 \text{ m}^2/\text{h}$, valor fisicamente plausível e próximo ao adotado em estudos correlatos da mesma obra. A redistribuição entre o primeiro e o segundo termos de Hill no cenário B indica acoplamento entre difusividade e forma da curva de hidratação: quando h^2 é liberado, o ajuste compensa parte da energia térmica no segundo termo, fenômeno já observado em regressões simultâneas de amplitude adiabática e difusividade em problemas mal condicionados.

Estende-se, em seguida, o mesmo procedimento aos cinco pilares, fixando $h^2 = 0,0057 \text{ m}^2/\text{h}$ no cenário com difusividade prescrita (Tabela 15). Essa escolha aproxima o valor médio obtido no cenário B do P4 e uniformiza a comparação entre pilares consecutivos da mesma campanha.

Table 15 Retroanálise multissensor — pilares P1–P5 ($h^2 = 0,0057 \text{ m}^2/\text{h}$ fixo ou livre)

Pilar	RMSE h^2 fixo (°C)	RMSE h^2 livre (°C)	h^2 livre (m^2/h)	$T_{\max}$ medido (°C)
P1	1,11	0,71	0,01160	57,9
P2	0,89	0,18	0,00698	71,5
P3	1,95	1,66	0,00477	67,5
P4	0,27	0,27	0,00571	69,8
P5	0,56	0,54	0,00541	70,2

Os pilares P2, P4 e P5 apresentam concordância estreita (RMSE abaixo de 0,6 °C com h^2 livre). O P3 permanece mais disperso (RMSE 1,66 °C), e o P1 destoa de forma relevante: temperatura máxima medida de apenas 57,9 °C, amplitude térmica total regressada sensivelmente inferior à dos demais e h^2 livre quase o dobro do valor típico. Hipóteses plausíveis incluem diferença de posição do sensor, espessura efetiva distinta da adotada, ou concreto de camada diferente — pontos a confirmar com o registro de obra.

Ao reduzir os históricos P2–P5 a uma única curva isotérmica, com $E_a/R = 4000 \text{ K}$ fixo na etapa de interconversão inversa — isto é, buscar uma curva que, via tempo equivalente, represente as curvas particulares já regressadas em cada pilar — obtém-se $\Delta T_1 = 39,02 \text{ °C}$, $\tau_1 = 23,87 \text{ h}$, $\beta_1 = 2,695$, $\Delta T_2 = 7,30 \text{ °C}$, $\tau_2 = 81,11 \text{ h}$, $\beta_2 = 3,827$, com RMSE conjunto de 3,21 °C. Esse exercício ilustra, em contexto de obra, a via mais ampla de estimação de E_a/R a partir de múltiplos históricos $T(t)$: quando os processos são suficientemente distintos em temperatura e escala temporal, a energia de ativação deixa de ser arbitrária; quando são quase iguais, torna-se pouco identificável. No presente conjunto de pilares, o perfil de erro em função de E_a/R é quase plano: históricos semelhantes ($T_0 \approx 22 \text{ °C}$, $T_{\max} \approx 70 \text{ °C}$, mesma escala de tempo) não separam de forma independente a energia de ativação. Recomenda-se, portanto, fixar $E_a/R = 4000 \text{ K}$ — valor já adotado na dissertação e na planilha de interconversão da obra — e excluir o P1 de ajustes globais até validação complementar. A demonstração publicável dessa via de estimação de E_a/R exigirá, como desenho mínimo, dois históricos de casos *realmente* distintos (por exemplo, geometrias ou T_0 bem separados), ou um histórico de monitoramento somado a um ensaio calorimétrico — combinações previstas no ambiente integrado de cálculo do trabalho.

5.5 Síntese dos resultados

Esta seção apresentou, em sequência lógica, a validação numérica da equação analítica de laje infinita, a extensão da metodologia de interconversão a variações de temperatura de lançamento em três geometrias canônicas e a aplicação a dados reais de monitoramento. Os resultados devem ser lidos como elos de uma mesma cadeia: interconversão adiabático–isotérmica com mesma E_a/R ; aproximação operacional pelo ponto de $T_{\max}$ sem reintroduzir termoativação na analítica; soluções analíticas generalizadas; retroanálise de campo; e, em desenvolvimento, estimação de E_a/R a partir de combinações mínimas de dados.

No caso idealizado ($T_0 = T_\infty = 25 \text{ °C}$), a equação (A31) com $\partial T^Q/\partial t$ do ponto de $T_{\max}$ e $E_a/R = 0$ reproduz o FlexPDE com concordância visual estreita. A comparação adiabático–isotérmica com $E_a/R = 4000 \text{ K}$ confirma, na laje infinita, a equivalência material já demonstrada em corpo adiabático homogêneo: ambas as formulações representam o mesmo processo quando corretamente calibradas — a formulação adiabática como segunda face da mesma moeda termoquímica, e não como metodologia concorrente e incompatível.

Na campanha de validação analítica em T_0 , uma única calibração isotérmica ($\Delta T = 50 \text{ °C}$, Hill com $a_1 = 40,10873 \text{ h}$ e $c_1 = 1,54782$) preserva a amplitude regressada em toda a matriz 3×3 , enquanto τ e $T_{\max}$ respondem ao lançamento — sem recalibração de $Q(t_{eq})$ e com RMSE analítico–FEM inferior a 0,17 °C. Isso confirma que representar o processo inteiro pela geração interna de calor do ponto de temperatura máxima, com $E_a/R = 0$ na solução analítica, é aproximação quase exata nos casos testados, e não mera conveniência de modelagem. A comparação *adi×iso* em T_0 variável na laje infinita completará esse bloco quando o ramo adiabático estiver integrado ao HGEN Studio.

No estudo de campo da UHE São Manoel, a retroanálise do pilar P4 atinge RMSE de 0,76 °C com h^2 fixo e 0,27 °C com h^2 livre — evidência de que a solução analítica fechada torna tratável, em obra, um problema

inverso que em geral se apoia apenas em modelagem numérica iterativa. A campanha P1–P5 evidencia, por um lado, a viabilidade prática do procedimento em pilares instrumentados e, por outro, a heterogeneidade entre lançamentos consecutivos e a limitada identificabilidade de E_a/R quando os históricos são estruturalmente semelhantes.

Por fim, convém registrar o significado mais amplo destes resultados em relação ao debate metodológico da área. É de se esperar que uma formulação termoquímica consistente modele qualquer processo de temperatura variável; contudo, na prática, as metodologias fazem escola — uns modelam pelo grau de hidratação, outros pelo tempo equivalente; uns privilegiam a formulação adiabática, outros somente a isotérmica. Neste trabalho, ambas as formulações foram comparadas diretamente pelas equações diferenciais, sem depender do procedimento numérico de um código específico, e acrescentou-se ainda a representação de todo o campo térmico pela geração interna de calor do ponto de temperatura máxima, com $E_a/R = 0$ na solução analítica. A consequência operacional é relevante: problemas térmicos de geometria simples admitem solução analítica rápida; estruturas tridimensionais podem, em casos como pilares e muros, ser reduzidas a problemas unidimensionais equivalentes; e a consolidação dessas etapas no HGEN Studio transforma a sequência teórica em ferramenta de cálculo reproduzível. Refinamentos previstos — comparação adi×iso completa em T_0 , comparativo com ANSYS em São Manoel, $T_\infty(t)$ por séries harmônicas — ampliarão o escopo sem alterar o núcleo metodológico aqui demonstrado.

6 Conclusão

O presente trabalho demonstrou que a formulação termoquímica do processo de hidratação do cimento Portland, seja orientada a processos isotérmicos ou adiabáticos, descreve fenômenos complementares e estritamente interconversíveis. O procedimento detalhado nesta pesquisa preenche uma lacuna metodológica importante (reconhecida pelas recomendações do RILEM TC 287-CCS [Azenha et al \(2021\)](#)). A interconversão aqui proposta, embora não seja muito diferente do preconizado pelo ASTM C1074 [ASTM Standard C1074 \(2004\)](#), pretende tão somente ater-se ao princípio da Superposição Tempo-Temperatura, porém aplicado a diferentes tipos de geração interna de calor. A interconversão viabiliza ferramentas de engenharia de alto impacto prático, permitindo consolidar as seguintes conclusões:

1) Validação da homogeneização e da interconversão na microescala: Demonstrou-se que, devido à reduzida dimensão média dos agregados no concreto, a diferença máxima de temperatura entre o interior da matriz de pasta e o núcleo do agregado é desprezível (inferior a $0,3^\circ\text{C}$ mesmo para um caso extremo de agregado de 10 cm). Isso confirma matematicamente que as propriedades térmicas médias espacialmente homogeneizadas governam a condução de calor, validando a aplicação de uma energia de ativação (E_a) e curva de calor unificadas para a transição entre a escala da pasta e a escala do concreto integral.

2) Viabilização de soluções analíticas fechadas: Ao provar que a adoção da geração interna de calor do processo, extraída do ponto de temperatura máxima (e considerando $E_a/R = 0$ na formulação analítica), reproduz com exatidão o campo térmico de todo o elemento, viabilizou-se o uso de soluções analíticas diretas (como a da laje infinita). Esta constatação dispensa a dependência exclusiva de simulações numéricas iterativas pesadas (MEF) para a modelagem térmica de estruturas massivas típicas.

3) Tratabilidade do problema inverso e retroanálise em contexto de obra: O estudo de caso do pilar do vertedouro da UHE São Manoel provou o imenso potencial prático das soluções analíticas. A tratabilidade do problema inverso viabilizou a retroanálise direta do monitoramento de campo. Foi possível regredir a curva particular do processo construtivo com precisão, alcançando um erro (RMSE) de apenas $0,27^\circ\text{C}$ no pilar P4, além de estimar propriedades físicas efetivas da estrutura *in situ*, como a difusividade térmica (h^2).

4) Perspectiva futura: banco de dados de propriedades termoquímicas: Mais do que apenas produzir históricos térmicos individualizados, a metodologia de retroanálise analítica abre um horizonte inédito para a pesquisa tecnológica. A extração e identificação de parâmetros notoriamente difíceis, como a energia de ativação (E_a), as propriedades térmicas de solos, ou mesmo as propriedades térmicas de concretos comuns, a partir de múltiplos históricos de temperaturas, combinando frentes de concretagem com diferentes geometrias ou temperaturas de lançamento (T_0), podem ser obtidos por meio de uma metodologia objetiva e validada. A aplicação sistemática desta ferramenta metodológica permitirá, no futuro, construir bancos de dados de Energia de ativação e cinética de hidratação, calibrados diretamente na escala macroscópica de obras reais, superando as limitações e divergências características da calorimetria usual.

Appendix A Dedução analítica: resfriamento de laje infinita com geração interna de calor

Fundamenta a aplicação exposta na Seção 5.

O problema do balanço de energia pode ser colocado em termos de uma equação diferencial em função da temperatura e da geração interna de calor no seguintes termos:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = h^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{g(t)}{\rho c_e} \quad (\text{A1})$$

sendo $h^2 = k/(\rho c_e)$ a difusividade térmica.

Trata-se de um problema não-homogêneo devido ao termo $g(t)$. O problema específico de uma laje infinita pode ser visualizado na Figura A1 e as condições de contorno em (A2).

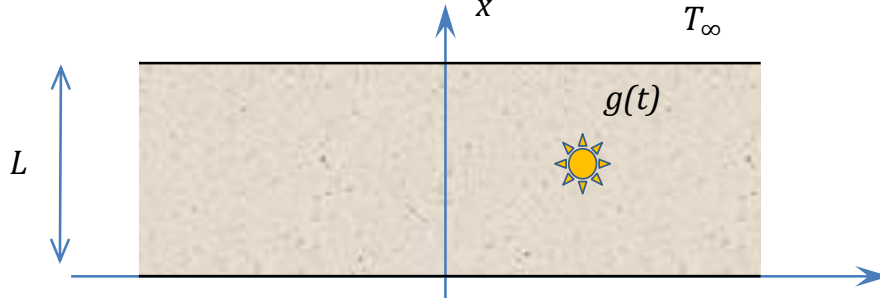


Fig. A1 Problema com temperatura imposta e geração interna de calor transiente

Condições de contorno:

$$\begin{cases} t = 0 & \rightarrow T = T_0 \\ t > 0 \quad x = \frac{L}{2} & \rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = 0 \\ t > 0 \quad x = 0 & \rightarrow T = T_\infty \end{cases} \quad (\text{A2})$$

Adota-se a temperatura em excesso $\theta = T - T_\infty$. As condições passam a $\theta(x=0) = 0$ e $\theta(t=0) = T_0 - T_\infty$. A solução homogênea que segue é a de θ : até (A12), T e T_0 estão no lugar de θ e de $T_0 - T_\infty$.

A estratégia para a solução da EDP é encontrar a solução da equação homogênea (Eq. (A1) sem o termo $g(t)$), sujeita às mesmas condições iniciais e de contorno de (A2). Em seguida encontrar uma solução particular da EDP não homogênea (A1) com condição de inicial e de contorno nulas. Resolvendo a equação homogênea, tentar-se-á uma solução da forma $T(x, t) = X_{(x)}\Gamma_{(t)}$. Doravante, o sinal ' ' indicará a derivada parcial em relação à variável em questão: $\frac{\partial X}{\partial x} = X'$ e $\frac{\partial \Gamma}{\partial t} = \Gamma'$

Substituindo $T(x, t) = X_{(x)}\Gamma_{(t)}$ na EDP homogênea $\frac{\partial T}{\partial t} = h^2 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$, tem-se:

$$X_{(x)}\Gamma'_{(t)} = h^2 X''_{(x)}\Gamma_{(t)} \quad (\text{A3})$$

Separando as variáveis, e considerando que cada membro é função de uma variável diferente, a igualdade só é possível se cada fração for constante, tem-se:

$$\frac{\Gamma'_{(t)}}{h^2 \Gamma_{(t)}} = \frac{X''_{(x)}}{X_{(x)}} = \omega \quad (\text{A4})$$

Resolve-se a EDO em x encontrando as raízes da equação característica associada, dependente do sinal de ω , sabidamente negativo para este problema. A solução tem então a seguinte forma:

$$X_{(x)} = C_2 \cos(\lambda x) + C_3 \sin(\lambda x), \omega = -\lambda^2 \quad (\text{A5})$$

Com a condição de contorno $T_{(x=0, t>0)} = 0$, tem-se que $X_{(x=0)} = 0$, portanto $C_2 = 0$. Derivando $X_{(x)}$ em relação a x , tem-se:

$$X'_{(x)} = C_3 \lambda \cos(\lambda x) \quad (\text{A6})$$

Da condição de contorno $\partial T_{(L/2)}/\partial x = X'_{(x)}\Gamma_{(t)} = 0$ implica que $X'_{(x)} = 0$, isto é, $\cos(\lambda x) = 0$ (equação característica), o que leva a:

$$\lambda_{(m)} \frac{L}{2} = \lambda_m \frac{L}{2} = \frac{2m-1}{2} \pi, m \geq 1 \in \mathbb{Z} \quad (\text{A7})$$

Resolvendo a EDO em t , que tem por solução $\Gamma_{(t)} = C_1 e^{h^2 \omega t}$, conduz à solução geral:

$$T_{(x,t)} = C_1 e^{-h^2 \lambda^2 t} C_3 \sin(\lambda x) = D e^{-h^2 \lambda^2 t} \sin(\lambda x) \quad (\text{A8})$$

A condição inicial $T_{(x \geq 0, t=0)} = T_0$, traduz-se em $X_{(x)}\Gamma_{(0)} = T_0$, isto é, $\Gamma_{(0)} = T_0$. Como a equação característica tem infinitas raízes λ_m , os coeficientes D também devem ser determinados para cada m . Assim, a solução geral fica da forma:

$$T_{(x,t)} = \sum_{m=1}^{\infty} D_m e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \sin(\lambda_m x) \quad (\text{A9})$$

Fazendo $T = T_0$ para $t = 0$, tem-se que:

$$T_0 = \sum_{m=1}^{\infty} D_m \sin(\lambda_m x) \quad (\text{A10})$$

é trabalhoso e longo demonstrar, embora fácil de verificar que:

$$D_m = \frac{4T_0}{(2m-1)\pi} = d_m T_0 \quad (\text{A11})$$

Logo, substituindo em (A10), chega-se a:

$$T_{(x,t)} = \frac{4T_0}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \sin(\lambda_m x)}{(2m-1)} \quad (\text{A12})$$

Este resultado encontra-se originalmente em (U.S. Bureau of Reclamation, 1949, eq. 27). Resolvendo agora a EDP não-homogênea, cuja solução geral será do tipo:

$$T_{(x,t)} = \sum_{m=1}^{\infty} B_{m(t)} \varphi_{m(x)} \quad (\text{A13})$$

As derivadas da temperatura ficam:

$$\frac{\partial T_{(x,t)}}{\partial t} = \sum_{m=1}^{\infty} B'_{m(t)} \varphi_{m(x)} \quad (\text{A14})$$

$$\varphi''_{m(x)} = -\lambda_m^2 \varphi_{m(x)} \quad (\text{A15})$$

$$\frac{\partial^2 T_{(x,t)}}{\partial x^2} = \sum_{m=1}^{\infty} B_{m(t)} \varphi''_{m(x)} = - \sum_{m=1}^{\infty} \lambda_m^2 B_{m(t)} \varphi_{m(x)} \quad (\text{A16})$$

$$\frac{g(t)}{\rho c_e} = \sum_{m=1}^{\infty} d_m \frac{g(t)}{\rho c_e} \varphi_{m(x)} \quad (\text{A17})$$

Escrevendo a EDP da eq. (A1) em termos do somatório acima, tem-se:

$$\sum_{m=1}^{\infty} B'_{m(t)} \varphi_{m(x)} = -h^2 \sum_{m=1}^{\infty} \lambda_m^2 B_{m(t)} \varphi_{m(x)} + \sum_{m=1}^{\infty} d_m \frac{g(t)}{\rho c_e} \varphi_{m(x)} \quad (\text{A18})$$

$$\sum_{m=1}^{\infty} B'_{m(t)} \varphi_{m(x)} = \sum_{m=1}^{\infty} \left[d_m \frac{g(t)}{\rho c_e} - h^2 \lambda_m^2 B_{m(t)} \right] \varphi_{m(x)} \quad (\text{A19})$$

Aa igualdade acima vale se, para todo $m \geq 1$:

$$B'_{m(t)} + h^2 \lambda_m^2 B_{m(t)} = d_m \frac{g(t)}{\rho c_e} \quad (\text{A20})$$

Multiplicando ambos os membros por $e^{-h^2 \lambda_m^2 t}$, temos que:

$$e^{h^2 \lambda_m^2 t} B'_{m(t)} + h^2 \lambda_m^2 e^{h^2 \lambda_m^2 t} B_{m(t)} = d_m \frac{g(t)}{\rho c_e} e^{h^2 \lambda_m^2 t} \quad (\text{A21})$$

$$\frac{d \left(e^{h^2 \lambda_m^2 t} B_{m(t)} \right)}{dt} = d_m \frac{g(t)}{\rho c_e} e^{h^2 \lambda_m^2 t} \quad (\text{A22})$$

$$e^{h^2 \lambda_m^2 t} B_{m(t)} = \int_0^t d_m \frac{g(\tau)}{\rho c_e} e^{h^2 \lambda_m^2 \tau} d\tau \quad (\text{A23})$$

$$B_{m(t)} = d_m e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \int_0^t \frac{g(\tau)}{\rho c_e} e^{h^2 \lambda_m^2 \tau} d\tau = d_m \chi_{m(t)} \quad (\text{A24})$$

A expressão $\chi_{m(t)}$ já foi resolvida numericamente para uma $g(t)$ genérica (Gomes, 2016). Para $g(t) = \rho c_e \theta_0 a e^{-at}$, sendo θ_0 a amplitude da elevação adiabática dessa geração exponencial, tem-se:

$$B_{m(t)} = d_m e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \theta_0 a \int_0^t e^{-a\tau} e^{h^2 \lambda_m^2 \tau} d\tau \quad (\text{A25})$$

$$B_{m(t)} = d_m \frac{\theta_0 a}{(h^2 \lambda_m^2 - a)} \left[e^{-at} - e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \right] \quad (\text{A26})$$

$$T_{(x,t)} = \frac{4}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\theta_0 a}{(2m-1)(h^2 \lambda_m^2 - a)} \left[e^{-at} - e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \right] \varphi_{m(x)} \quad (\text{A27})$$

Considerando agora a solução da EDP homogênea e não-homogênea como solução completa para o problema, temos:

$$T_{(x,t)} = T_{\infty} + 4(T_0 - T_{\infty}) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \sin(\lambda_m x)}{\lambda_m L} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\theta_0 a}{\lambda_m L (h^2 \lambda_m^2 - a)} \left[e^{-at} - e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \right] \sin(\lambda_m x) \quad (\text{A28})$$

Ou, para uma $g(t)$ genérica,

$$T_{(x,t)} = T_{\infty} + 4(T_0 - T_{\infty}) \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \sin(\lambda_m x)}{\lambda_m L} + 4 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-h^2 \lambda_m^2 t}}{\lambda_m L} \int_0^t \frac{g(\tau)}{\rho c_e} e^{h^2 \lambda_m^2 \tau} d\tau \sin(\lambda_m x) \quad (\text{A29})$$

Esta equação (A29) fornece a função do tempo e do ponto da temperatura de uma laje infinita de altura L sujeita a uma temperatura imposta na superfície e uma temperatura inicial conhecidas. A geração interna de calor está explícita e diretamente considerada na função $g(t)$ genérica. A implementação dessa solução segue o exposto na Seção 4, devendo a integral de $g(t)$ junto com a exponencial ser resolvida numericamente.

Na aplicação numérica da Seção 5 ($E_a/R = 0$), substitui-se $g(\tau)/(\rho c_e)$ pela taxa $\partial T^Q/\partial t$ do ponto de temperatura máxima, definindo-se

$$\chi_m(t) = e^{-h^2 \lambda_m^2 t} \int_0^t \frac{\partial T^Q(\tau)}{\partial \tau} e^{h^2 \lambda_m^2 \tau} d\tau, \quad (\text{A30})$$

obtém-se

$$T_{(x,t)} = T_{\infty} + 4 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin(\lambda_m x)}{\lambda_m L} \left[(T_0 - T_{\infty}) e^{-h^2 \lambda_m^2 t} + \chi_m(t) \right]. \quad (\text{A31})$$

onde a integral $\chi_m(t)$ é a mesma de Gomes (2016), cujo procedimento de cálculo está ali apresentado.

References

- Al-Hasani LE, Park J, Perez G, et al (2022) Quantifying concrete adiabatic temperature rise based on temperature-dependent isothermal calorimetry; modeling and validation. *Materials and Structures* 55(7):191. <https://doi.org/10.1617/s11527-022-02023-6>
- ASTM Standard C1074 (2004) Standard Practice for Estimating Concrete Strength by the Maturity Method. Tech. rep., ASTM International, West Conshohocken, PA
- Azenha M, Faria R, Figueiras H (2011) Thermography as a technique for monitoring early age temperatures of hardening concrete. *Construction and Building Materials* 25(11):4232–4240. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2011.04.065>
- Azenha M, Kanavaris F, Schlicke D, et al (2021) Recommendations of RILEM TC 287-CCS: thermo-chemo-mechanical modelling of massive concrete structures towards cracking risk assessment. *Materials and Structures* 54:135. <https://doi.org/10.1617/s11527-021-01732-8>
- Azenha MÂD (2004) Comportamento do betão nas primeiras idades: Fenomenologia e análise termo-mecânica. Mestrado em estruturas de engenharia civil, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto
- Azenha MÂD (2009) Numerical simulation of the structural behaviour of concrete since its early ages. Doctor of philosophy in civil engineering, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Porto

- Benameur HK, Wirquin E, Duthoit B (2000) Determination of apparent activation energy of concrete by isothermal calorimetry. *Cement and Concrete Research* 30:301–305
- Bishnoi S, Scrivener KL (2009) Studying nucleation and growth kinetics of alite hydration using $^{\mu}$ ic. *Cement and Concrete Research* 39(10):849–860. <https://doi.org/DOI:10.1016/j.cemconres.2009.07.004>, URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TWG-4WYFMT2-2/2/9a3999e1ea2fa4d96b2becfb47c4f6b0>
- Broda M, Wirquin E, Duthoit B (2002) Conception of an isothermal calorimeter for concrete-Determination of the apparent activation energy. *Materials and Structures (RILEM)* 35:389–394
- Brooks AG, Schindler AK, Barnes RA (2007) Maturity Method Evaluated for Various Cementitious Materials. *Journal of Materials in Civil Engineering* 19(12):1017–1025. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0899-1561\(2007\)19:12\(1017\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0899-1561(2007)19:12(1017))
- Carino NJ (1984) The maturity method: theory and application. *Journal of Cement, Concrete, and Aggregates (ASTM)* 6(2):61–73
- Carino NJ, Lew HS (1983) Temperature effects on strength-maturity relations of mortar. *ACI Materials Journal* 80(3):177–182
- de Carvalho AdG (2002) Energia de ativação dos concretos: experimentação e modelagem. Mestrado em ciências em engenharia civil, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro
- Cervera M, Faria R, Oliver J, et al (1999) Macroscopic Modelling of Concrete Aging Regarding Hydration and Temperature Effects. *Publication CIMNE* (170):25
- Cervera M, Faria R, Oliver J, et al (2002) Numerical modelling of concrete curing, regarding hydration and temperature phenomena. *Computers & structures* 80(18):1511–1521
- D'Aloia L, Chanvillard G (2002) Determining the "apparent" activation energy of concrete: E_a - Numerical simulations of the heat of hydration of cement. *Cement and Concrete Research* 32(8):1277–1289. [https://doi.org/10.1016/S0008-8846\(02\)00791-3](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(02)00791-3)
- de Normas Técnicas AB (1990) NBR 12006: Cimento – Determinação do calor de hidratação pelo método da garrafa de Langavant. Tech. rep., ABNT, Rio de Janeiro
- De Schutter G (2004) Applicability of degree of hydration concept and maturity method for thermo-visco-elastic behaviour of early age concrete. *Cement and Concrete Composites* 26(5):437–443
- Fairbairn EMR, Toledo RD, Ribeiro FLB, et al (2007) Modelagem do concreto a poucas idades com aplicações em barragens: Novos paradigmas e novas soluções. Relatório final de p&d, COPPETEC
- Faria ÉF (2004) Predição da exotermia da reação de hidratação do concreto através de modelo termo-químico e modelo de dados. Mestrado em ciências em engenharia civil, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro
- Ferreira IA (2008) Solução em Paralelo de um Modelo Termo-Químico-Mecânico. Doutor em ciências, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro,RJ
- Fonseca DD (2008) Predição da elevação adiabática da temperatura do concreto através de modelos baseados em dados. Doutor em ciências, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro,RJ
- Freiesleben Hansen P, Pedersen EJ (1977) Maturity computer for controlled curing and hardening of concrete. *Nordisk Betong* (1):21–25
- Gomes FMP (2011) Concreto nas primeiras idades: propriedades e modelagem termomecânica simplificada. Mestrado em engenharia civil, Faculdade de Engenharia Civil, Universidade Federal de Goiás, Goiás
- Gomes FMP (2016) Resfriamento de um cilindro com geração interna de calor. In: XXXVII Congresso Ibero-Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE), Brasília, DF
- Granja J, Ribeiro RR, Russo T, et al (2023) Influence of Temperature in the Early-age Elastic Modulus Evolution of Cement Pastes and Concrete. *Journal of Advanced Concrete Technology* <https://doi.org/10.3151/jact.21.803>

- Gutsch AW (2002) Properties of early age concrete-Experiments and modelling. *Materials and Structures* 35(2):76–79. <https://doi.org/10.1007/BF02482104>, URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02482104>
- Jedrzejska A, Benboudjema F, Lacarriere L, et al (2018) COST TU1404 benchmark on macroscopic modelling of concrete and concrete structures at early age: Proof-of-concept stage. *Construction and Building Materials* 174:173–189. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2018.04.088>
- Jensen OM, Freiesleben Hansen P (1999) Influence of Temperature on Autogenous Deformation and Relative Humidity Change in Hardening Cement Paste. *Cement and Concrete Research* 29(4):567–575. [https://doi.org/10.1016/S0008-8846\(99\)00021-6](https://doi.org/10.1016/S0008-8846(99)00021-6)
- Kanavaris F, Jedrzejska A, Sfikas IP, et al (2021) Enhanced massivity index based on evidence from case studies: Towards a robust pre-design assessment of early-age thermal cracking risk and practical recommendations. *Construction and Building Materials* 271:121570. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.121570>
- Klemczak B, Smolana A (2024) Multi-Step Procedure for Predicting Early-Age Thermal Cracking Risk in Mass Concrete Structures. *Materials* 17(15):3700. <https://doi.org/10.3390/ma17153700>
- Klemczak B, Smolana A, Jedrzejska A (2024) Modeling of Heat and Mass Transfer in Cement-Based Materials during Cement Hydration—A Review. *Energies* 17(11):2513. <https://doi.org/10.3390/en17112513>, URL <https://doi.org/10.3390/en17112513>
- Lackner R, Mang HA (2004) Chemoplastic material model for the simulation of early-age cracking: From the constitutive law to numerical analyses of massive concrete structures. *Cement & Concrete Composites* 26(5):551–562. [https://doi.org/10.1016/S0958-9465\(03\)00071-4](https://doi.org/10.1016/S0958-9465(03)00071-4), URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TWF-48WPSJP-1/2/e94c651a117ea6d3b45797f6852d111e>
- Mardmomen S, Chen HL (2023) Prediction of the early age thermal behavior of mass concrete containing SCMs using ANSYS. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 148:7899–7917. <https://doi.org/10.1007/s10973-023-12243-9>
- Nguyen CT, Do TA, Hoang TT, et al (2021) Evaluation of early-age cracking risk in mass concrete footings under different placement conditions. *Revista Ingeniería de Construcción* 36(1):5–13. <https://doi.org/10.4067/s0718-50732021000100005>
- Pang X, Cuello Jimenez W, Singh J (2020) Measuring and modeling cement hydration kinetics at variable temperature conditions. *Construction and Building Materials* 262:120788. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.120788>
- Pang X, Sun L, Sun F, et al (2021) Cement hydration kinetics study in the temperature range from 15 to 95 C. *Cement and Concrete Research* 148:106552. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2021.106552>
- Pinto RCA, Schindler AK (2010) Unified Modeling of Setting and Strength Development. *Cement and Concrete Research* 40:58–65. <https://doi.org/10.1016/j.cemconres.2009.08.010>
- Poole JL (2007) Modeling Temperature Sensitivity and Heat Evolution of Concrete. PhD thesis, The University of Texas at Austin
- Poole JL, Riding KA, Folliard KJ, et al (2007) Methods for Calculating Activation Energy for Portland Cement. *ACI Materials Journal* 104(3):303–311. <https://doi.org/10.14359/18499>
- Poole JL, Riding KA, Juenger MCG, et al (2010) Effects of Supplementary Cementitious Materials on Apparent Activation Energy. *Journal of ASTM International* 7(9):102906. <https://doi.org/10.1520/JAI102906>
- Poole JL, Riding KA, Juenger MCG, et al (2011) Effect of Chemical Admixtures on Apparent Activation Energy of Cementitious Systems. *Journal of Materials in Civil Engineering* 23(11):1654–1661. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)MT.1943-5533.0000345](https://doi.org/10.1061/(ASCE)MT.1943-5533.0000345)
- Riding KA, Poole JL, Folliard KJ, et al (2012) Modeling Hydration of Cementitious Systems. *ACI Materials Journal* 109(3):225–234. <https://doi.org/10.14359/51683709>
- Schindler AK, Folliard KJ (2005) Heat of hydration models for cementitious materials. *ACI Materials Journal* 102(1):24–33

- Schmid M, Pichler C, Lackner R (2019) Engineering hydration model for ordinary Portland cement based on heat flow calorimetry data. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 138(3):2283–2288. <https://doi.org/10.1007/s10973-019-08165-0>, open access (CC BY 4.0)
- Siddiqui S, Riding KA (2012) Effect of Calculation Methods on Cement Paste and Mortar Apparent Activation Energy. *Advances in Civil Engineering Materials* 1(1):20120011. <https://doi.org/10.1520/ACEM20120011>
- Silvoso MM (2002) Modelagem numérica do concreto a poucas idades. Mestrado em engenharia civil, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro
- Silvoso MM (2003) Otimização da Fase Construtiva de Estruturas de Concreto em Face dos Efeitos da Hidratação via Algoritmos Genéticos. Doutorado em engenharia civil, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro
- Smolana A, Klemczak B, Azenha M, et al (2021) Early Age Cracking Risk in a Massive Concrete Foundation Slab: Comparison of Analytical and Numerical Prediction Models with on-Site Measurements. *Construction and Building Materials* 301:124135. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.124135>, URL <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2021.124135>
- Smolana A, Klemczak B, Azenha M, et al (2022) Thermo-Mechanical Analysis of Mass Concrete Foundation Slabs at Early Age—Essential Aspects and Experiences from the FE Modelling. *Materials* 15(5):1815. <https://doi.org/10.3390/ma15051815>, URL <https://doi.org/10.3390/ma15051815>
- Soutsos M, Kanavaris F (2020) Compressive strength estimates for adiabatically cured concretes with the Modified Nurse-Saul (MNS) maturity function. *Construction and Building Materials* 255:119236. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2020.119236>
- de Souza RM (2005) O método dos elementos finitos aplicado ao problema de condução de calor. *Publicação do NiCAE* p 40
- Tan Y, Tang K (2024) Evaluate the effect of coarse aggregates on cement hydration heat and concrete temperature modelling using isothermal calorimetry. *Heliyon* 10(19):e38322. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e38322>
- Ulm FJ, Coussy O (1995) Modeling of thermochemomechanical couplings of concrete at early ages. *Journal of Engineering Mechanics (ASCE)* 121(7):785–794
- Ulm FJ, Coussy O (1996) Strength Growth as Chemo-Plastic Hardening in Early Age Concrete. *Journal of Engineering Mechanics (ASCE)* 122(12):1123–1132
- Ulm FJ, Coussy O (1998) Couplings in early-age concrete: from material modeling to structural design. *International Journal of Solids and Structures* 35(31):4295–4311. [https://doi.org/10.1016/S0020-7683\(97\)00317-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7683(97)00317-X), URL <http://www.ingentaconnect.com/content/els/00207683/1998/00000035/00000031/art00317>
- U.S. Bureau of Reclamation (1949) Cooling of Concrete Dams, Part VII – Cement and Concrete Investigations, Boulder Canyon Project, Final Reports. U. S. Bureau of Reclamation
- Van Breugel K (1991) Simulation of Hydration and Formation of Structure in Hardening Cement-Based Materials. PhD thesis, Delft University of Technology, Delft
- Vieira DdS, Coelho NdA (2025) Utilização do Método dos Elementos Finitos no estudo térmico em estruturas de concreto massa construídas em camadas. *Revista Semiárido De Visu* 13(3):1045–1064. <https://doi.org/10.31416/rsdv.v13i3.1074>, URL <https://doi.org/10.31416/rsdv.v13i3.1074>
- Xiong X, van Breugel K (2001) Isothermal calorimetry study of blended cements and its application in numerical simulations. *HERON* 16(3)
- Zhang J, Beaudoin JJ (2005) A Discussion of the paper “Application of degree of hydration concept and maturity method for thermovisco-elastic behaviour of early age concrete” by Geert De Schutter. *Cement and Concrete Composites* 27(6):734–735. <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2004.12.001>
- Zhang J, Cusson D, Monteiro P, et al (2008) New perspectives of maturity method and innovative approach for high performance concrete applications. *Cement and Concrete Research* 38(12):1438–1446