



UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA  
CENTRO DE ENERGIAS ALTERNATIVAS E  
RENOVÁVEIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM  
ENERGIAS RENOVÁVEIS



LARISSA MENDES HERMÓGENES ROCHA

AVALIAÇÃO DA TÉCNICA *ANDERSON ACCELERATION* SOBRE O  
PROBLEMA DE CARBONATAÇÃO EM TORRES DE CONCRETO DE  
AEROGERADORES

JOÃO PESSOA - PB

2021

LARISSA MENDES HERMÓGENES ROCHA

**AVALIAÇÃO DA TÉCNICA *ANDERSON ACCELERATION* SOBRE O  
PROBLEMA DE CARBONATAÇÃO EM TORRES DE CONCRETO DE  
AEROGERADORES**

Dissertação apresentada à Universidade Federal da Paraíba, como parte das exigências do Programa de Pós Graduação em Energias Renováveis do Centro de Energias Alternativas e Renováveis, área de concentração em Energias Renováveis, para a obtenção do grau de Mestre.

Orientador: Prof. Dr. Márcio Rodrigo de Araújo Souza

Coorientador: Prof. Dr. Marçal Rosas Florentino Lima Filho

**JOÃO PESSOA - PB**

**2021**

**Catálogo na publicação**  
**Seção de Catalogação e Classificação**

R672a Rocha, Larissa Mendes Hermógenes.

Avaliação da técnica Anderson Acceleration sobre o problema de carbonatação em torres de concreto de aerogeradores / Larissa Mendes Hermógenes Rocha. - João Pessoa, 2021.

63 f. : il.

Orientação: Márcio Rodrigo de Araújo Souza.

Coorientação: Marçal Rosas Florentino Lima Filho.  
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CEAR.

1. Energias renováveis. 2. Anderson Acceleration. 3. Método de Picard. 4. Carbonatação do concreto. 5. Método dos volumes finitos. 6. Torres de concreto. I. Souza, Márcio Rodrigo de Araújo. II. Lima Filho, Marçal Rosas Florentino. III. Título.

UFPB/BC

CDU 620.91(043)



### ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

**ATA nº 80** da Sessão de Defesa Dissertação do Mestrado Acadêmico do Programa de Pós-Graduação em Energias Renováveis do Centro de Energias Alternativas e Renováveis, Universidade Federal da Paraíba.

Ao trigésimo dia do mês de julho de dois mil e vinte e um foi instalada a Banca de Defesa de Dissertação do Mestrado Acadêmico do Programa de Pós-Graduação em Energias Renováveis do Centro de Energias Alternativas em Home Office, as 14h00, via Google Meet ([meet.google.com/djp-bkwc-goi](https://meet.google.com/djp-bkwc-goi)) a que se submeteu a defesa pública de LARISSA MENDES HERMÓGENES ROCHA, matrícula 20191024416, com o título “**AVALIAÇÃO DA TÉCNICA ANDERSON ACCELERATION PARA ACELERAR A CONVERGÊNCIA DO PROBLEMA DE CARBONATAÇÃO EM TORRES DE CONCRETO DE AEROGERADORES**”. A Comissão Examinadora esteve constituída pelos professores: MARCIO RODRIGO DE ARAUJO SOUZA (UFPB), JOAO ALVES DE LIMA (UFPB), MARCAL ROSAS F LIMA FILHO (UFPB) e FERNANDO RAUL LICAPA CONTRERAS (UFPE). Concluídos os trabalhos de apresentação e arguição, o(a) candidato(a) foi **APROVADA** pela Comissão Examinadora. E, para constar, foi lavrada a presente ata, assinada pelos membros da Comissão.

Observações: A candidata tem até 45 dias para aplicar as considerações propostas pela banca examinadora

Membros da Banca Examinadora:

**Profa. Dr. MARCIO RODRIGO DE ARAUJO SOUZA**  
Orientador(a)

**Prof. Dr. JOAO ALVES DE LIMA - UFPB**  
Examinador(a) Interno(a)

**Prof. Dr. MARCAL ROSAS F LIMA FILHO - UFPB**  
Examinador(a) Externo(a)

**Prof. Dr. FERNANDO RAUL LICAPA**  
**CONTRERAS- UFPE**  
Examinador(a) Externo(a)

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela vida.

Aos meus pais, Jamile e Hamilton, pelo amor e apoio incondicionais, e por não medirem esforços para me dar uma boa educação, sem eles nada disso seria possível.

A toda minha família e amigos, pelo suporte emocional, e a meu namorado Victor, que sempre me encoraja e me ajuda a vencer os desafios.

Ao professor Márcio Rodrigo, pela orientação e paciência, e pelas dicas que com certeza vão me acompanhar ao longo do caminho. Aproveito a oportunidade para agradecer a banca avaliadora, os professores Marçal Lima Filho, João Alves e Fernando Contreras pela disponibilidade e contribuição para este trabalho.

Sem deixar de mencionar outras pessoas que de alguma forma contribuíram para este trabalho, como a colega de mestrado Anna Manuella, que me forneceu um material interessantíssimo sobre torres de turbinas eólicas e o professor Rodrigo Ramos (UNIVASF), pelas dicas de Matlab.

Em tempo, agradeço à Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado da Paraíba (FAPESQ), termo de outorga 046/2021 pelo apoio financeiro.

O correr da vida embrulha tudo.  
A vida é assim: esquenta e esfria,  
aperta e daí afrouxa,  
sossega e depois desinquieta.  
O que ela quer da gente é coragem.

**Guimarães Rosa**

## RESUMO

Com a crescente demanda por energia, a capacidade instalada de energia eólica vem crescendo a cada ano. A necessidade de instalar as turbinas em torres mais altas para aproveitar melhor a velocidade dos ventos fez com que o concreto se tornasse uma boa opção como material de construção. Um dos problemas que mais afeta a durabilidade do concreto é a carbonatação, que tem como consequência a destruição da camada protetora nas barras de aço do reforço nas estruturas de concreto armado. Devido ao complexo modelo matemático da carbonatação, métodos numéricos podem ajudar a compreender melhor o fenômeno. Esse trabalho visa resolver numericamente, via Método dos Volumes Finitos, o modelo matemático da carbonatação, e empregando a técnica Anderson *Acceleration* para acelerar a convergência do método iterativo escolhido para resolver o sistema, o método de Picard. Para isto, foi feito o desenvolvimento do modelo matemático bidimensional e de sua formulação numérica, que foi implementada em Matlab®. O desempenho da implementação foi avaliado em um caso *benchmark* da literatura, e em seguida três experimentos numéricos foram utilizados para mostrar o ganho com o uso da técnica de aceleração. Neste trabalho, mostrou-se que a implementação computacional desenvolvida é capaz de produzir soluções em concordância com aquelas presentes na literatura e que Anderson *Acceleration* foi efetivo em diminuir o número de iterações dos exemplos 2D, mas não do *benchmark* 1D.

**Palavras-chave:** Anderson *Acceleration*, Método de Picard, Carbonatação do Concreto, Método dos Volumes Finitos, Torres de Concreto.

## ABSTRACT

With the growing energy demand, the installed capacity of wind energy has grown every year. The need to install the turbines in higher towers to make better usage of the speed of the wind has made concrete a good option as a building material. One of the problems that most affect the durability of concrete is carbonation, which destroys the protective layer in the steel reinforcement bars, in the reinforced concrete structures. Due to the complex mathematical model of carbonation, numerical methods can help to better understand the phenomenon. This work aims to solve numerically, via Finite Volume Method, the mathematical model of carbonation, and to use the Anderson Acceleration technique to accelerate the convergence of the iterative method for solving the system, the Picard's method. To accomplish that the two-dimensional mathematical model and its numerical formulation were developed, which was implemented in Matlab ®. The implementation performance was evaluated using a benchmark case, and further, three numerical experiments were used to show the gain with the acceleration technique. In this work, it was shown that the developed computational implementation is capable of producing solutions in agreement with those in literature and Anderson Acceleration was effective in decreasing the number of iterations of the 2D examples, but not for the 1D benchmark.

**Key-words:** Anderson Acceleration, Picard's Method, Concrete Carbonation, Finite Volume Method, Concrete Towers.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Montagem da torre de concreto. . . . .	14
Figura 2 – Figura esquemática da carbonatação. . . . .	18
Figura 3 – Domínio arbitrário com arranjo <i>cell-centered</i> . . . . .	32
Figura 4 – Pressão parcial de carbono - original . . . . .	38
Figura 5 – Distribuição de íon cálcio - original . . . . .	38
Figura 6 – Dissolução de hidróxido de cálcio - original . . . . .	39
Figura 7 – Produção de carbonato de cálcio - original . . . . .	39
Figura 8 – Pressão parcial de carbono - Anderson Aceleration . . . . .	40
Figura 9 – Distribuição de íon cálcio - Anderson Aceleration . . . . .	40
Figura 10 – Dissolução de hidróxido de cálcio - Anderson Aceleration . . . . .	41
Figura 11 – Produção de carbonato de cálcio - Anderson Aceleration . . . . .	41
Figura 12 – Número de iterações por passo de tempo . . . . .	43
Figura 13 – Geometria do segundo exemplo . . . . .	44
Figura 14 – Malha do segundo exemplo . . . . .	44
Figura 15 – Porosidade inicial . . . . .	45
Figura 16 – Resultados da implementação original . . . . .	45
Figura 17 – Resultados da implementação Anderson Acceleration m=3 . . . . .	46
Figura 18 – Número de iterações com cada m por passo de tempo . . . . .	47
Figura 19 – Número de iterações com cada $\beta_k$ por passo de tempo . . . . .	48
Figura 20 – Viga colapsada . . . . .	48
Figura 21 – Malha do terceiro exemplo . . . . .	49
Figura 22 – Resultados do terceiro exemplo carbonatação natural . . . . .	50
Figura 23 – Resultados da implementação original . . . . .	51
Figura 24 – Resultados da implementação Anderson Acceleration m=11 . . . . .	51
Figura 25 – Resultado número de iterações por passo de tempo . . . . .	52
Figura 26 – Vista lateral da torre mostrando a seção simulada . . . . .	53
Figura 27 – Malha do quarto exemplo . . . . .	54
Figura 28 – Distribuição de porosidade inicial . . . . .	54
Figura 29 – Resultados da implementação original . . . . .	55
Figura 30 – Resultados da implementação Anderson Acceleration m=4 . . . . .	55
Figura 31 – Instante inicial da instabilidade do íon cálcio . . . . .	56
Figura 32 – Resultado número de iterações por passo de tempo . . . . .	57

## LISTA DE SÍMBOLOS

$r_{CH}$	Taxa de reação de neutralização.
$r_D$	Taxa de dissolução.
$\vartheta$	Constante de taxa.
$k_{rch}$	Fator de redução.
$p_c$	Pressão parcial de dióxido de carbono gasoso.
Ca	Concentração de íon cálcio.
s	Grau de saturação.
$\epsilon$	Porosidade do concreto.
$k_s$	Coefficiente de transferência de massa.
$a_s$	Área superficial dos poros do concreto em contato com a água.
$C_{CH}$	Concentração de hidróxido de cálcio sólido.
$V_{CH}$	Volume molar de hidróxido de cálcio sólido.
$\rho_w$	Massa específica da água.
$\vec{u}_w$	Velocidade da água.
k	Permeabilidade do concreto.
$k_{rg}(s)$	Permeabilidade relativa.
$\mu_w$	Viscosidade dinâmica da água.
$p_w$	Pressão da água.
$p_{cap}$	Pressão de capilaridade.
H	Umidade relativa.
R	Constante dos gases ideais.
T	Temperatura.
$M_w$	Massa molar da água.
$\rho_c$	Massa específica do carbono.

$W_c$	Fluxo de massa difusivo do carbono.
$\rho_m$	Densidade da mistura.
$D_c$	Coefficiente de difusão do carbono.
$c_c$	Fração de massa do dióxido de carbono relativo ao gás total.
$f(\epsilon, s)$	Fator de resistência.
$M_c$	Massa molar do carbono.
$W_a$	Fluxo difusivo do cálcio na água líquida.
$D_a$	Coefficiente de difusão do cálcio.
$V_{CaCO_3}$	Volume molar do carbonato de cálcio.
$p$	Pressão do vento.
$\rho_{Ca(OH)_2}$	Massa específica do hidróxido de cálcio.
$v$	Velocidade do vento.
$\Omega$	Domínio arbitrário.
$\Omega_V$	Volumes finitos do domínio.
$\Gamma_L$	Fronteira do volume finito.
$\beta_k$	Parâmetro de amortecimento do Anderson Acceleration.

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>13</b>
1.1	CONTEXTUALIZAÇÃO	13
1.2	JUSTIFICATIVA	14
1.3	OBJETIVOS	15
1.3.1	Objetivo Geral	15
1.3.2	Objetivos Específicos	15
1.4	ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	16
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b>	<b>17</b>
2.1	CARBONATAÇÃO DO CONCRETO	17
2.2	ABORDAGEM NUMÉRICA E COMPUTACIONAL	21
2.2.1	Método dos Volumes Finitos (MVF)	22
2.2.2	Método de Picard	22
2.2.3	Anderson <i>Acceleration</i>	24
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>28</b>
3.1	MODELO MATEMÁTICO	28
3.1.1	Conservação de massa da água	29
3.1.2	Conservação de massa do dióxido de carbono	30
3.1.3	Conservação de massa do íon cálcio	31
3.1.4	Variação da porosidade	31
3.2	FORMULAÇÃO NUMÉRICA	31
3.2.1	Forma discreta da equação da conservação de massa da água	32
3.2.2	Forma discreta da equação da conservação de massa do dióxido de carbono	33
3.2.3	Forma discreta da equação da conservação de massa do íon cálcio	34
3.2.4	Forma discreta da equação de variação da porosidade	35
3.3	IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL	36
<b>4</b>	<b>EXPERIMENTOS NUMÉRICOS</b>	<b>37</b>
4.1	CARBONATAÇÃO ACELERADA 1D	37
4.2	CARBONATAÇÃO NATURAL 2D DO CANTO DE UMA ESTRUTURA	43
4.3	CARBONATAÇÃO 2D DE UMA VIGA	48
4.4	CARBONATAÇÃO 2D NA SEÇÃO DE UMA TORRE	52
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>58</b>
5.1	CONSIDERAÇÕES FINAIS	58
5.2	TRABALHOS FUTUROS	59

REFERÊNCIAS .....	60
-------------------	----

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO

A energia eólica é usada há milhares de anos para funções como bombear água e moer grãos, e nas últimas décadas tornou-se também uma excelente alternativa na geração de eletricidade (JAIN, 2011).

Suas vantagens estão relacionadas ao meio ambiente, por sua produção ser livre de emissão de gases do efeito estufa, e ao custo, por ser uma das fontes mais baratas de energia renovável. Entretanto, também existem algumas desvantagens, como a variabilidade do recurso eólico, a necessidade de se investir em linhas de transmissão e o impacto ambiental, que deve ser mitigado quando possível (JAIN, 2011).

A demanda global por energia é crescente, e desde os anos 1970 com a crise do petróleo, o interesse por fontes de energia alternativas e renováveis aumentou, acompanhando o desenvolvimento tecnológico na área (PINTO, 2013). Isso levou ao projeto de turbinas eólicas muito maiores e com maior capacidade de produção, paralelamente a um rápido crescimento na indústria, favorecido por políticas de incentivo ao uso de fontes renováveis (ENEVOLDSEN; XYDIS, 2019).

No Brasil, a energia eólica alcançou a marca de 19,1 GW de potência instalada em 726 usinas no ano de 2021, representando um crescimento de 1,9% com relação ao ano anterior, segundo o boletim Infovento, produzido pela Associação Brasileira de Energia Eólica (ABEEólica), o que tornou a energia eólica responsável por 10,8% da matriz energética brasileira (ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENERGIA EÓLICA, 2021).

As torres de suporte das turbinas são partes críticas na infraestrutura da energia eólica, e seu projeto e manutenção representam desafios de engenharia (WILLIS *et al.*, 2018). É comum que as torres sejam feitas de tubos de aço devido a sua rápida construção, no entanto, com a crescente demanda de energia, torres mais altas são requeridas, acarretando no aumento do diâmetro dos segmentos e conseqüentemente gerando problemas no transporte até o sítio (de Lana *et al.*, 2021).

As torres fabricadas em concreto surgem como alternativa para este problema, e possuem vantagens sobre as de aço, entre elas, maior tolerância a cargas dinâmicas, estabilidade para resistir a tombamento e controle da frequência natural da torre, além disso, o concreto pré-moldado é um material durável quando comparado ao aço (de Lana *et al.*, 2021).

No setor eólico, as torres de concreto caracterizam-se pelo uso de concreto *in situ*, ou alternativamente, segmentos de concreto pré fabricado, nesse caso, as unidades

são transportadas ao sítio na forma de anéis completos ou de segmentos, a depender do diâmetro da seção e do peso das unidades individuais para levar em conta a facilidade de transporte e manipulação; as unidades são então empilhadas usando guindaste e as seções da torre recém erguidas são tensionadas usando tendões (TRICKLEBANK *et al.*, 2007).

Um exemplo desses segmentos e da montagem no sítio podem ser vistos na figura 1.

**Figura 1** – Montagem da torre de concreto.

(a) Segmento de concreto pré fabricado.



(b) Empilhamento dos segmentos.



Fonte: Acervo pessoal.

## 1.2 JUSTIFICATIVA

Com o crescimento do mercado de energia eólica, turbinas de maior capacidade instalada precisaram ser montadas em torres mais altas, de modo a aproveitar a maior velocidade e condições uniformes do vento a essas altitudes (JIN; LI, 2019), com isso, torna-se necessário fabricar torres com maior rigidez estrutural, para suportar o peso da turbina e as forças de flexão pela ação do vento, e um material que cumpre bem esses requisitos é o concreto (TRICKLEBANK *et al.*, 2007).

Uma vez que o concreto é um material permeável, pode ocorrer penetração de substâncias agressivas que comprometem sua durabilidade, como ocorre na carbonatação, que tem como consequência a destruição da camada protetora nas barras de aço do reforço, nas estruturas de concreto armado (ZHANG, 2016).

Assim, é importante diagnosticar a deterioração das estruturas de concreto, para avaliar suas condições e tomar ações corretivas, pois sua falha prematura aumenta os custos de reparo e manutenção e compromete a segurança (SAETTA; VITALIANI, 2004).

Como a carbonatação é um processo lento, os experimentos em condições normais de exposição levam tipicamente de 5 a 10 anos, às vezes mais, para serem realizados (PAPADAKIS; VAYENAS; FARDIS, 1989). Por isso, muitas vezes é utilizada a condição

acelerada, aumentando-se a concentração de dióxido de carbono a qual a estrutura está submetida (VISSER, 2014).

No entanto, sabe-se que experimentos podem ser onerosos, logo torna-se interessante estudar a modelagem matemática e a formulação numérica para simulação do problema. No que diz respeito ao modelo matemático da carbonatação, as equações apresentam forte acoplamento, não linearidades e períodos de interesse longos (ZHANG, 2016). Para tratar essas questões numericamente, um método de discretização, como é o caso do Método dos Volumes Finitos, precisa ser empregado. O tratamento das não linearidades na implementação fica a cargo da estratégia de Picard.

O método de Picard pode apresentar convergência lenta, nesse contexto, métodos de aceleração podem mitigar esse inconveniente e em alguns casos, até divergência, e o Anderson *Acceleration*, em particular, já se mostrou eficaz em uma ampla faixa de aplicações (WALKER; NI, 2011).

Diante do exposto, a contribuição desse trabalho está em aplicar a técnica Anderson *Acceleration* no problema da carbonatação do concreto, visto que envolve equações com fortes não linearidades e acoplamentos, e avaliar o uso da técnica.

## 1.3 OBJETIVOS

### 1.3.1 Objetivo Geral

Esse trabalho tem como objetivo geral resolver, através do Método dos Volumes Finitos, o modelo matemático da carbonatação, bem como avaliar o efeito do emprego da técnica Anderson *Acceleration* na convergência da solução iterativa.

### 1.3.2 Objetivos Específicos

- Realizar uma revisão bibliográfica a respeito do fenômeno de carbonatação e dos métodos numéricos;
- Discretizar as equações do modelo matemático da carbonatação, a saber: A conservação de massa do dióxido de carbono, a conservação de massa da água, a conservação de massa do íon cálcio, e a variação de porosidade;
- Aplicar o Método de Picard para resolver o sistema de equações resultante da discretização;
- Aplicar a técnica Anderson *Acceleration* ao Método de Picard implementado;
- Avaliar o número de iterações da solução utilizando o Anderson *Acceleration* e comparar com a situação quando não se utiliza a técnica através de experimentos numéricos.



## 1.4 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

O presente capítulo é introdutório, a seguir, o trabalho foi organizado da seguinte maneira: No capítulo 2 consta a fundamentação teórica, onde são apresentados os principais conceitos referentes à pesquisa e a revisão de literatura dos temas essenciais ao trabalho; no capítulo 3, a metodologia se divide no desenvolvimento do modelo matemático do problema, na obtenção da formulação numérica e na implementação computacional; o capítulo 4 apresenta resultados de exemplos numéricos e o capítulo 5 aborda a conclusão e as considerações finais.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

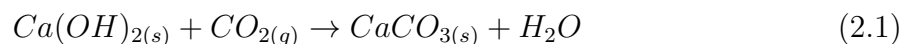
### 2.1 CARBONATAÇÃO DO CONCRETO

O concreto é um material heterogêneo e complexo, composto essencialmente de um meio de ligação, usualmente uma mistura de cimento e água, no qual são inseridas partículas de agregados, como areia e brita. O cimento, por si só, não serve como meio de ligação, mas adquire essa propriedade como resultado do processo de hidratação, no qual são produzidos silicatos de cálcio hidratados (C-S-H), responsáveis pela característica adesiva (MEHTA; MONTEIRO, 2005).

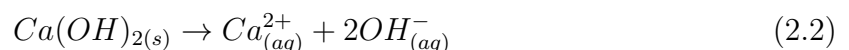
A durabilidade do concreto é fortemente influenciada pela sua permeabilidade, que pode ser definida em termos gerais como a facilidade de um íon, molécula ou fluido se mover através do concreto, e está relacionada com a estrutura de poro. Porosidade, por sua vez, é uma medida da proporção do material representada por vazios (RICHARDSON, 2002).

A permeabilidade influencia a passagem de mecanismos que ameaçam a durabilidade. Tendo isso em vista, o problema mais comum no concreto armado é a corrosão do reforço interno, que pode ser causada por carbonatação ou pela entrada de cloreto na estrutura (RICHARDSON, 2002).

Em termos gerais, pode-se definir carbonatação como a reação entre o dióxido de carbono ( $CO_2$ ) presente no ar, e que se difunde nos poros do concreto, e o hidróxido de cálcio ( $Ca(OH)_2$ ) da massa de concreto, formando carbonato de cálcio ( $CaCO_3$ ) insolúvel e água, a figura 2 ilustra esse processo. A reação química que descreve o processo em questão pode ser escrita como (PAPADAKIS; VAYENAS; FARDIS, 1991b; ZHANG, 2016):



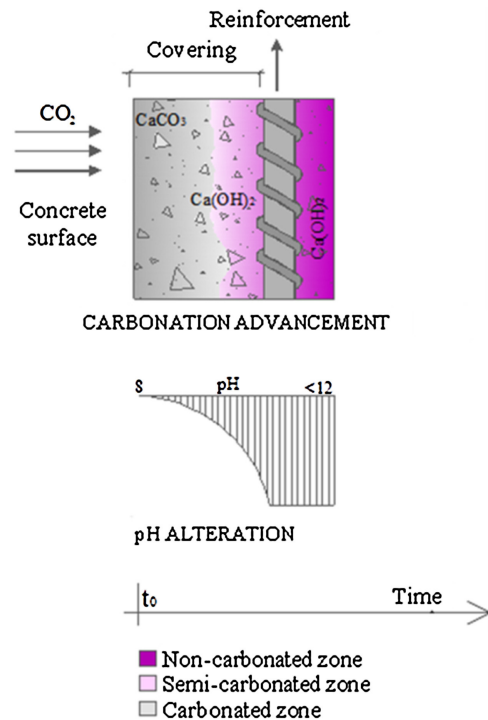
Mais precisamente, a reação de dissolução do  $Ca(OH)_2$  na água é dada por:



Então, alternativamente, a reação de carbonatação pode ser vista como a reação de neutralização:



**Figura 2** – Figura esquemática da carbonatação.



Fonte: Adaptado de Possan *et al.* (2017)

Como mostrado pelas equações químicas, à medida que a carbonatação prossegue, os hidróxidos em solução presentes nos poros do concreto são convertidos em carbonatos sólidos e não solúveis, que preenchem os poros, diminuindo a porosidade do concreto. Sabe-se que essa diminuição na porosidade se aplica ao cimento Portland, mas não necessariamente a todos os tipos de cimento, além disso, ela pode ter influência positiva em algumas propriedades do concreto, como o aumento da resistência à compressão, por outro lado, como consequência negativa, tem-se a diminuição da ductilidade (TORRES *et al.*, 2017).

Uma das consequências mais importantes da carbonatação é a redução do pH da estrutura, de valores entre 12,5 e 13,5 para valores abaixo de 9 (ZHANG, 2016); isso pode levar à corrosão das barras de aço que reforçam o concreto armado, visto que elas são protegidas por uma fina camada de óxido mantida pela alcalinidade do concreto ao redor, que por sua vez, deve-se ao  $Ca(OH)_2$  produzido durante a reação dos componentes do cimento com a água (PAPADAKIS; VAYENAS; FARDIS, 1989).

Essa mudança no pH tem efeito na durabilidade da estrutura, pois a corrosão das barras de aço diminui a área da seção transversal disponível do reforço, reduzindo então, sua resistência (PAPADAKIS; VAYENAS; FARDIS, 1989). Outro resultado prejudicial da carbonatação é a deformação da estrutura, que altera a distribuição de tensão no concreto, produzindo pequenas trincas que com o tempo podem se aprofundar e causar dano à estrutura (ZHANG, 2016).

A modelagem matemática da carbonatação tem sido extensamente desenvolvida por diversos autores. Papadakis, Vayenas e Fardis (1989) desenvolveram um modelo matemático unidimensional, baseado em balanços de massa para  $CO_2$  gasoso,  $Ca(OH)_2$  sólido,  $Ca(OH)_2$  dissolvido,  $C-S-H$ , e silicatos anidros, que sob certas simplificações levava a uma expressão analítica para a evolução da frente de carbonatação (região que sofreu carbonatação) com o tempo, em termos da composição do cimento e do concreto e das condições ambientes.

Em Papadakis, Vayenas e Fardis (1991a), o modelo matemático desenvolvido anteriormente pelos mesmos autores foi estendido para incluir a faixa completa de umidade relativa, e também foram apresentados os resultados do experimento da carbonatação acelerada usando análise termogravimétrica para medir as concentrações sólidas de  $Ca(OH)_2$  e  $CaCO_3$ .

Como modelos unidimensionais tendem a subestimar a profundidade da carbonatação, Saetta, Schrefler e Vitaliani (1995) desenvolveram um modelo bidimensional, com equações diferenciais para fluxo de umidade, calor e concentração de  $CO_2$  em materiais porosos, e sua aplicabilidade foi testada na simulação do canto de uma estrutura de concreto, com uma barra de reforço, empregando o Método dos Elementos Finitos.

Adicionalmente, Steffens, Dinkler e Ahrens (2002) desenvolveram um modelo envolvendo equações de umidade, calor e  $CO_2$ ; a equação do balanço de massa do  $CO_2$  é acoplada com energia térmica e água. O modelo foi resolvido usando Elementos Finitos e um exemplo 2D foi apresentado para mostrar a aplicabilidade do modelo a problemas reais.

Em Saetta e Vitaliani (2004) a influência de alguns parâmetros nas equações governantes do modelo desenvolvido em 1995 foi analisada, a saber: o conteúdo máximo de  $CaCO_3$  (que depende principalmente da composição do concreto), difusão de  $CO_2$ , taxa de carbonatação ideal (taxa com a qual a reação de carbonatação acontece em condições ideais) e hidratação do cimento; vale citar que os autores concluíram que um dos fatores mais influentes é a concentração de  $CO_2$  no ar. Em seguida, em Saetta e Vitaliani (2005) foram realizados testes numéricos e experimentais para demonstrar a aplicação do modelo matemático.

Diferentemente dos modelos desenvolvidos até então, Bary e Sellier (2004) foram pioneiros em incluir o balanço de massa de íon cálcio contido na solução de poro, assumindo que as espécies responsáveis por definir o fenômeno da carbonatação eram água,  $CO_2$  gasoso e cálcio. As equações governantes foram discretizadas aplicando-se uma linearização clássica pelo método de diferenças finitas para realizar a simulação de uma parede de concreto sujeita a carbonatação acelerada, e os resultados da simulação foram comparados com resultados experimentais, mostrando concordância aceitável em termos de profundidade de carbonatação.

Uma abordagem alternativa foi proposta por Park (2008), que desenvolveu um modelo levando em conta que metade do dióxido de carbono reage com o hidróxido de cálcio enquanto que a outra metade reage com o silicato de cálcio hidratado. O autor estabeleceu equações para analisar a reação de metade do  $CO_2$  com o  $Ca(OH)_2$ , e também a diminuição da porosidade causada pela produção de  $CaCO_3$  e a reação entre  $CO_2$  e  $C-S-H$  foram consideradas.

As condições ambientais que podem influenciar na taxa de carbonatação, tais como temperatura, umidade relativa, velocidade e direção do vento foram analisadas por Li *et al.* (2011), através de experimentos de carbonatação acelerada, a partir dos quais concluiu-se que a taxa de carbonatação aumenta com o aumento da temperatura e diminui com o aumento da umidade relativa, além disso, com relação aos efeitos do vento, o aumento da velocidade do vento leva ao aumento da velocidade de carbonatação, o que também é percebido para o vento na direção perpendicular à estrutura.

Talukdar, Banthia e Grace (2012), por sua vez, focaram nos efeitos que o aumento da concentração de  $CO_2$  na atmosfera produz na carbonatação, e desenvolveram um modelo que levava em conta a temperatura, a umidade e a variação da concentração de  $CO_2$  com o tempo.

Como muitos experimentos de carbonatação são feitos sob condições aceleradas, Visser (2014) discutiu os efeitos do processo de aceleração da carbonatação através do aumento da concentração de  $CO_2$ , e mostrou que isso não causa alteração no processo em si, então os experimentos acelerados são válidos.

Um efeito que pode ter influência na carbonatação é a ação do vento na estrutura, que foi estudada por Zou *et al.* (2015), o autor estabeleceu um modelo matemático que levava em conta a transferência de massa induzida pela diferença de pressão causada pelo vento em estruturas de concreto, com o objetivo de incluir a transferência de massa por convecção no modelo, em vez de apenas por difusão, como faziam os modelos anteriores.

Similarmente a Bary e Sellier (2004), Zhang (2016) modelou o processo de carbonatação baseado nos balanços de massa para água, dióxido de carbono e íon cálcio, e na variação da porosidade, com a diferença em relação ao modelo de Bary e Sellier (2004), da taxa de dissolução, que o autor definiu como sendo proporcional à diferença entre as concentrações saturada e instantânea de cálcio. O autor obteve a formulação numérica pelo Método dos Volumes Finitos.

Torres *et al.* (2017) propuseram um modelo matemático simplificado para a carbonatação, como sendo um balanço de massa entre  $CO_2$ ,  $C-S-H$  e  $Ca(OH)_2$ , e levando em consideração a variação de porosidade com o tempo. Este modelo foi resolvido numericamente e os resultados foram comparados com experimentos de carbonatação acelerada realizados pelos próprios autores, e experimentos de campo, reportados por outros autores.

Braga *et al.* (2018) estenderam para um domínio bidimensional o modelo matemático de Zhang (2016). As equações foram discretizadas utilizando o Método dos Volumes Finitos, com um esquema de Euler implícito para o tempo. Foram realizados testes numéricos com a formulação desenvolvida, primeiramente para um domínio unidimensional, e em seguida em duas dimensões sob carbonatação natural.

Mais recentemente, Li, Li e Wang (2020) apresentaram modelos matemáticos descrevendo a difusão do dióxido de carbono no concreto usando a Lei de Fick, e considerando o efeito da carbonatação modelada como um termo consumidor de  $CO_2$  na equação de difusão. Três modelos foram apresentados, o modelo de difusão com carbonatação geral, o modelo de difusão com carbonatação rápida e o modelo de difusão com fronteira móvel.

AL-Ameeri *et al.* (2021) desenvolveram um modelo baseado na difusão do  $CO_2$  e na reação do  $Ca(OH)_2$ , combinando fatores ambientais e climáticos como concentração de  $CO_2$ , temperatura e umidade relativa, com fatores internos como as propriedades do concreto e a presença de trincas. O modelo foi resolvido numericamente em um exemplo de carbonatação em duas geometrias, uma apresentando uma trinca e a outra não, para avaliar a influência da presença da trinca.

## 2.2 ABORDAGEM NUMÉRICA E COMPUTACIONAL

Como se pode inferir, a análise do problema de carbonatação em torres de concreto requer a solução de um sistema de equações diferenciais parciais (EDP's), não lineares, que podem ser resolvidas usando algumas estratégias, dentre elas, os métodos numéricos.

Essa classe de métodos se distingue dos métodos analíticos e experimentais pela complexidade das equações e das geometrias que pode resolver, aproximando-se mais do problema real, porém sem os custos que envolveriam experimentos (MALISKA, 2004).

Em engenharia, o uso de técnicas de simulação numérica se difundiu por diversas razões, entre elas podem ser mencionadas: A necessidade de prever performance de novos produtos; o custo envolvido na realização de experimentos, e em muitos casos, a impossibilidade de realizá-los; a quantidade de informações que se pode obter a partir de uma simulação e o avanço na capacidade de processamento e armazenamento dos computadores (LÖHNER, 2008).

Resolver uma EDP numericamente envolve encontrar aproximações para as derivadas, para isto, utilizam-se os chamados esquemas de discretização. Existem três principais técnicas de discretização: Método das Diferenças Finitas (MDF), Método dos Elementos Finitos (MEF) e Método dos Volumes Finitos (MVF) (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995; LÖHNER, 2008).

O MDF aproxima derivadas de uma equação diferencial a uma expressão algébrica utilizando séries de Taylor truncadas, em termos de cada ponto da malha e pontos

vizinhos, esta técnica é mais aplicada em problemas que possuem geometrias com moderado grau de complexidade, com malhas estruturadas e elementos uniformes (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995; LÖHNER, 2008).

O MEF tem sido extensamente aplicado à análise estrutural, seu princípio básico é utilizar funções simples por partes para descrever variações nas incógnitas, e em seguida minimizar os erros, multiplicando por funções peso e integrando, obtendo-se assim, um conjunto de equações algébricas (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995). Uma atenção especial será dada ao MVF, devido ao escopo do presente trabalho.

### **2.2.1 Método dos Volumes Finitos (MVF)**

No MVF, utiliza-se um balanço de conservação da propriedade de interesse no volume elementar para obter equações aproximadas. Esse método sobressaiu-se ao MDF como ferramenta nas áreas de escoamento de fluidos e transferência de calor, principalmente pela possibilidade de associar a física do problema com a matemática e pela capacidade de resolver problemas em geometrias irregulares (MALISKA, 2004).

O MVF possui algumas características importantes que contribuem para sua ampla aplicabilidade. Uma das mais relevantes é que o método conserva as variáveis transportadas de um volume discreto para o outro, ou seja, o MVF é conservativo. Isso ocorre porque os fluxos são integrados na face do elemento (ou volume finito), logo, em uma face compartilhada por dois elementos, o fluxo deixando um elemento será exatamente igual ao fluxo entrando no outro elemento pela mesma face (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016).

Além disso, o MVF apresenta alta flexibilidade como método de discretização, sobretudo devido ao fato desta ser realizada diretamente no espaço físico, sem que o sistema de coordenadas precise ser transformado em computacional. Adicionalmente, o método dos volumes finitos preserva a física dos problemas modelados, o que também contribui para sua popularização e ampla faixa de aplicações (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016).

### **2.2.2 Método de Picard**

Uma equação diferencial, ao ser discretizada, dá origem a uma equação algébrica que pode ser linear ou não e pode ser resolvida através de métodos diretos ou iterativos.

O método de Picard é um exemplo de método do tipo iterativo para resolver sistemas de equações algébricas não lineares. Conhecido também como iteração de ponto fixo, iteração de Richardson, ou método da substituição sucessiva (KELLEY, 2018), esse método possui a vantagem de não necessitar do cálculo da matriz Jacobiana, como é o caso do método de Newton (LIPNIKOV; SVYATSKIY; VASSILEVSKI, 2013).

Nesse sentido, uma ferramenta alternativa que também não exige solução de matriz Jacobiana é o método *Jacobian-free Newton-Krylov* (JFNK). O JFNK é uma combinação entre o método de Newton, como método iterativo não linear, e métodos do subespaço de Krylov, para resolver as equações de correção de Newton; neste método, a taxa de convergência não linear dos métodos da família Newton pode ser alcançada sem a complexidade de resolver a matriz Jacobiana (KNOLL; KEYES, 2004).

Como uma técnica iterativa é usada para resolver as equações de correção de Newton, não é requerida a solução exata do sistema linear, resultando no algoritmo chamado de método de Newton "inexato" (KNOLL; KEYES, 2004). Por causa dessa natureza inexata, a positividade da solução não é garantida, por exemplo no caso de concentrações de espécies, o que pode levar à falha do cálculo (VELDHUIZEN; VUIK; KLEIJN, 2010). O método de Picard, por sua vez, preserva a não negatividade da solução em cada iteração (LIPNIKOV; SVYATSKIY; VASSILEVSKI, 2013).

O algoritmo básico do método de Picard exige que as equações sejam escritas na forma de problemas de ponto fixo. Muitas equações não lineares podem ser formuladas dessa maneira, que tem a forma (KELLEY, 2018):

$$x = G(x) \quad (2.4)$$

Onde  $G$  é o mapa de ponto fixo, que pode ser não linear. Uma solução  $x$  da equação (2.4) é chamada de ponto fixo do mapa  $G$ , e o processo iterativo é dado por (KELLEY, 2018):

$$x_{n+1} = G(x_n) \quad (2.5)$$

Onde  $n$  é o número da iteração.

O método de Picard, quando comparado com o método de Newton, é relativamente mais fácil de implementar, porém uma desvantagem é que ele possui convergência linear, que pode ser indesejavelmente lenta (AN; JIA; WALKER, 2017).

Para mitigar isso, podem ser utilizadas técnicas de aceleração da convergência, a exemplo dos chamados Métodos de Extrapolação de Vetores, como o *Minimal Polynomial Extrapolation* (MPE) e o *Reduced Rank Extrapolation* (RRE), que têm sido usados com sucesso como aceleradores para iterações de ponto fixo em diversas áreas da ciência e da engenharia (SIDI, 2012).

Pertencente a outra família de métodos, há o Pullay *mixing*, também conhecido como *Direct Inversion on the Iterative Subspace* (DIIS), um dos esquemas mais populares para aceleração de convergência em iterações de ponto fixo e que representa uma variante específica de um método quasi-Newton, o método de Broyden (BANERJEE; SURYANARAYANA; PASK, 2016). Nessa mesma família encontra-se o Anderson *Acceleration*, também conhecido como Anderson *mixing* (WALKER; NI, 2011), que devido ao escopo do trabalho, será detalhado na próxima subseção.



### 2.2.3 Anderson Acceleration

Com o objetivo de resolver numericamente equações integrais não lineares, Anderson (1965) propôs um procedimento para compensar algumas das desvantagens das técnicas tradicionais, utilizadas na solução iterativa do sistema de equações no qual o problema se transforma. O autor chegou a uma classe de procedimentos que aceleravam a convergência de sequência de vetores iterativos e que mostravam ser úteis também em outros contextos.

A partir daí, o método passou a ser largamente empregado em cálculos de estrutura eletrônica, onde era chamado de Anderson *mixing*. Em seu trabalho, Walker e Ni (2011) chamam a técnica adequadamente de Anderson *Acceleration* e essa é a forma como é mais amplamente conhecida. Os autores ressaltaram a utilidade do método em acelerar iterações de ponto fixo, mostrando como sua aplicação em problemas lineares é realizada de forma similar ao Método do Resíduo Mínimo Generalizado (GMRES), discutindo considerações práticas na implementação e realizando experimentos numéricos para ilustrar a performance do método.

O algoritmo básico do Anderson *Acceleration* no método de Picard tem a seguinte forma:

---

**Algoritmo 1:** Anderson *Acceleration* do Método de Picard (WALKER, 2011)

---

1. Dados a aproximação inicial do vetor de solução  $x_0$  e a profundidade de aceleração máxima  $m \geq 1$
2. Fazer  $x_1 = G(x_0)$ , onde  $G$  é o mapa do ponto fixo
3. **Para**  $k = 1, 2, \dots$
4. Fazer  $m_k = \min\{m, k\}$
5. Fazer  $F_k = (f_{k-m_k}, \dots, f_k)$ , onde  $f_i = G(x_i) - x_i$  é o vetor de resíduos
6. Determinar  $\alpha^{(k)} = (\alpha_0^{(k)}, \dots, \alpha_{m_k}^{(k)})^T$  que resolve:

$$\min_{\alpha=(\alpha_0, \dots, \alpha_{m_k})^T} \|F_k \alpha\|_2 \mid \sum_{i=0}^{m_k} \alpha_i = 1$$

7. Fazer

$$x_{k+1} = \sum_{i=0}^{m_k} \alpha_i^{(k)} G(x_{k-m_k+i})$$


---

Adicionalmente, a formulação original permite um passo mais geral:

$$x_{k+1} = (1 - \beta_k) \sum_{i=0}^{m_k} \alpha_i^{(k)} x_{k-m_k+i} + \beta_k \sum_{i=0}^{m_k} \alpha_i^{(k)} G(x_{k-m_k+i}) \quad (2.6)$$

Onde  $\beta_k > 0$ . Na prática,  $\beta_k$  é um parâmetro de amortecimento,  $0 < \beta_k \leq 1$ , usado para melhorar a convergência, reduzindo o tamanho do passo (WALKER, 2011). No restante dessa discussão, será adotado  $\beta_k = 1$  para simplificação, que torna a expressão de  $x_{k+1}$  idêntica àquela do Algoritmo 1.

Neste algoritmo, o problema dos mínimos quadrados sujeito a uma restrição precisa ser resolvido a cada iteração. Em Walker (2011), esse problema é transformado em uma versão sem restrição, que é de solução direta usando decomposição QR, por exemplo. Nesta transformação, é introduzida a notação  $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$ , com  $i = k - m_k, \dots, k - 1$  e  $F_k = (\Delta f_{k-m_k}, \dots, \Delta f_{k-1})$ .

Então o problema dos mínimos quadrados é equivalente a:

$$\min_{\gamma=(\gamma_0, \dots, \gamma_{m_k-1})^T} \|f_k - F_k \gamma\|_2 \quad (2.7)$$

Onde  $\alpha$  e  $\gamma$  se relacionam por:

$$\alpha_i = \begin{cases} \gamma_0, & i = 0 \\ \gamma_i - \gamma_{i-1}, & 1 \leq i \leq m_k - 1 \\ 1 - \gamma_{m_k-1}, & i = m_k \end{cases}$$

Se a solução da equação (2.7) é dada por  $\gamma^{(k)} = (\gamma_0^{(k)}, \dots, \gamma_{m_k-1}^{(k)})^T$ , então tem-se que:

$$x_{k+1} = G(x_k) - \sum_{i=0}^{m_k-1} \gamma_i^{(k)} [G(x_{k-m_k+i+1}) - G(x_{k-m_k+i})] = G(x_k) - \chi_k \gamma^{(k)} \quad (2.8)$$

Onde  $\chi_k = (\Delta G_{k-m_k}, \dots, \Delta G_{k-1})$ , com  $\Delta G_i = G(x_{i+1}) - G(x_i)$ ,  $i = k - m_k, \dots, k - 1$ .

Dessa forma, o algoritmo pode ser reformulado como:

**Algoritmo 2:** Anderson *Acceleration* reformulado (WALKER, 2011)

1. Dados a aproximação inicial do vetor de solução  $x_0$  e a profundidade de aceleração máxima  $m \geq 1$
2. Fazer  $x_1 = G(x_0)$ , onde  $G$  é o mapa do ponto fixo
3. **Para**  $k = 1, 2, \dots$

4. Fazer  $m_k = \min\{m, k\}$
5. Determinar  $\gamma^{(k)} = (\gamma_0^{(k)}, \dots, \gamma_{m_k-1}^{(k)})^T$  que resolve:

$$\min_{\gamma=(\gamma_0, \dots, \gamma_{m_k-1})^T} \|f_k - F_k \gamma\|_2$$

6. Fazer

$$x_{k+1} = G(x_k) - \chi_k \gamma^{(k)}$$

Em alguns problemas, é importante que a positividade da solução seja preservada por causa de restrições físicas, no entanto, não é necessariamente possível garantir que a iteração do Anderson *Acceleration* preserve a positividade porque alguma solução do problema dos mínimos quadrados pode ser negativa (AN; JIA; WALKER, 2017). Em seu trabalho, An, Jia e Walker (2017) propuseram uma modificação no algoritmo, caso a solução violasse a restrição física.

Potra e Engler (2013) deram uma caracterização completa do comportamento do Anderson *Acceleration* em problemas lineares, estendendo os resultados de Walker e Ni (2011) para parâmetros de mistura não nulos em geral. O parâmetro de mistura é utilizado no método para misturar a iteração anterior e a iteração do novo ponto fixo. O trabalho também investigou o Anderson *Acceleration* "ótimo", onde o parâmetro de mistura é escolhido em cada passo para minimizar o resíduo.

A primeira análise da convergência do Anderson *Acceleration* para problemas lineares e não lineares foi feita por Toth e Kelley (2015), no entanto, esta análise não foi suficiente para provar que a técnica acelerava a convergência. Foi em Evans *et al.* (2020) que realizou-se um estudo teórico da melhoria da taxa de convergência. Os autores mostraram que o Anderson *Acceleration* melhora a taxa de convergência de iterações de ponto fixo linearmente convergentes, no entanto, quando utilizado com métodos de convergência quadrática, a mesma é desacelerada.

A técnica tem se mostrado eficaz em diversas aplicações. A exemplo de Lipnikov, Svyatskiy e Vassilevski (2013), que analisaram o uso de Anderson *Acceleration* no método de Picard na solução de sistemas de equações algébricas não lineares que aparecem na discretização, utilizando um esquema de volumes finitos não linear, das equações de advecção-difusão em regime permanente. Os autores propuseram um método de Picard modificado, em dois passos, fazendo uso de variáveis auxiliares, realizando, em seguida, experimentos numéricos para comparar a convergência do Anderson *Acceleration* com o método de Picard. Concluiu-se que a aceleração geral foi de duas vezes para problemas dominados por advecção e cinco vezes para problemas dominados por difusão.

Willert, Taitano e Knoll (2014) mostraram que Anderson *Acceleration* pode não apenas aumentar a taxa de convergência das iterações de Picard, mas torná-la mais robusta. Realizando dois problemas de teste, um para a equação do transporte de nêutrons com fonte fixa, e outro na física de plasma para o sistema eletrostático Vlasov-Ampère, notou-se que a convergência acontece mais rapidamente do que utilizando somente a iteração de Picard para ambos os problemas, e para o último, permite aumentar o tamanho do passo de tempo. Além disso, os autores perceberam que o Anderson *Acceleration* pode ser combinado com outros métodos de aceleração para torná-lo mais eficiente.

Alguns trabalhos também mostram a eficácia do Anderson *Acceleration* para resolver equações fortemente não lineares, como feito em An, Jia e Walker (2017), onde a técnica foi utilizada para acelerar o método de Picard na resolução de equações do tipo radiação-difusão. Os resultados numéricos obtidos mostram que comparado com o método de Picard não acelerado, o Anderson *Acceleration* pode reduzir o número de iteração em pelo menos metade.

No trabalho de Pollock, Rebholz e Xiao (2019), foi analisada a aplicação de Anderson *Acceleration* no método de Picard para resolver as equações de Navier-Stokes incompressíveis em regime permanente. Para mostrar a convergência melhorada, foram realizados experimentos numéricos com o problema da cavidade em 2D e 3D, variando-se o número de Reynolds, nos quais autores encontraram uma melhora expressiva com o uso da técnica de aceleração.

Su, Dong e Wu (2019) propuseram usar a técnica no método de Picard para resolver o sistema não linear resultante do esquema de volumes finitos não linear para problemas de difusão anisotrópica tridimensional. Foram realizados testes numéricos para demonstrar a eficiência do esquema proposto, e com isso concluiu-se que a convergência e precisão da solução numérica podem variar com as propriedades iniciais e com a malha computacional.

Zhou, Sheng e Yuan (2020) propuseram um esquema de volumes finitos preservando o Princípio do Máximo Discreto para a equação da condução do calor em malhas distorcidas. Os autores também propuseram o que chamaram de Anderson *Acceleration* Modificado (MAA), onde o problema de minimização foi modificado para minimizar os resíduos, pois notou-se que o Anderson *Acceleration* clássico não apresentava boa estabilidade em alguns experimentos numéricos, especialmente em malhas severamente distorcidas. Foi encontrado que a taxa de convergência do MAA era sete vezes a da iteração de Picard e cinco vezes a do Anderson clássico.

Até o momento, não foram encontradas referências de aplicação do Anderson *Acceleration* no problema de carbonatação do concreto, o que mostra a originalidade do presente trabalho.

### 3 METODOLOGIA

A natureza numérica do estudo implica na adoção de algumas estratégias na metodologia. Primeiramente, o domínio deve ser discretizado, e então as equações diferenciais do modelo matemático devem ser aproximadas, via Método dos Volumes Finitos, para cada célula do domínio, e o conjunto de equações algébricas resultantes desse passo deve ser resolvido iterativamente.

#### 3.1 MODELO MATEMÁTICO

Os fundamentos físico-químicos da carbonatação foram descritos no capítulo anterior, no entanto, para completo entendimento do fenômeno, ele precisa ser matematicamente formulado, assim sua formulação precisa ser testada e validada (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016).

O modelo matemático aqui desenvolvido segue aquele proposto por Bary e Sellier (2004) e Zhang (2016), baseado nas equações de conservação da massa para a água líquida, para o dióxido de carbono e para o íon cálcio na solução de poro, tendo sido aqui estendido para domínios 2D, assim como fez Braga *et al.* (2018).

Primeiramente, é preciso definir a taxa de reação de neutralização ( $r_{CH}$ ) e a taxa de dissolução ( $r_D$ ) do  $Ca(OH)_2$  da pasta de cimento endurecido na água presente nos poros. A taxa de neutralização, proposta por Bary e Sellier (2004) para levar em consideração a concentração de íon cálcio e a pressão parcial do carbono é:

$$r_{CH} = \vartheta k_{rch} p_c Ca \quad (3.1)$$

Onde  $\vartheta$  é uma constante de taxa, cujo valor deve ser suficientemente alto para que a condição de difusão prevalente seja satisfeita (BARY; SELLIER, 2004),  $p_c$  é a pressão parcial do  $CO_2$  na fase gasosa,  $Ca$  é a concentração de íon cálcio e  $k_{rch}$  é um fator de redução agindo na dissolução do  $CO_2$  na água, em função do grau de saturação  $s$ , e é dado por:

$$k_{rch} = 4s^{3/2}(1 - s^{3/2}) \quad (3.2)$$

A escolha dos expoentes da equação (3.2) resulta da suposição de máxima transferência de  $CO_2$  entre as fases gasosa e líquida, com o grau de saturação de cerca de 60% (BARY; SELLIER, 2004).

A taxa de dissolução é proporcional à diferença entre as concentrações instantânea ( $Ca$ ) e de equilíbrio ( $Ca^{eq}$ ) do íon cálcio na água de poro, desse modo, o processo de

dissolução é interrompido quando a água de poro atinge a saturação de íon cálcio.

$$r_D = \epsilon s k_s a_s C_{CH} V_{CH} (Ca^{eq} - Ca) \quad (3.3)$$

Onde  $\epsilon$  é a porosidade do concreto,  $k_s$  é um coeficiente de transferência de massa,  $a_s$  é a área superficial específica dos poros de concreto em contato com a água,  $C_{CH}$  e  $V_{CH}$  são a concentração e o volume molar de  $Ca(OH)_2$  sólido, respectivamente.

Algumas suposições físicas fizeram-se necessárias para o desenvolvimento do modelo (ZHANG, 2016), a saber:

- A fase gasosa é composta por uma mistura ideal de  $CO_2$  e ar, e a pressão dessa mistura se mantém constante durante o processo de carbonatação;
- O transporte de umidade é devido, principalmente, à água líquida fluindo através dos poros do concreto, logo, a transferência de massa devido à evaporação e à condensação é desprezada;
- A transferência de calor é desprezada, visto que o processo ocorre a temperatura constante;
- O  $Ca(OH)_2$  tem prioridade na reação com o  $CO_2$ , por isso, a contribuição dos silicatos de cálcio hidratados (C-S-H) no processo de carbonatação é desprezada.

### 3.1.1 Conservação de massa da água

A equação geral da conservação da massa da água líquida é:

$$\frac{\partial(\epsilon s \rho_w)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon s \vec{u}_w \rho_w) = S_w \quad (3.4)$$

Onde,  $\rho_w$  é a massa específica da água,  $\vec{u}_w$  é o vetor velocidade da água através dos poros do concreto e  $S_w$  é o termo fonte. A velocidade da água é definida pela Lei de Darcy, como:

$$\vec{u}_w = -\frac{k k_{rg}(s)}{\mu_w} \nabla p_w \quad (3.5)$$

Onde,  $k$  é a permeabilidade,  $\mu_w$  é a viscosidade dinâmica da água,  $p_w$  é a pressão da água e  $k_{rg}(s)$  é a permeabilidade relativa, que é função do grau de saturação:

$$k_{rg}(s) = \sqrt{s} [1 - (1 - s^b)^{1/b}]^2 \quad (3.6)$$

O parâmetro  $b$  é obtido de observações experimentais. A pressão da água pode ser escrita por meio da pressão de capilaridade  $p_{cap}$ , que por sua vez, é dependente da umidade relativa  $H$ .

$$-p_w = p_{cap} = -\frac{\rho_w RT}{M_w} \ln[H(s)] \quad (3.7)$$

Onde,  $M_w$  é a massa molar da água. A relação entre a umidade relativa e o grau de saturação é dada experimentalmente. Substituindo a equação (3.7) na equação (3.5), a velocidade da água pode ser reescrita como:

$$\vec{u}_w = -\frac{kk_{rg}(s)\rho_w RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \quad (3.8)$$

O termo fonte diz respeito à água líquida resultante da reação de neutralização:

$$S_w = M_w \epsilon sr_{CH} \quad (3.9)$$

Assim, substituindo as equações (3.9) e (3.8) na equação (3.1), a equação da conservação da massa da água se torna:

$$\frac{\partial(\epsilon s \rho_w)}{\partial t} - \nabla \cdot \left( \frac{\epsilon s \rho_w^2 k k_{rg}(s) RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) = M_w \epsilon sr_{CH} \quad (3.10)$$

### 3.1.2 Conservação de massa do dióxido de carbono

A equação da conservação da massa do dióxido de carbono é:

$$\frac{\partial(\epsilon(1-s)\rho_c)}{\partial t} + \nabla W_c = -S_c \quad (3.11)$$

Segundo Zhang (2016), a convecção foi desprezada na equação pois os gradientes de temperatura e pressão são pequenos;  $\rho_c$  é a massa específica do  $CO_2$  e  $W_c$  é o fluxo de massa difusivo, que é dado pela Lei de Fick para a mistura de  $CO_2$  e ar:

$$W_c = -f(\epsilon, s) D_c \rho_m \nabla c_c \quad (3.12)$$

Onde  $\rho_m$  é a densidade da mistura,  $D_c$  é o coeficiente de difusão, e  $c_c$  é a fração de massa do  $CO_2$  relativo ao gás total, dado por  $c_c = \rho_c / \rho_m$ .

O fator de resistência  $f(\epsilon, s)$  descreve os efeitos de tortuosidade e a variação no espaço ocupado pelo gás, definido por:

$$f(\epsilon, s) = \epsilon^{4/3} (1-s)^{10/3} \quad (3.13)$$

Utilizando a lei dos gases ideais,  $p_c M_c = RT \rho_c$ , substituindo  $\rho_c$  na equação (3.12), o fluxo difusivo pode ser reescrito como:

$$W_c = -\frac{f(\epsilon, s) D_c M_c}{RT} \nabla p_c \quad (3.14)$$

O termo fonte descreve a taxa de dissolução do  $CO_2$  na água líquida, e supondo que a reação entre o dióxido de carbono dissolvido e o íon cálcio ocorre imediatamente, pode ser escrito como:

$$S_c = M_c \epsilon sr_{CH} \quad (3.15)$$

Logo, substituindo as equações (3.14) e (3.15) na equação (3.11), a equação da conservação pode ser reescrita, após algumas simplificações, como:

$$\frac{\partial(\epsilon(1-s)p_c)}{\partial t} - \nabla \cdot (f(\epsilon, s)D_c \nabla p_c) = -RT\epsilon sr_{CH} \quad (3.16)$$

### 3.1.3 Conservação de massa do íon cálcio

A equação geral da conservação de massa do íon cálcio na água líquida é:

$$\frac{\partial(\epsilon s C_a)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon s u_w C_a + W_a) = S_a \quad (3.17)$$

Onde  $W_a$  é o fluxo difusivo de cálcio na água líquida, dado pela Lei de Fick:

$$W_a = -D_a \epsilon s \nabla C_a \quad (3.18)$$

Onde  $D_a$  é o coeficiente de difusão global. O termo fonte representa a taxa molar de cálcio consumido pela reação de neutralização e fornecido por meio da dissolução na água de poro, e pode ser escrito como:

$$S_a = r_D - \epsilon sr_{CH} \quad (3.19)$$

Substituindo as equações (3.18) e (3.19) na equação (3.17), e sabendo que  $u_w$  vem da Lei de Darcy para a velocidade da água, a equação da conservação da massa de íon cálcio pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial(\epsilon s C_a)}{\partial t} - \nabla \cdot \left( \frac{\epsilon s C_a k k_{rg}(s) \rho_w RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s + D_a \epsilon s \nabla C_a \right) = r_D - \epsilon sr_{CH} \quad (3.20)$$

### 3.1.4 Variação da porosidade

Para completar o conjunto de equações do modelo matemático, também é preciso estabelecer a variação da porosidade com o tempo, que depende da dissolução dos principais hidratos da pasta de cimento, e da formação de carbonato de cálcio, e traz consequências para o transporte de água,  $CO_2$  e cálcio.

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} = r_D V_{CH} - \epsilon sr_{CH} V_{CaCO_3} \quad (3.21)$$

Onde  $V_{CaCO_3}$  é o volume molar do carbonato de cálcio.

## 3.2 FORMULAÇÃO NUMÉRICA

As equações que modelam o fenômeno da carbonatação são não lineares e fortemente acopladas. Desse modo, a estratégia de solução numérica é empregada, baseada na discretização pelo Método dos Volumes finitos.

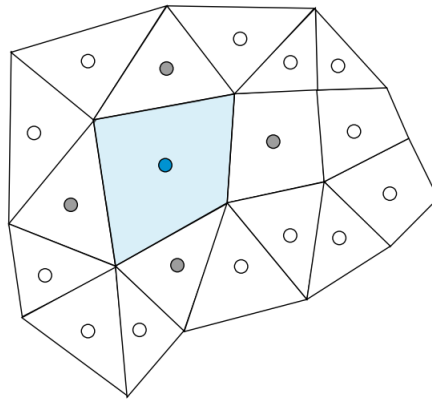


A estratégia do MVF consiste na integração das equações governantes nos volumes de controle finitos do domínio, substituição de aproximações para os termos na equação integrada e solução do sistema algébrico resultante do passo anterior (VERSTEEG; MALALASEKERA, 1995).

No MVF, o domínio de cálculo arbitrário é dividido em um número finito de volumes de controle sem sobreposição, como mostrado na figura 3, a equação diferencial é então, integrada em cada volume de controle (PATANKAR, 1980).

Um arranjo *cell-centered* é utilizado neste desenvolvimento, no qual as quantidades das variáveis são armazenadas no centróide das células da malha, em contraste com o arranjo *vertex-centered*, onde as variáveis são armazenadas nos vértices das células (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016).

**Figura 3** – Domínio arbitrário com arranjo *cell-centered*.



Fonte: Adaptado de Moukalled, Mangani e Darwish (2016)

Assim, cada equação do modelo matemático foi discretizada no tempo e no espaço, em um domínio  $\Omega$ , para volumes de controle finitos  $\Omega_V$ . Para a discretização no tempo foi utilizado o esquema de Euler implícito.

### 3.2.1 Forma discreta da equação da conservação de massa da água

A aproximação da equação da conservação da massa da água pelo Método dos Volumes Finitos é realizada integrando a equação diferencial pela extensão do domínio  $\Omega$  e no tempo  $t$ :

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \frac{\partial(\epsilon s \rho_w)}{\partial t} d\Omega dt - \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( \frac{\epsilon s \rho_w^2 k k_{rg}(s) RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) d\Omega dt = \\ = \int_{t_0}^t \int_{\Omega} (M_w \epsilon s r_{CH}) d\Omega dt \end{aligned} \quad (3.22)$$

Admitindo que a integral no domínio  $\Omega$  é equivalente ao somatório de integrais em cada volume finito  $\Omega_V$ :

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \int_{\Omega_V} \frac{\partial(\epsilon s \rho_w)}{\partial t} d\Omega_V dt - \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \int_{\Omega_V} \nabla \cdot \left( \frac{\epsilon s \rho_w^2 k k_{rg}(s) RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) d\Omega_V dt = \\ = \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \int_{\Omega_V} (M_w \epsilon s r_{CH}) d\Omega_V dt \end{aligned} \quad (3.23)$$

Aplica-se o Teorema da Divergência no segundo termo do lado esquerdo da equação de modo a substituir a integral de volume por uma integral de superfície (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016), e considerando o volume finito arbitrário  $\Omega_V$ , cuja fronteira é  $\Gamma_L$  pode-se eliminar o somatório e escrever a equação para esse único volume:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} \frac{\partial(\epsilon s \rho_w)}{\partial t} d\Omega_V dt - \int_{t_0}^t \int_{\Gamma_L} \left( \frac{\epsilon s \rho_w^2 k k_{rg}(s) RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) \cdot d\vec{S} dt = \\ = \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} (M_w \epsilon s r_{CH}) d\Omega_V dt \end{aligned} \quad (3.24)$$

Onde  $\vec{S}$  é o vetor de superfície, definido por  $dS = \vec{n} d\Gamma_L$ . Para uma integração de valor médio simples utiliza-se o Teorema do Valor Médio, com um ponto de integração localizado no centróide da face, essa aproximação tem precisão de segunda ordem e é utilizada para domínios 2D e 3D (MOUKALLED; MANGANI; DARWISH, 2016).

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} \frac{\partial(\epsilon s \rho_w)}{\partial t} d\Omega_V dt - \int_{t_0}^t \left( \frac{\epsilon s \rho_w^2 k k_{rg}(s) RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) \cdot \vec{N} dt = \\ = \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} (M_w \epsilon s r_{CH}) d\Omega_V dt \end{aligned} \quad (3.25)$$

Onde  $\vec{N}$  é o vetor normal à superfície da fronteira do volume finito. Rearranjando e resolvendo a integração no espaço:

$$\int_{t_0}^t \frac{\partial(\epsilon s \rho_w)}{\partial t} dt = \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \left( \frac{\epsilon s \rho_w^2 k k_{rg}(s) RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) \cdot \vec{N} dt + \int_{t_0}^t (M_w \epsilon s r_{CH}) dt \quad (3.26)$$

Integrando a equação no tempo utilizando Euler adiantado, tem-se a sua forma discreta:

$$\begin{aligned} (\epsilon_i^{n+1} s_i^{n+1} - \epsilon_i^n s_i^n) \rho_w = \sum_{i=1}^{N_{VC}} \left( \frac{\epsilon_i^n s_i^n \rho_w^2 k k_{rg}(s) RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s_i^n) \nabla s_i^{n+1} \right) \cdot \vec{N} \Delta t + \\ + M_w \epsilon_i^n s_i^n \vartheta k_{rch}(p_c)_i^n C a_i^n \Delta t \Delta \Omega_V \end{aligned} \quad (3.27)$$

### 3.2.2 Forma discreta da equação da conservação de massa do dióxido de carbono

Analogamente à obtenção da equação discreta para a conservação de massa da água, é preciso integrar a equação (3.16) por toda extensão do domínio  $\Omega$  e ao longo do

tempo:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \frac{\partial(\epsilon(1-s)p_c)}{\partial t} d\Omega dt - \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \nabla \cdot (f(\epsilon, s) D_c \nabla p_c) d\Omega dt = \\ = - \int_{t_0}^t \int_{\Omega} RT \epsilon sr_{CH} d\Omega dt \end{aligned} \quad (3.28)$$

O domínio  $\Omega$  é discretizado em volumes finitos  $\Omega_V$ , e admite-se que a integral no domínio é equivalente ao somatório de integrais em cada volume:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \int_{\Omega_V} \frac{\partial(\epsilon(1-s)p_c)}{\partial t} d\Omega_V dt - \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \int_{\Omega_V} \nabla \cdot (f(\epsilon, s) D_c \nabla p_c) d\Omega_V dt = \\ = - \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \int_{\Omega_V} RT \epsilon sr_{CH} d\Omega_V dt \end{aligned} \quad (3.29)$$

Aplicando o teorema da divergência no segundo termo do lado esquerdo da equação:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} \frac{\partial(\epsilon(1-s)p_c)}{\partial t} d\Omega_V dt - \int_{t_0}^t \int_{\Gamma_L} (f(\epsilon, s) D_c \nabla p_c) \cdot d\vec{S} dt = \\ = - \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} RT \epsilon sr_{CH} d\Omega_V dt \end{aligned} \quad (3.30)$$

Utilizando o Teorema do Valor Médio:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} \frac{\partial(\epsilon(1-s)p_c)}{\partial t} d\Omega_V dt - \int_{t_0}^t (f(\epsilon, s) D_c \nabla p_c) \cdot \vec{N} dt = \\ = - \int_{t_0}^t \int_{\Omega_V} RT \epsilon sr_{CH} d\Omega_V dt \end{aligned} \quad (3.31)$$

Resolvendo a integral no espaço e rearranjando:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \frac{\partial(\epsilon(1-s)p_c)}{\partial t} dt = \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} (f(\epsilon, s) D_c \nabla p_c) \cdot \vec{N} dt - \\ - \int_{t_0}^t RT \epsilon sr_{CH} dt \end{aligned} \quad (3.32)$$

Integrando no tempo utilizando o esquema Euler adiantado, a equação da conservação de massa do dióxido de carbono é da forma:

$$\begin{aligned} \epsilon_i^{n+1} (1 - s_i^{n+1}) (p_c)_i^{n+1} - \epsilon_i^n (1 - s_i^n) (p_c)_i^n = \sum_{i=1}^{N_{VC}} (f(\epsilon_i^{n+1}, s_i^{n+1}) D_c \nabla (p_c)_i^{n+1}) \cdot \vec{N} \Delta t - \\ - RT \epsilon s \vartheta k_{rch} (p_c)_i^{n+1} C a_i^n \Delta t \Delta \Omega_V \end{aligned} \quad (3.33)$$

### 3.2.3 Forma discreta da equação da conservação de massa do íon cálcio

Integrando a equação (3.20) pela extensão do domínio e no tempo:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \frac{\partial(\epsilon s C a)}{\partial t} d\Omega dt - \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \nabla \cdot \left( \frac{\epsilon s C a k k_{rg}(s) \rho_w RT}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s + D_a \epsilon s \nabla C a \right) d\Omega dt = \\ = \int_{t_0}^t \int_{\Omega} (r_D - \epsilon sr_{CH}) d\Omega dt \end{aligned} \quad (3.34)$$

De forma análoga à subseção anterior, a forma discreta para a equação da conservação de massa do cálcio é obtida para os volumes finitos  $\Omega_V$ , e após a aplicação dos Teoremas da Divergência e do Valor Médio, a forma semi discreta da equação (3.20) é:

$$\int_{t_0}^t \frac{\partial(\epsilon s C a)}{\partial t} dt = \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} \left( \frac{\epsilon s C a k k_{rg}(s) \rho_w R T}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) \cdot \vec{N} dt + \int_{t_0}^t \sum_{i=1}^{N_{VC}} (D_a \epsilon s \nabla C a) \cdot \vec{N} dt + \int_{t_0}^t (r_D - \epsilon s r_{CH}) dt \quad (3.35)$$

Integrando a equação no tempo, usando o esquema de Euler adiantado:

$$\begin{aligned} \epsilon_i^{n+1} s_i^{n+1} C a_i^{n+1} - \epsilon_i^n s_i^n C a_i^n &= \sum_{i=1}^{N_{VC}} \left( \frac{\epsilon_i^{n+1} s_i^{n+1} C a_i^{n+1} k k_{rg}(s) \rho_w R T}{\mu_w M_w H(s)} H'(s) \nabla s \right) \cdot \vec{N} \Delta t + \\ &+ \sum_{i=1}^{N_{VC}} \left( D_a \epsilon_i^{n+1} s_i^{n+1} \nabla C a_i^{n+1} \right) \cdot \vec{N} \Delta t + \epsilon_i^{n+1} s_i^n a_s k_s C_{CH} V_{CH} (C a^{eq} - C a_i^n) \Delta t \Delta \Omega_V - \\ &- \epsilon_i^{n+1} s_i^{n+1} \vartheta k_{rch}(p_c)_i^n C a_i^n \Delta t \Delta \Omega_V \end{aligned} \quad (3.36)$$

### 3.2.4 Forma discreta da equação de variação da porosidade

A equação de variação da porosidade também deve ser integrada no espaço e no tempo:

$$\int_{t_0}^t \int_{\Omega} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} d\Omega dt = \int_{t_0}^t \int_{\Omega} r_D V_{CH} d\Omega dt - \int_{t_0}^t \int_{\Omega} \epsilon s r_{CH} V_{CaCO_3} d\Omega dt \quad (3.37)$$

Integrando primeiro no espaço, em um domínio  $\Omega$  discretizado em volumes  $\Omega_V$ , levando em consideração que a integral no domínio é equivalente à integral em cada volume finito:

$$\int_{t_0}^t \frac{\partial \epsilon}{\partial t} \Delta \Omega dt = \int_{t_0}^t r_D V_{CH} \Delta \Omega dt - \int_{t_0}^t \epsilon s r_{CH} V_{CaCO_3} \Delta \Omega dt \quad (3.38)$$

Integrando no tempo, e com o esquema de Euler adiantado:

$$\epsilon_i^{n+1} - \epsilon_i^n = \left( \epsilon_i^{n+1} s_i^n k_s a_s C_{CH} V_{CH}^2 (C a^{eq} - C a_i^n) - \epsilon_i^{n+1} s_i^n \vartheta k_{rch}(p_c)_i^n C a_i^n V_{CaCO_3} \right) \Delta t \quad (3.39)$$

As equações (3.27), (3.33), (3.36) e (3.39) podem agora ser resolvidas por métodos computacionais. O algoritmo empregado para solucionar esse sistema pode ser descrito nos seguintes passos (BRAGA *et al.*, 2018; ZHANG, 2016):

1. Calcular a porosidade  $\epsilon^{n+1}$  pela equação (3.39)
2. De posse da porosidade, calcular o grau de saturação  $s^{n+1}$  com a equação (3.27)
3. Calcular a pressão parcial  $p_c^{n+1}$  na equação (3.33), utilizando os valores atualizados de  $\epsilon^{n+1}$  e  $s^{n+1}$
4. Finalmente, calcular a concentração de íon cálcio pela equação (3.36) com  $\epsilon^{n+1}$ ,  $s^{n+1}$  e  $p_c^{n+1}$  atualizados.

### 3.3 IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Após a definição das equações discretas, o próximo passo é resolvê-las computacionalmente. Nessa etapa, para a criação dos domínios e a geração das malhas foi utilizado o *software* de código aberto GMSH®, todos os códigos de solução foram implementados no *software* comercial Matlab® e os resultados foram visualizados no *software* VisIt®, também de domínio público.

O processo iterativo envolvendo as equações (3.27), (3.33), (3.36) e (3.39) é resolvido em cada passo de tempo e só passa para o passo de tempo seguinte quando o sistema converge com uma determinada tolerância. O Anderson *Acceleration* foi aplicado em cada equação individualmente (exceto na equação (3.39) que é resolvida implicitamente), usando o sistema linear fruto da discretização da equação como mapa do ponto fixo de entrada da função do Anderson. O algoritmo 3 ilustra esse processo.

Assim, em cada iteração do algoritmo do acelerador tem-se um vetor de solução que é uma aproximação melhor da solução real do que o anterior, assim espera-se a redução no número de iterações do sistema como um todo a cada passo de tempo.

---

#### Algoritmo 3: Implementação - Processo iterativo

---

1. Calcular a porosidade:

$$\epsilon^{k+1}$$

2. Calcular a saturação:

$$s_{k+1} = G(s_k) - \chi_k \gamma^{(k)}$$

3. Calcular a pressão parcial de  $CO_2$ :

$$pc_{k+1} = G(pc_k) - \chi_k \gamma^{(k)}$$

4. Calcular a concentração de íon cálcio:

$$Ca_{k+1} = G(Ca_k) - \chi_k \gamma^{(k)}$$


---

## 4 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados os resultados dos experimentos numéricos realizados. Primeiramente, um problema de referência na literatura é mostrado para verificar a implementação usada no trabalho, e em seguida, três exemplos 2D avaliam o uso da técnica de aceleração.

### 4.1 CARBONATAÇÃO ACELERADA 1D

Nesta primeira seção são apresentados os resultados de um problema *benchmark* presente no trabalho de Zhang (2016), com o objetivo de validar a implementação do Anderson *Acceleration*.

Esse exemplo consiste da carbonatação acelerada, ou seja, submetida a uma concentração de  $CO_2$  muito maior que a do ar, em um domínio de natureza unidimensional de comprimento  $L = 0,05$  m e razão água/cimento (a/c) do concreto igual a 0.8, com extremidade esquerda exposta à atmosfera, na qual foi imposta uma concentração de  $CO_2$  de 50%, pressão parcial de carbono  $P_0 = 5 \times 10^4$  Pa e umidade relativa  $H_0 = 65\%$ . Foi utilizada uma malha com 100 divisões em x e tolerância de  $10^{-6}$  tanto para o procedimento não linear quanto para o procedimento do Anderson.

A extremidade direita foi considerada como conectada ao restante da estrutura, recebendo, portanto, uma condição de contorno de simetria:

$$\frac{\partial p_c}{\partial x} = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial s}{\partial x} = 0 \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial Ca}{\partial x} = 0 \quad (4.3)$$

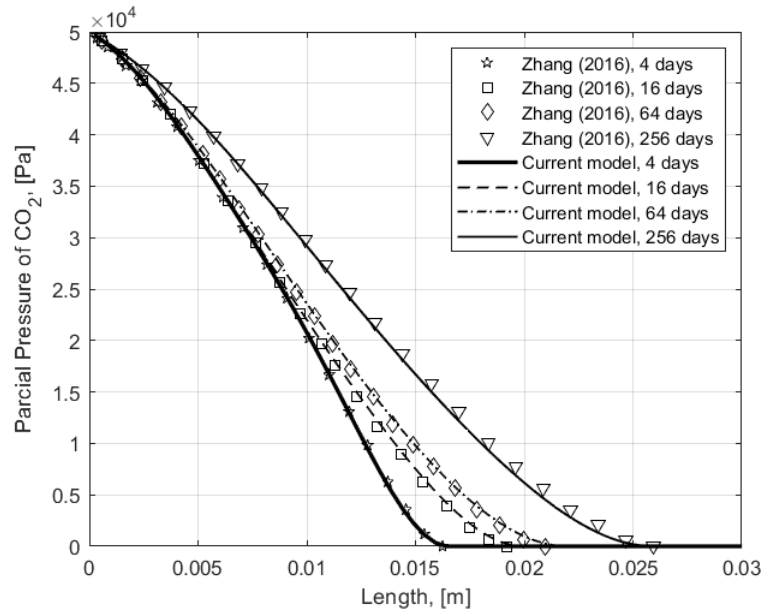
As condições iniciais do modelo de carbonatação são apresentados na tabela 1:

**Tabela 1** – Parâmetros iniciais da carbonatação

Parâmetro	Valor
$\epsilon$	0,094
$s$	0,9490
$Ca$	$22 \text{ mol/m}^3$
$p_c$	0 Pa

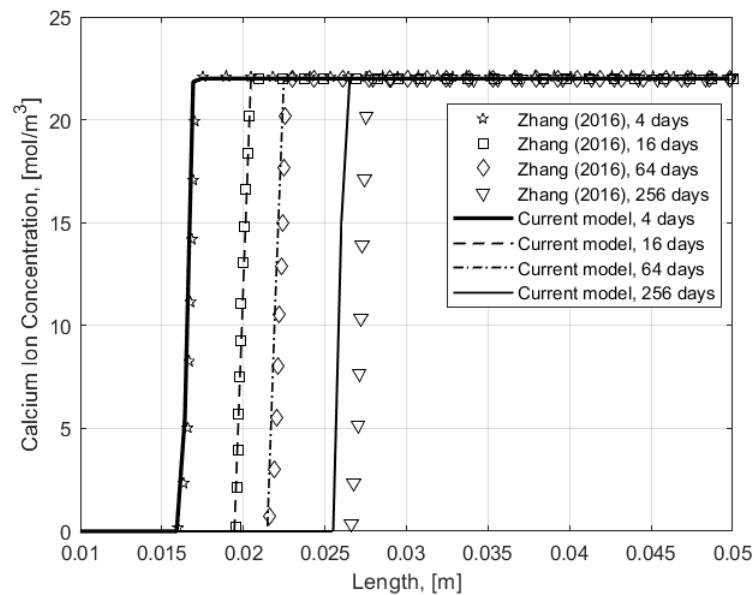
Os resultados foram obtidos para pressão parcial de carbono, distribuição de íon cálcio, dissolução de hidróxido de cálcio e produção de carbonato de cálcio, em 4, 16, 64 e 256 dias com passo de tempo de 24 horas, e são mostrados tanto para a implementação sem Anderson *Acceleration* (original), nas figuras de 4 a 7, quanto para a implementação com Anderson *Acceleration* com profundidade de aceleração  $m = 3$  nas figuras de 8 a 11.

**Figura 4** – Pressão parcial de carbono - original



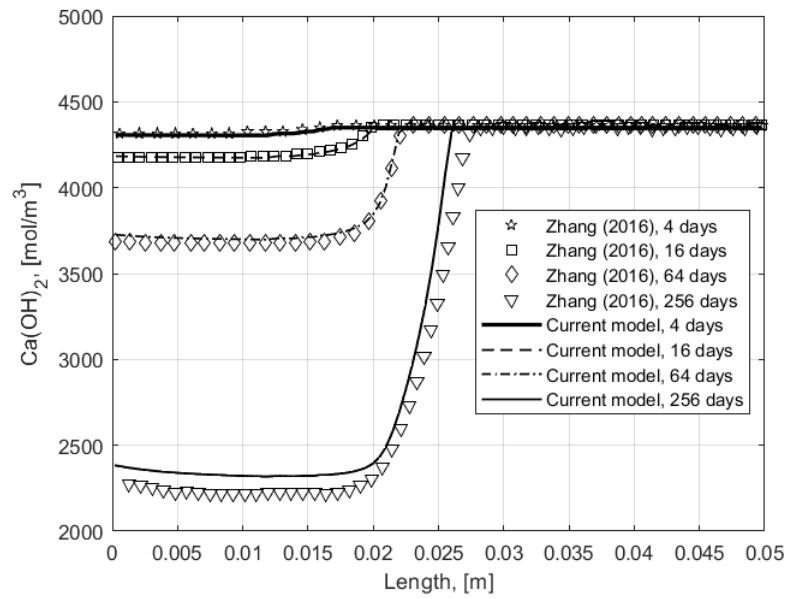
Fonte: A autora.

**Figura 5** – Distribuição de íon cálcio - original



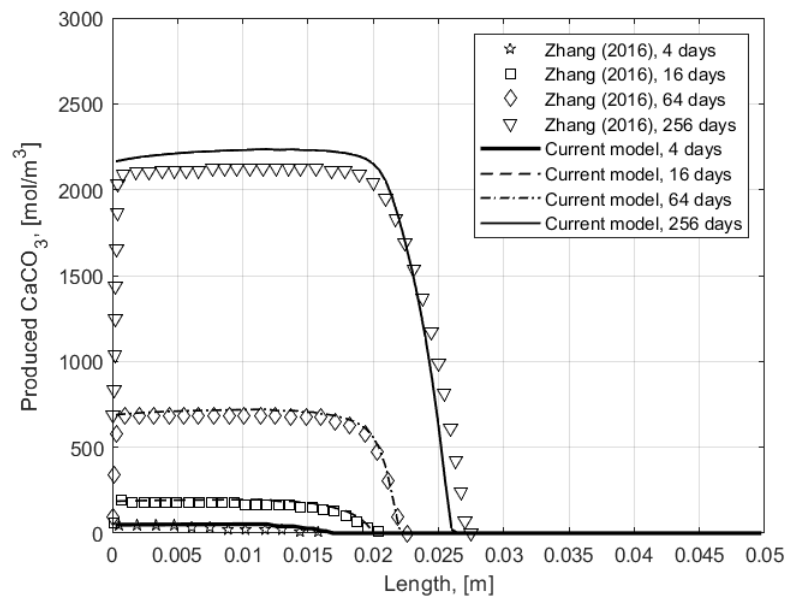
Fonte: A autora.

**Figura 6** – Dissolução de hidróxido de cálcio - original



Fonte: A autora.

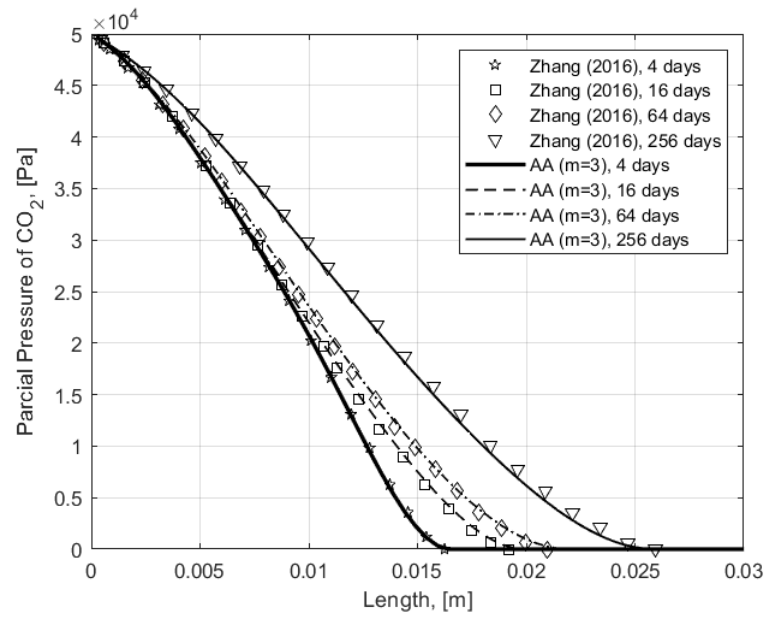
**Figura 7** – Produção de carbonato de cálcio - original



Fonte: A autora.

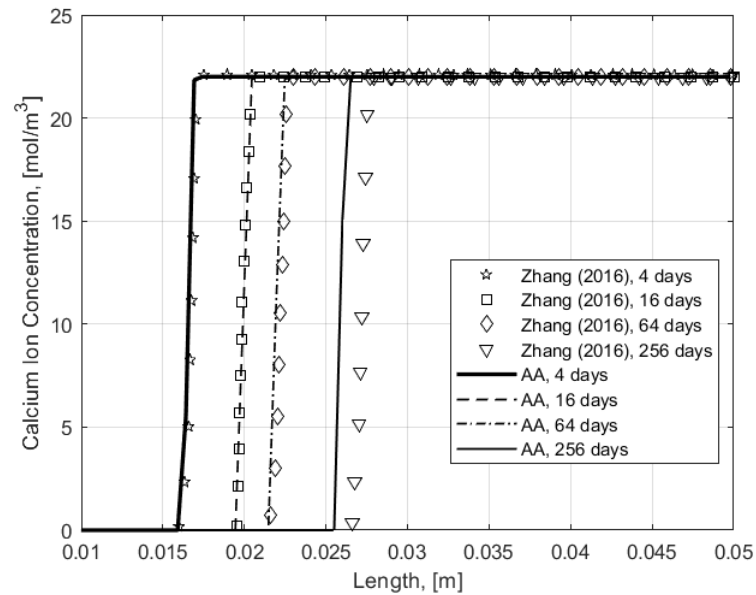


**Figura 8** – Pressão parcial de carbono - Anderson Acceleration



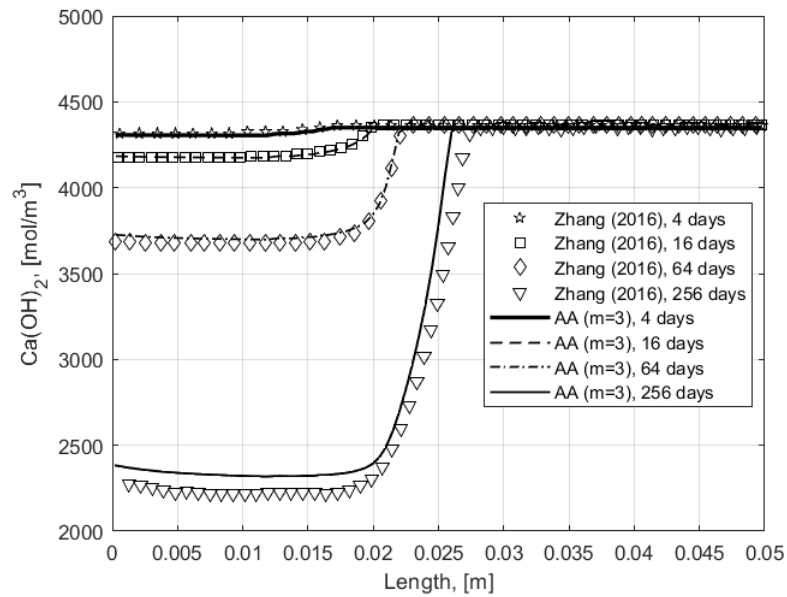
Fonte: A autora.

**Figura 9** – Distribuição de íon cálcio - Anderson Aceleration



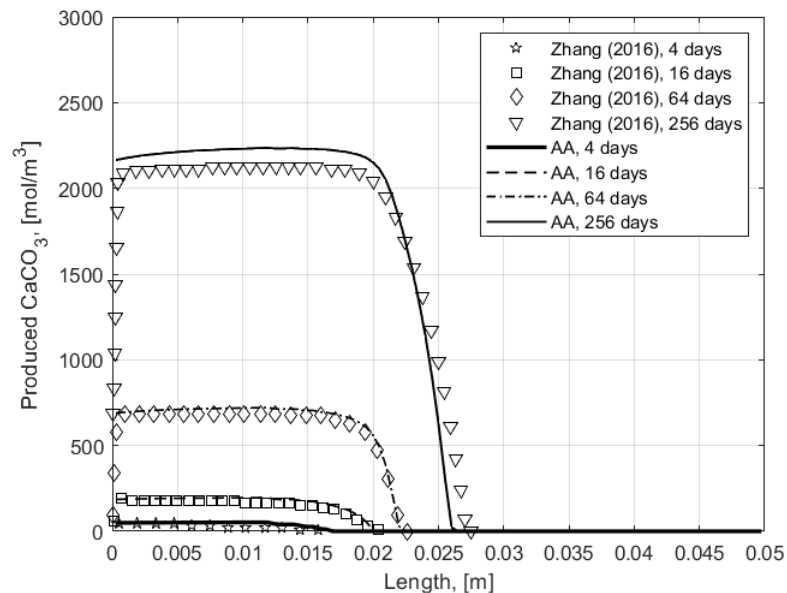
Fonte: A autora.

**Figura 10** – Dissolução de hidróxido de cálcio - Anderson Acceleration



Fonte: A autora.

**Figura 11** – Produção de carbonato de cálcio - Anderson Acceleration



Fonte: A autora.

A partir das figuras, nota-se a existência de duas regiões: Com carbonatação e sem carbonatação. A pressão parcial de carbono é decrescente devido à difusão e ao consumo na reação, até que atinge o zero na zona sem carbonatação, como mostrado nas figuras 4 e 8. O íon cálcio é completamente consumido na região carbonatada, e após isso alcança quase o valor da saturação, observado nas figuras 5 e 9.

Nas figuras 6, 10, 7 e 11 é possível ver que o hidróxido de cálcio se dissolve com taxa máxima próximo a interface entre as duas zonas, enquanto que a concentração de carbonato de cálcio produzido é maior na região com carbonatação, e atinge o zero na região sem carbonatação, já que nenhum dióxido de carbono se difunde nessa região e desse modo a reação é interrompida.

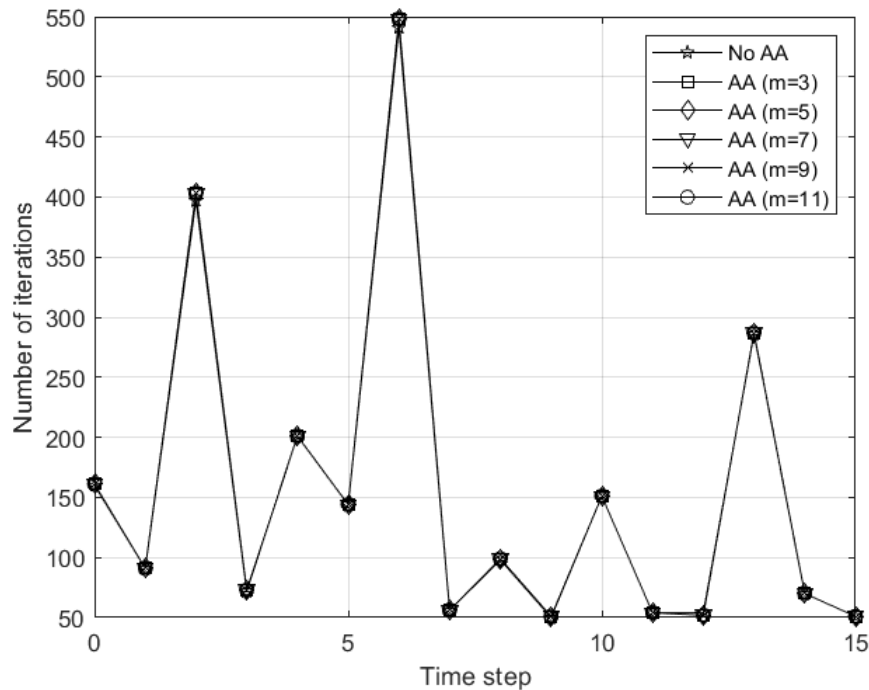
É possível notar também que a interface entre as regiões com e sem carbonatação avança mais para o interior da estrutura com o aumento do tempo simulado.

Esses resultados apresentam concordância satisfatória com aqueles obtidos por Zhang (2016) para este *benchmark*, o que mostra que a implementação pode ser utilizada em outras aplicações, e a implementação do Anderson *Acceleration* mantém a conformidade dos resultados com os da literatura.

No que diz respeito ao número de iterações do sistema por passo de tempo, a figura 12 mostra a comparação do número de iterações do problema sem utilizar Anderson *Acceleration* e com Anderson com diferentes profundidades de aceleração ( $m=3, 5, 7, 9$  e  $11$ ). Como para este problema não se nota diferença expressiva no número de iterações para cada caso, foi escolhido apresentar o problema de carbonatação em 16 dias para melhor visualização dos dados, além disso, os valores são mostrados na tabela 2

**Tabela 2** – Número de iterações por *timestep*

<b>timestep</b>	<b>Sem AA</b>	<b>AA m=3</b>	<b>AA m=5</b>	<b>AA m=7</b>	<b>AA m=9</b>	<b>AA m=11</b>
0	160	161	161	161	161	161
1	91	91	91	91	91	91
2	397	403	403	403	403	403
3	72	73	73	73	73	73
4	201	201	201	201	201	201
5	144	144	144	144	144	144
6	541	548	548	548	548	548
7	56	56	56	56	56	56
8	98	99	99	99	99	99
9	50	51	51	51	51	51
10	151	151	151	151	151	151
11	54	54	54	54	54	54
12	54	52	52	52	52	52
13	286	287	287	287	287	287
14	70	70	70	70	70	70
15	51	51	51	51	51	51

**Figura 12** – Número de iterações por passo de tempo

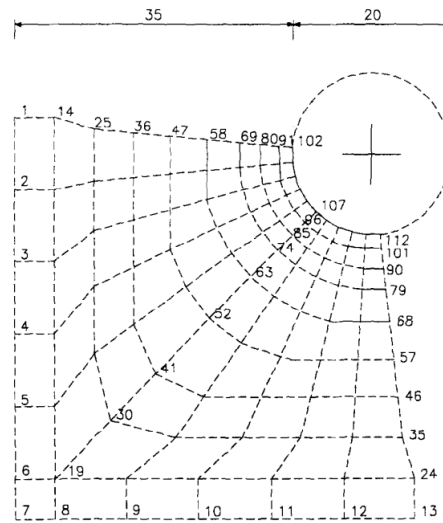
Fonte: A autora.

Nota-se que para o problema 1D o Anderson *Acceleration* não é efetivo na diminuição do número de iterações, apesar de no passo de tempo 11 (12º dia) o número de iterações caiu em duas, nos outros passos de tempo ou se mantém o mesmo ou aumenta. No entanto, o objetivo principal desse exemplo, que era validar a implementação comparando seus resultados com aqueles obtidos na literatura, foi cumprido.

#### 4.2 CARBONATAÇÃO NATURAL 2D DO CANTO DE UMA ESTRUTURA

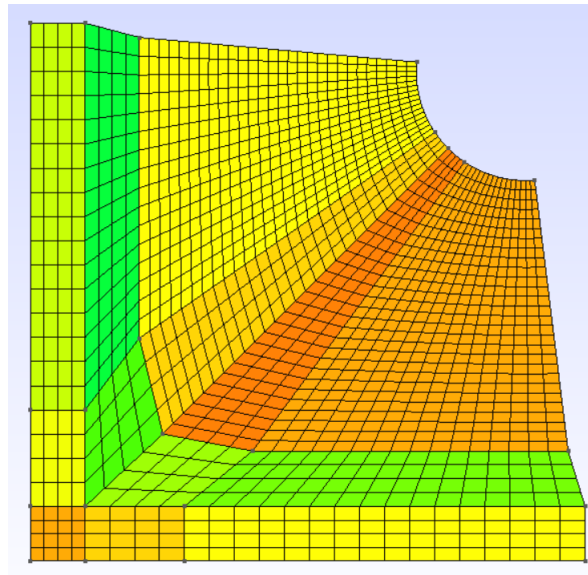
O segundo exemplo foi adaptado de Saetta, Schrefler e Vitaliani (1995) e consiste do canto de uma estrutura de concreto de 35 mm de espessura, protegendo uma barra de aço de reforço, mostrado na figura 13. As extremidades esquerda e inferior foram consideradas expostas ao ambiente, com umidade relativa de  $H_0 = 65\%$ , em função da qual é calculado o grau de saturação, 0.8720, concentração de  $CO_2$  de 0.035%, a pressão parcial de carbono do contorno foi considerada  $P_0 = 50$  Pa. As demais faces são conectadas à estrutura, ou seja, valem as condições de simetria descritas pelas equações (4.1) a (4.3), extendidas para o caso 2D. A malha utilizada no problema foi uma malha estruturada, mostrada na figura 14 e a tolerância foi  $10^{-6}$  tanto para para o procedimento não linear quanto para o procedimento do Anderson.

**Figura 13** – Geometria do segundo exemplo



Fonte: Sietta, Schrefler e Vitaliani (1995)

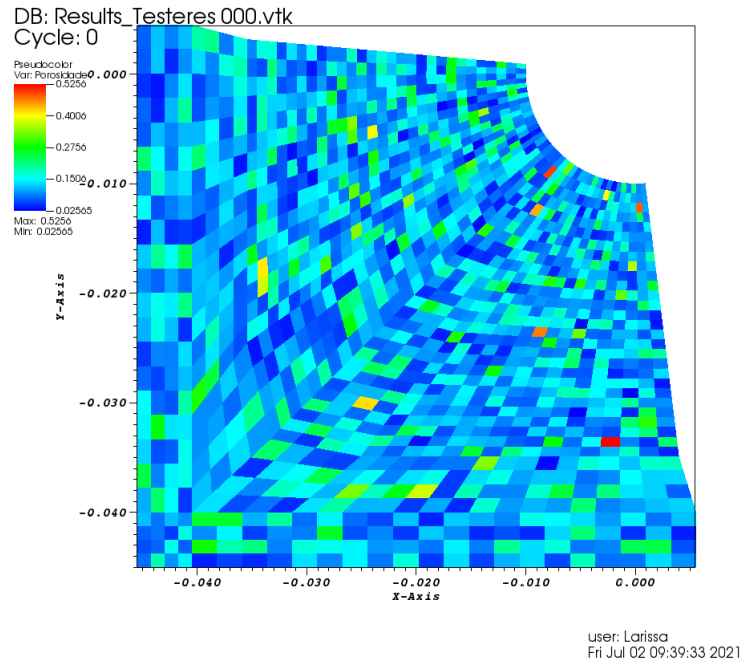
**Figura 14** – Malha do segundo exemplo



Fonte: A autora

A distribuição da porosidade inicial foi considerada como uma distribuição lognormal (BRAGA *et al.*, 2018), como mostrada na figura 15, e nesse exemplo foi utilizado um concreto com  $a/c$  igual a 0.5.

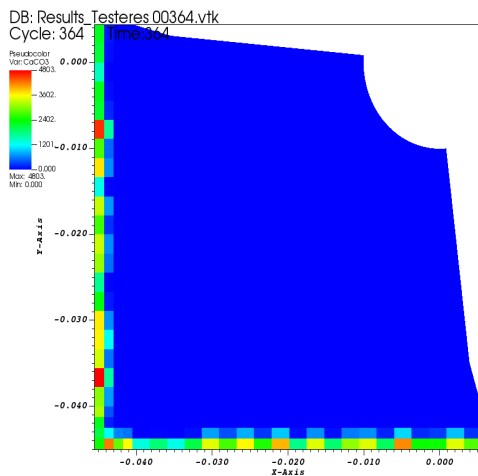
Figura 15 – Porosidade inicial



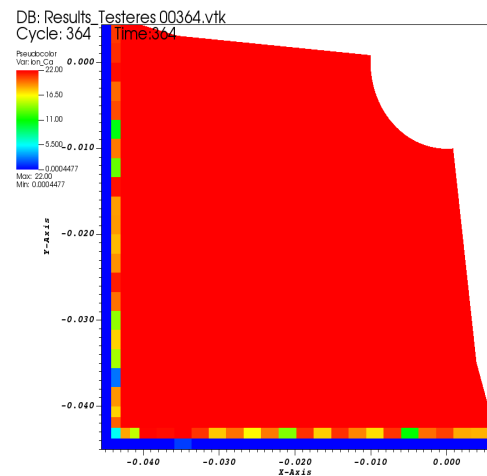
Fonte: A autora

O resultado desse problema de carbonatação natural após 365 dias de simulação com *timestep* de 24 horas é mostrado nas próximas figuras, tanto sem Anderson *Acceleration* quanto com Anderson com  $m=3$ .

Figura 16 – Resultados da implementação original

(a) Produção de  $\text{CaCO}_3$ 

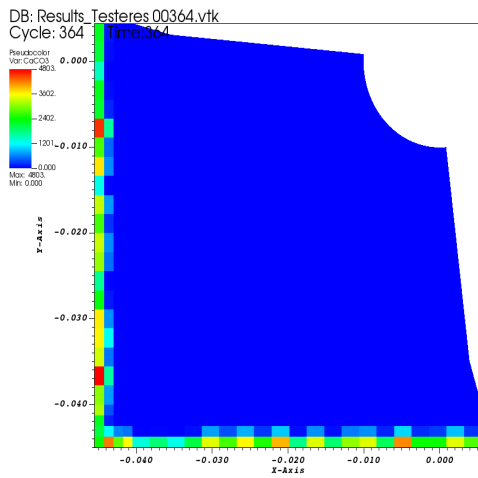
(b) Distribuição de Cálcio



Fonte: A autora

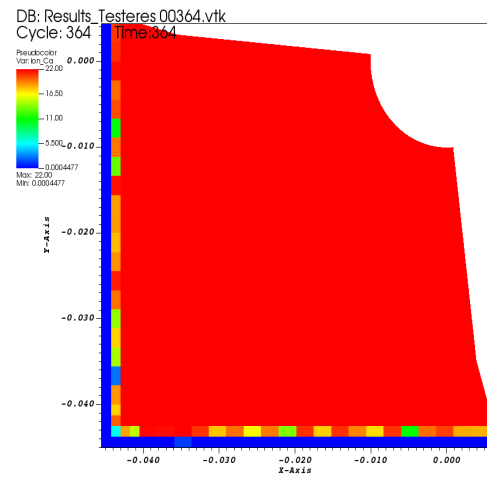
**Figura 17** – Resultados da implementação Anderson Acceleration  $m=3$

(a) Produção de  $\text{CaCO}_3$



user: Larissa  
Thu Jun 17 22:38:46 2021

(b) Distribuição de Cálcio



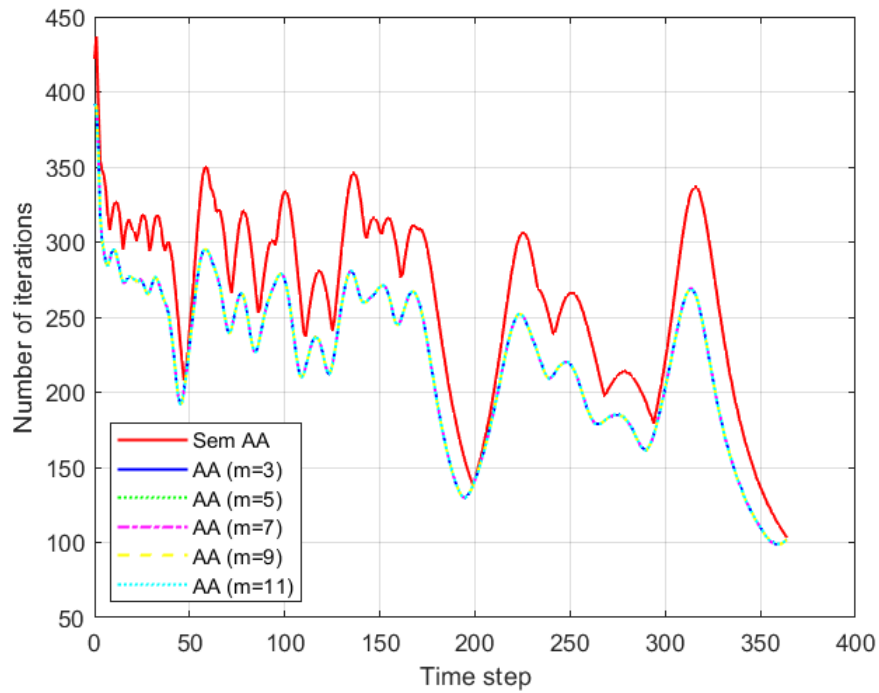
user: Larissa  
Thu Jun 17 22:39:06 2021

Fonte: A autora

Nota-se que os resultados coincidem nos dois casos e além da profundidade de aceleração igual a 3, também foram testadas  $m = 5, 7, 9$  e  $11$ , todas coincidindo com o resultado original. A comparação entre o número de iterações em cada passo de tempo para esses casos é mostrada na figura 18 e como é possível notar, a aplicação do Anderson *Acceleration* resulta na redução do número de iterações por passo de tempo, mostrando que a técnica atinge seu objetivo para este caso, também se nota que não houve diferença entre as profundidades de aceleração testadas, logo, para este problema, um valor próximo do ótimo é  $m = 3$ , já que a partir daí não se nota um ganho de performance.

Ainda não é clara na literatura a existência de um  $m$  ideal, visto que esse valor tende a variar de problema para problema. No geral, observa-se que a aceleração da convergência inicialmente cresce com o valor de  $m$ , mas tende a estabilizar com valores pequenos a moderados e pode até diminuir para valores maiores. Valores típicos vão de 2 a 12, mas podem ser maiores em alguns casos (ANDERSON, 2019).

**Figura 18** – Número de iterações com cada m por passo de tempo

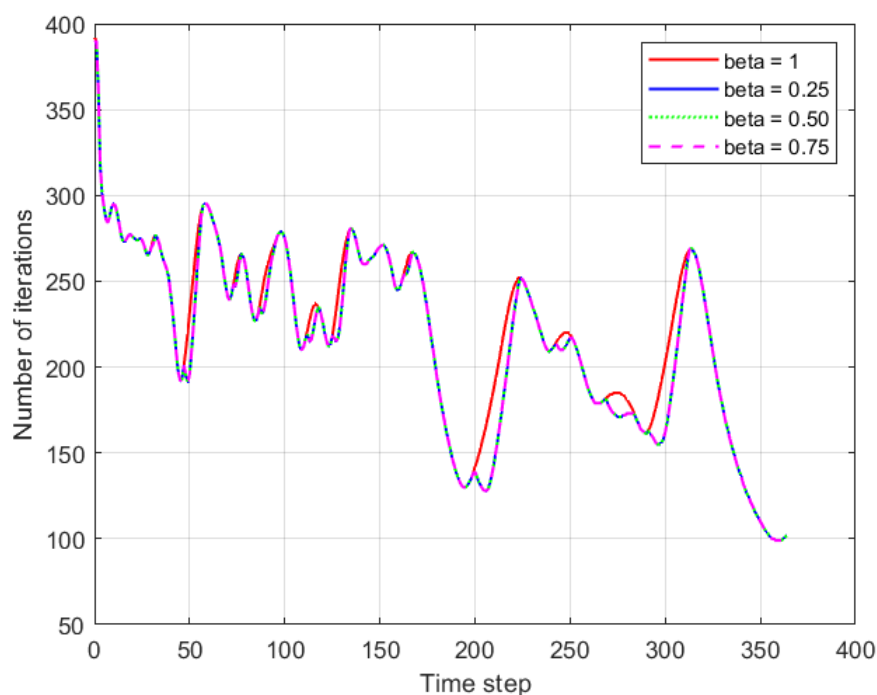


Fonte: A autora

Em seguida foram testados diferentes valores de  $\beta_k$ , o parâmetro de amortecimento. O propósito desse teste é avaliar a influência do parâmetro no número de iterações. A figura 19 mostra o resultado da comparação entre número de iterações por passo de tempo nas situações  $\beta_k = 1$  (sem amortecimento),  $\beta_k = 0.25$ ,  $\beta_k = 0.50$  e  $\beta_k = 0.75$ , utilizando  $m = 3$ . É possível notar que dentre os valores de amortecimento testados, não há diferença no número de iterações, tanto que as curvas se sobrepõem, e entre estes e a curva de  $\beta_k = 1$  houve uma pequena redução no número de iterações em alguns passos de tempo.



**Figura 19** – Número de iterações com cada  $\beta_k$  por passo de tempo



Fonte: A autora

### 4.3 CARBONATAÇÃO 2D DE UMA VIGA

O terceiro exemplo foi adaptado de Saetta e Vitaliani (2005) e consiste do estudo de uma viga que colapsou devido a corrosão das barras de reforço (figura 20).

**Figura 20** – Viga colapsada

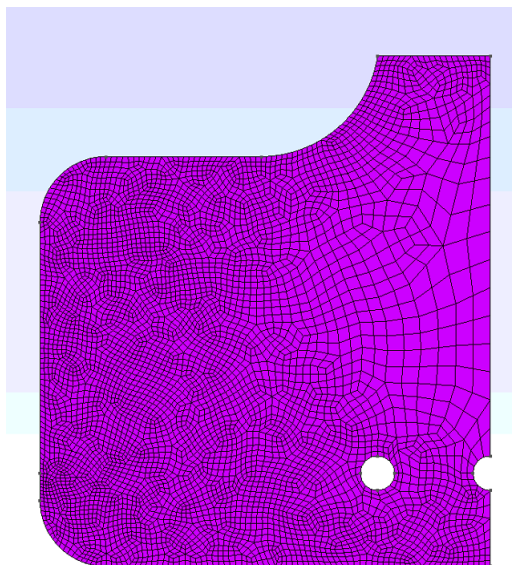


Fonte: Saetta e Vitaliani (2005)

Devido ao considerável esforço computacional necessário para executar esse problema, optou-se por simular metade da geometria, onde o eixo de simetria foi considerado isolado. A malha construída para este exemplo é mais refinada nas extremidades, visto

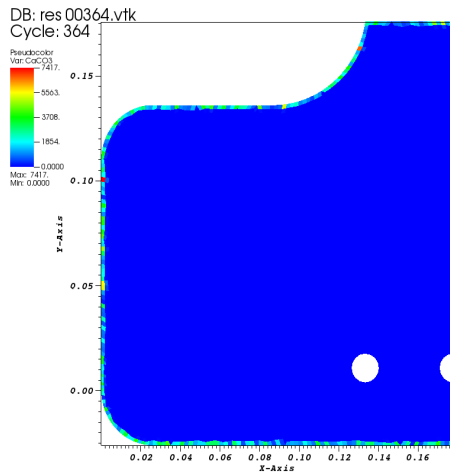
que é a região que sofre carbonatação, e menos refinada no meio, como pode ser visto na figura 21. Esta malha possui 5444 elementos.

**Figura 21** – Malha do terceiro exemplo

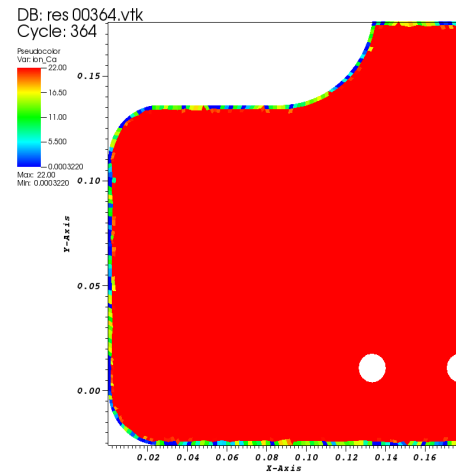


Fonte: A autora

Inicialmente, foi rodado um caso de carbonatação natural simulando 365 dias, usando o passo de tempo igual a 12 horas e tolerância  $10^{-4}$ ; as condições ambientais às quais a viga estava submetida são pressão parcial de carbono  $P_0 = 50$  Pa e umidade relativa  $H_0 = 65\%$ ; além disso, também foi usada a distribuição lognormal de porosidade inicial. Os resultados podem ser vistos na figura 22, que mostra a produção de carbonato de cálcio, o principal produto da carbonatação, e o consumo de íon cálcio após os 365 dias; nota-se que o resultado está condizente com o esperado do ponto de vista físico, e a frente de carbonatação para 1 ano de simulação é aproximadamente 0.004 mm.

**Figura 22** – Resultados do terceiro exemplo carbonatação natural**(a)** Produção de  $\text{CaCO}_3$ 

User: Larissa  
Wed Jul 07 21:45:28 2021

**(b)** Distribuição de Cálcio

User: Larissa  
Wed Jul 07 21:46:00 2021

Fonte: A autora

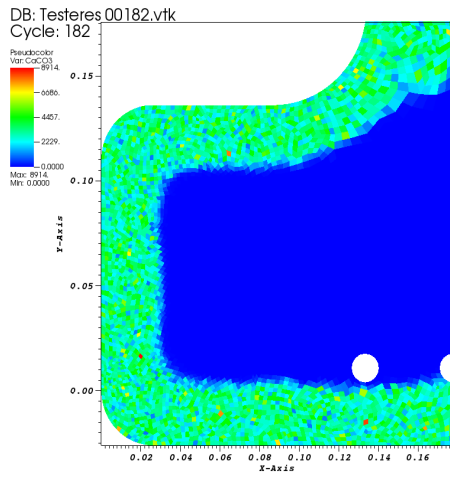
A título de comparação, embora alguns parâmetros sejam diferentes, no trabalho de Saetta e Vitaliani (2005), o experimento realizado com espécimes coletadas da viga colapsada mostrou que após 17 anos de serviço (tempo que a viga levou para falhar) a profundidade de carbonatação média era igual a 22.5 mm.

Levando em consideração a impraticabilidade de simular esse período de tempo para esta malha, optou-se por simular a carbonatação acelerada no período de 1 ano (365 dias) com passo de tempo de 48 horas, para ter uma profundidade de carbonatação mais expressiva nos resultados, considerando como premissa que essa viga estaria em um túnel fechado submetida a constante ação de  $\text{CO}_2$  dos automóveis que passam pelo túnel. Para esta situação acelerada foi adotada uma pressão parcial de carbono no contorno igual a  $5 \times 10^4$  Pa, assim como no primeiro exemplo.

Essa versão do problema foi utilizada para mostrar a aplicação do Anderson *Acceleration* com profundidade de aceleração  $m = 11$ . As figuras 23 e 24 mostram os resultados após 365 dias da implementação original e com Anderson, respectivamente. É possível notar que, como esperado, a carbonatação avança mais para o interior da estrutura, pois o aumento na concentração de  $\text{CO}_2$  causa o aumento da difusão do gás e consequentemente aprofunda a reação.

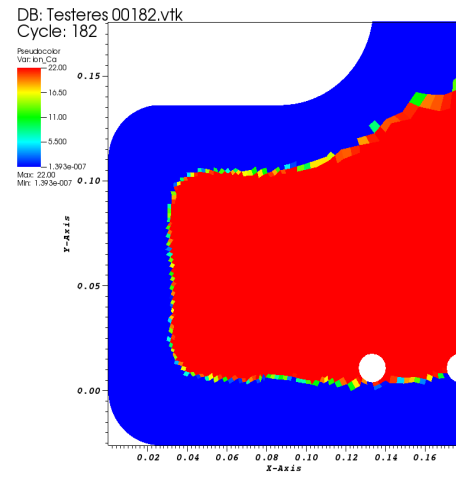
**Figura 23** – Resultados da implementação original

(a) Produção de  $\text{CaCO}_3$



user: Larissa  
Mon Jul 26 16:19:26 2021

(b) Distribuição de Cálcio

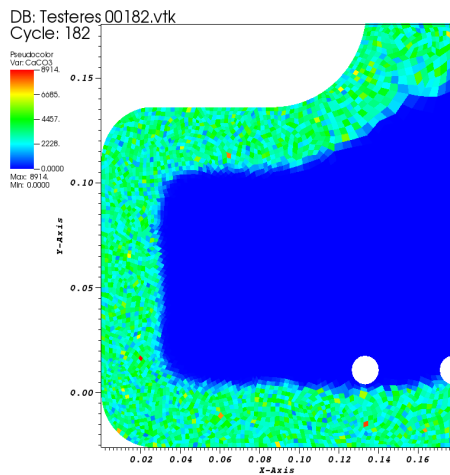


user: Larissa  
Mon Jul 26 16:19:56 2021

Fonte: A autora

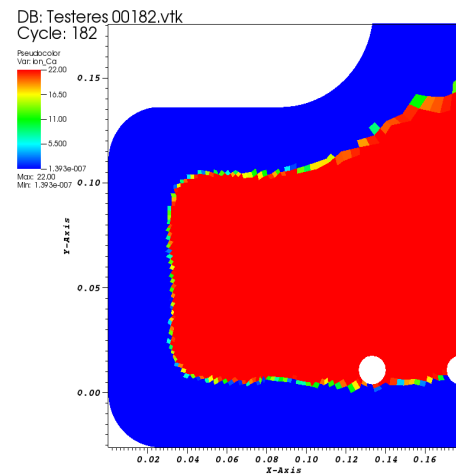
**Figura 24** – Resultados da implementação Anderson Acceleration  $m=11$

(a) Produção de  $\text{CaCO}_3$



user: Larissa  
Mon Jul 26 16:21:57 2021

(b) Distribuição de Cálcio



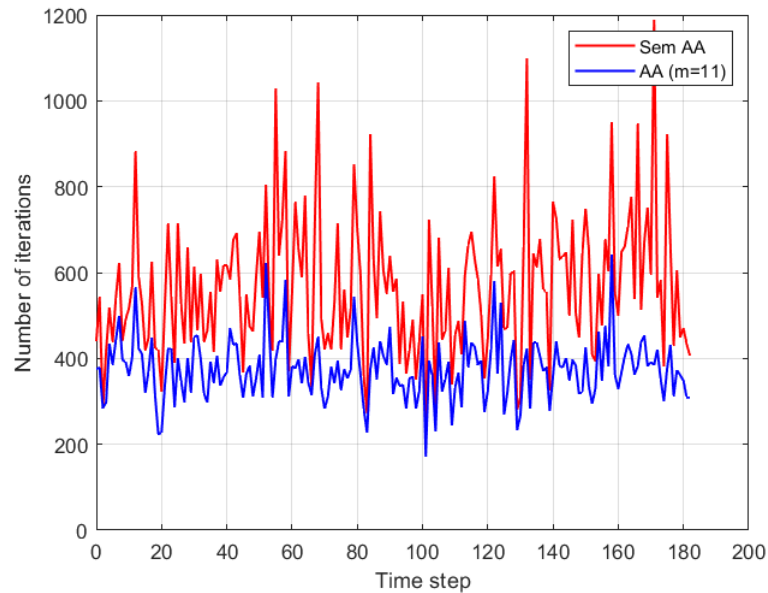
user: Larissa  
Mon Jul 26 16:22:07 2021

Fonte: A autora

Finalmente, a comparação entre o número de iterações do sistema por passo de tempo das duas implementações é mostrado na figura 25. Vemos que há uma diminuição do número de iterações da versão usando a aceleração, com uma diferença máxima no passo de tempo 171 de 805 iterações. É interessante notar que nesse exemplo houveram alguns passos de tempo que o Anderson *Acceleration* produziu mais iterações do que a

versão original, como por exemplo o passo 2, que a versão com Anderson teve 2 iterações a mais. Entretanto, no geral, a técnica apresentou um ganho interessante.

**Figura 25** – Resultado número de iterações por passo de tempo

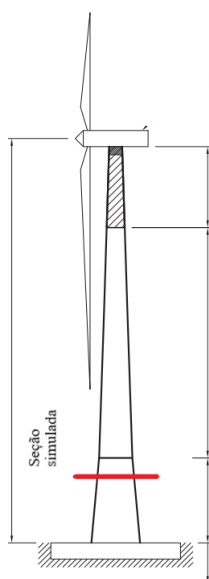


Fonte: A autora

#### 4.4 CARBONATAÇÃO 2D NA SEÇÃO DE UMA TORRE

O último exemplo simula a carbonatação numa seção anelar, transversal ao eixo, da torre de concreto de um aerogerador de eixo horizontal, como o que pode ser visto na figura 26.

**Figura 26** – Vista lateral da torre mostrando a seção simulada

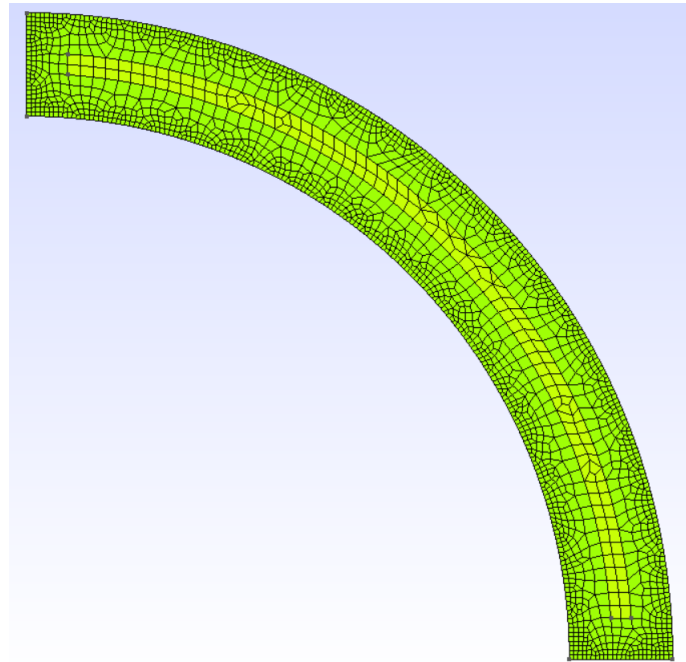


Fonte: Adaptado de Tricklebank *et al.* (2007)

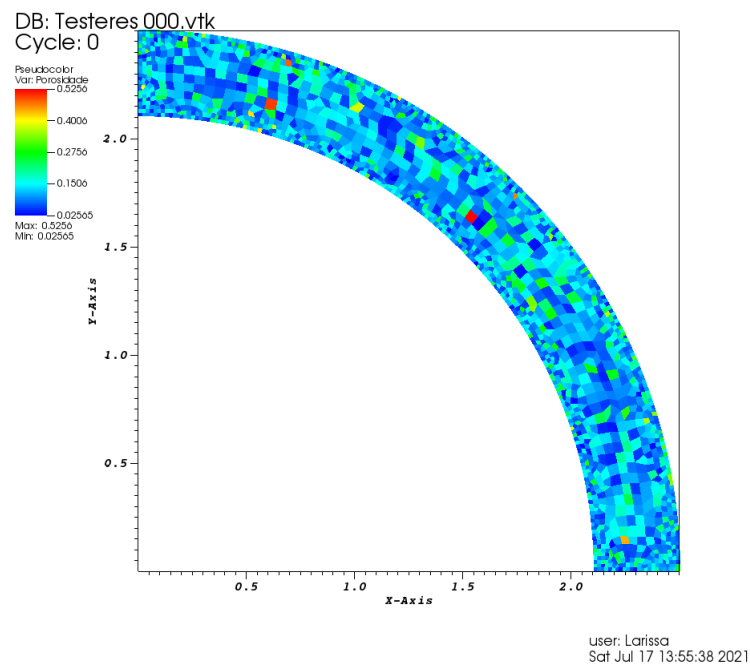
Esta região é considerada como tendo um raio externo de 2.5 metros (JIN; LI, 2019) e espessura igual a 400 milímetros (TRICKLEBANK *et al.*, 2007), para simplicidade, optou-se por simular apenas 1/4 da seção considerando as características simétricas da geometria.

O contorno externo da torre está exposto ao ambiente, e para considerar a ação do vento, o qual sabe-se que pode acelerar a carbonatação (LI *et al.*, 2011), foi usada uma concentração de  $CO_2$  de 5% para simular esse efeito; usando a lei de Dalton, isso resulta em uma pressão parcial de 5066 Pa. Essa consideração é meramente para fins demonstrativos no exemplo, visto que a concentração de  $CO_2$  influencia na difusão, mas a diferença de pressão causada pelo vento gera uma transferência de massa do gás para dentro da estrutura causada por convecção, também chamada de transferência de massa por penetração (ZOU *et al.*, 2015), no entanto, o modelo atual despreza esse efeito.

O contorno interno da torre, diferentemente do externo, não está sobre ação do vento, mas está exposto ao ar atmosférico, então as pressão parcial de  $CO_2$  da carbonatação natural, 50 Pa, foi admitida. Em ambos os contornos, assumiu-se umidade relativa igual a 65%, os demais contornos estão isolados. A malha utilizada nesse exemplo é mostrada na figura 27 e conta com 1842 elementos, a distribuição lognormal de porosidade inicial é mostrada na figura 28.

**Figura 27** – Malha do quarto exemplo

Fonte: A autora

**Figura 28** – Distribuição de porosidade inicial

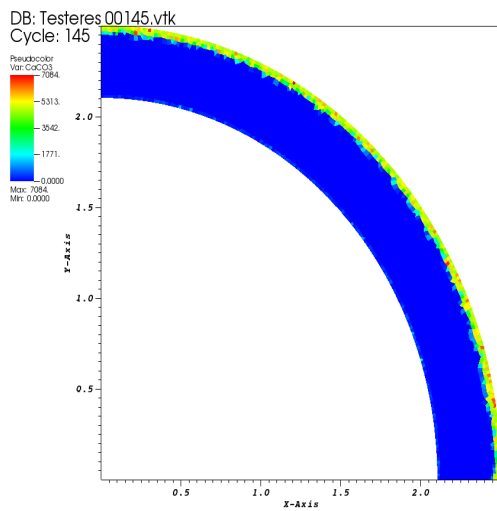
Fonte: A autora

Neste exemplo, a carbonatação foi simulada durante 4380 dias (aproximadamente 12 anos), com passo de tempo igual a 30 dias e tolerância igual a  $10^{-4}$ .

Os resultados para produção de  $CaCO_3$  e distribuição de cálcio após 4380 dias são mostrados nas figuras 29 e 30 para as versões sem e com Anderson *Acceleration* com  $m = 4$ , respectivamente.

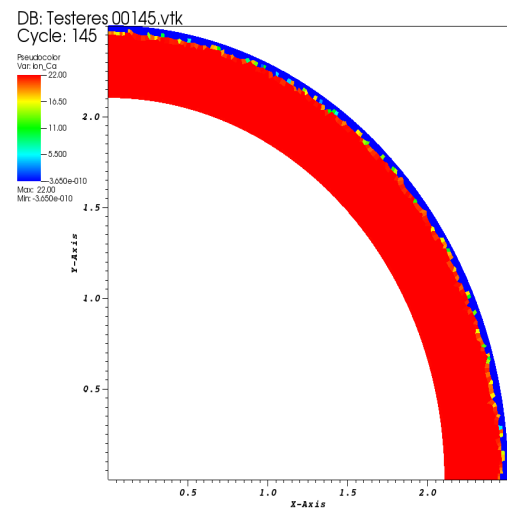
**Figura 29** – Resultados da implementação original

(a) Produção de  $CaCO_3$



user: Larissa  
Sat Jul 17 03:14:13 2021

(b) Distribuição de Cálcio

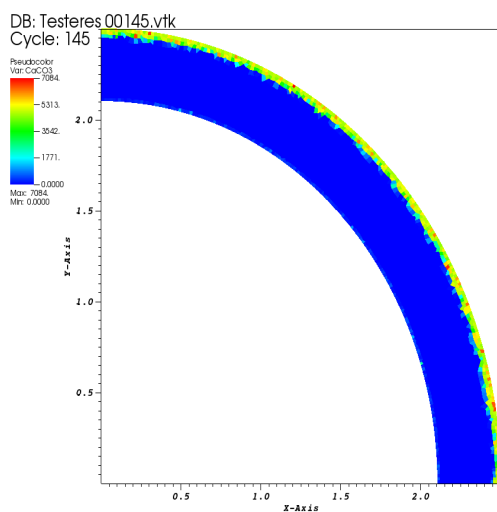


user: Larissa  
Sat Jul 17 03:14:03 2021

Fonte: A autora

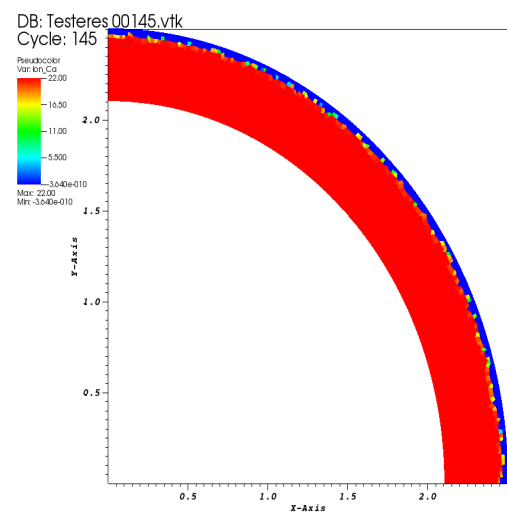
**Figura 30** – Resultados da implementação Anderson Acceleration  $m=4$

(a) Produção de  $CaCO_3$



user: Larissa  
Sat Jul 17 13:54:49 2021

(b) Distribuição de Cálcio



user: Larissa  
Sat Jul 17 13:55:19 2021

Fonte: A autora



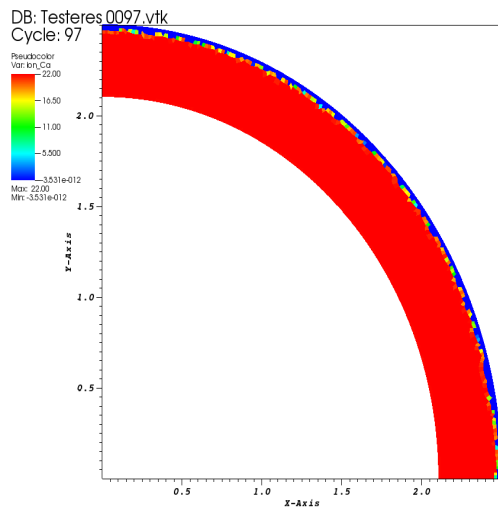
As figuras 29 e 30 mostram que os resultados mantêm concordância para os dois casos. A produção de  $CaCO_3$  é maior na extremidade na qual foi aplicada maior concentração de dióxido de carbono, como esperado, enquanto que a extremidade que estava sujeita a carbonatação natural apresenta uma produção de carbonato de cálcio quase imperceptível quando comparada com a face externa.

Percebe-se também, nas figuras de distribuição de íon cálcio, valores mínimos negativos em ambos os casos, o que não faz sentido físico visto que não existe concentração negativa de espécies. No entanto, por ser um valor muito pequeno (da ordem de  $10^{-10}$ ), acabou não afetando os resultados dos outros campos. Essa instabilidade surgiu no passo de tempo 97, como pode ser visto na figura 31, que representa cerca de 8 anos de carbonatação.

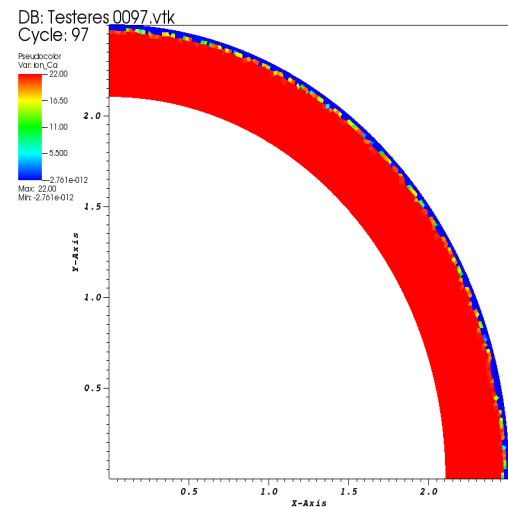
**Figura 31** – Instante inicial da instabilidade do íon cálcio

(a) Original

(b) Anderson Acceleration



user: Larissa  
Sat Jul 17 15:12:14 2021



user: Larissa  
Sat Jul 17 15:18:19 2021

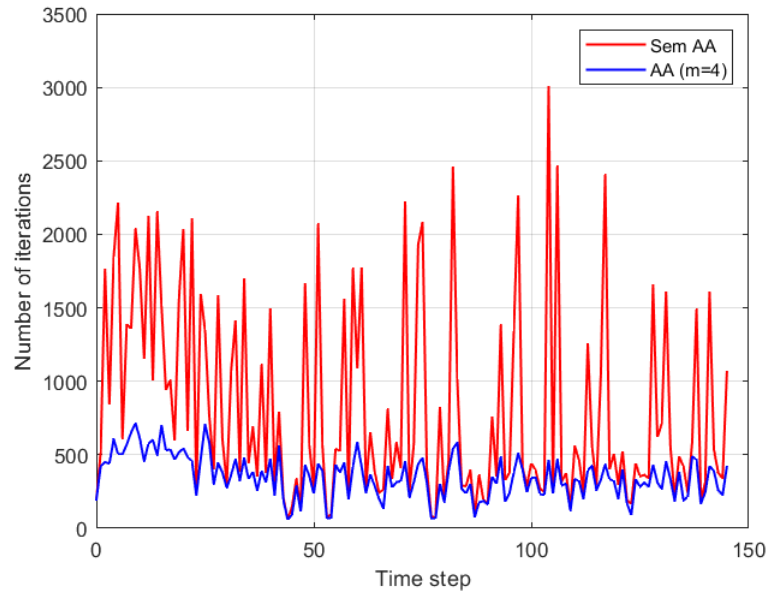
Fonte: A autora

É interessante notar que esse comportamento não aparece em nenhum dos exemplos anteriores, o que pode mostrar uma limitação da presente implementação em simular períodos de tempo mais longos, provavelmente porque esta implementação utiliza uma aproximação de alta ordem para o termo advectivo da equação de íon cálcio.

Aproximações de alta ordem nos termos advectivos, como é o caso das diferenças centrais, geram soluções que apresentam oscilações numéricas em regiões de grandes gradientes, no entanto isso não significa que as soluções oscilatórias não estão convergidas, pois a impossibilidade de dissipar as oscilações é uma característica das aproximações de alta ordem, o uso de uma aproximação *upwind* de primeira ordem resolveria esse problema (MALISKA, 2004).

Logo, ainda é válido mostrar os resultados da comparação do número de iterações do sistema por passo de tempo entre as versões com *Anderson Acceleration* com  $m = 4$  e sem Anderson, que é vista no gráfico 32.

**Figura 32** – Resultado número de iterações por passo de tempo



Fonte: A autora

Vê-se que o número de iterações é reduzido bastante ao aplicar o acelerador. A máxima diferença aconteceu no passo de tempo 104 e foi igual a 2542 iterações, mostrando um grande potencial de redução, assim como apontado em outros trabalhos da literatura.

## 5 CONCLUSÕES

### 5.1 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi desenvolvida a modelagem matemática em duas dimensões do fenômeno de carbonatação do concreto, baseado nas equações de conservação de massa da água, do dióxido de carbono e do íon cálcio e na equação de variação da porosidade. Sua formulação numérica foi desenvolvida baseada no Método dos Volumes finitos com uma abordagem *cell-centered*.

A performance da técnica de aceleração Anderson *Acceleration* foi demonstrada em quatro exemplos numéricos. O primeiro consistia de um *benchmark* 1D introduzido em um trabalho de referência na área, que é Zhang (2016), os outros três eram domínios 2D adaptados de Saetta, Schrefler e Vitaliani (1995), Saetta e Vitaliani (2005) e uma seção transversal de uma torre de aerogerador.

Em um primeiro momento, verificou-se que a implementação computacional utilizada no trabalho era capaz de produzir soluções em concordância com aquelas mostradas na literatura. Na avaliação da aceleração do processo iterativo, foi verificado que, curiosamente, Anderson *Acceleration* não foi efetivo quando aplicado ao problema 1D, por outro lado, os problemas 2D foram beneficiados pelo uso da técnica.

No problema da seção 4.2 foi observado que houve uma diminuição no número de iterações por passo de tempo, com relação à simulação sem empregar o acelerador, para todos os valores de profundidade de aceleração testados, os quais produziram o mesmo número de iterações quando comparados entre si. A diferença máxima entre o número de iterações das versões com e sem acelerador foi 79 iterações e a diferença mínima foi igual a zero em alguns passos de tempo onde não houve ganho, porém não houve nenhum passo de tempo em que o número de iterações com Anderson foi maior do que sem Anderson. Além disso, ainda foram testados três valores diferentes para o parâmetro de amortecimento que ainda possibilitou um pequeno ganho em alguns passos de tempo.

Adicionalmente, no problema da seção 4.3 mostrou-se a diferença na penetração da carbonatação na estrutura quando se roda o experimento nas situações natural e acelerada, e para a condição acelerada foram mostrados os resultados com e sem Anderson *Acceleration*, onde notou-se que houve ganho com a utilização da técnica de uma maneira geral, embora em alguns *timesteps* a versão com Anderson apresentou mais iterações.

No exemplo 4.4 um domínio que simulava a seção de uma torre de aerogerador apresentou resultados promissores com relação ao uso da técnica de aceleração, com diferença máxima de 2542 iterações de redução, apesar de uma pequena inconsistência

física nos resultados da distribuição do íon cálcio a partir de aproximadamente 8 anos de carbonatação, o que pode estar relacionado ao tempo total de simulação escolhido e a aproximação de alta ordem para o termo advectivo na equação do íon cálcio.

No geral, percebeu-se que o refinamento da malha tinha influência na performance do Anderson, pois foi visto que malhas mais refinadas apresentavam maiores diferenças entre as duas versões, mostrando assim que a aceleração depende muito do problema como um todo.

Por fim, vale ressaltar que os resultados estão dentro do esperado da física da carbonatação. Em concordância com vários outros trabalhos já citados na revisão bibliográfica, o presente trabalho demonstrou que *Anderson Acceleration* é um bom candidato a técnica de aceleração do método de Picard, diminuindo o número de iterações, preservando a física do problema e mantendo a concordância com os resultados gerados sem utilizar a técnica.

## 5.2 TRABALHOS FUTUROS

Uma interessante extensão do presente trabalho é empregar outras técnicas de aceleração no problema da carbonatação, como as já citadas *Minimal Polynomial Extrapolation*, *Reduced Rank Extrapolation* e o *Anderson Acceleration* Modificado proposto em Zhou, Sheng e Yuan (2020), ou empregar *Jacobian-free Newton-Krylov* como estratégia de solução iterativa do sistema, com atenção à preservação da positividade da solução e comparar com os resultados obtidos neste trabalho usando *Anderson Acceleration*.

Com relação à física do problema da carbonatação, é possível estudar mais a fundo o efeito da velocidade do vento na difusão do  $CO_2$  no concreto, e conseqüentemente, na carbonatação, podendo ser discretizado e implementado computacionalmente o modelo matemático proposto por Zou *et al.* (2015).

No geral, o campo de estudos de métodos numéricos para o problema da carbonatação é muito vasto e relativamente pouco explorado, e seria beneficiado por mais trabalhos nessa área considerando o esforço computacional e o tempo gastos na solução do problema para malhas mais refinadas.

## REFERÊNCIAS

- AL-AMEERI, A. S. *et al.* Impact of climate change on the carbonation in concrete due to carbon dioxide ingress: Experimental investigation and modelling. **Journal of Building Engineering**, v. 44, p. 102594, 2021. ISSN 2352-7102. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352710221004526>. Citado na página 21.
- AN, H.; JIA, X.; WALKER, H. F. Anderson acceleration and application to the three-temperature energy equations. **Journal of Computational Physics**, v. 347, p. 1–19, out. 2017. ISSN 00219991. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S002199911730476X>. Citado 3 vezes nas páginas 23, 26 e 27.
- ANDERSON, D. G. Iterative Procedures for Nonlinear Integral Equations. **Journal of the ACM (JACM)**, v. 12, n. 4, p. 547–560, out. 1965. ISSN 0004-5411, 1557-735X. Disponível em: <http://dl.acm.org/doi/10.1145/321296.321305>. Citado na página 24.
- ANDERSON, D. G. Comments on “anderson acceleration, mixing and extrapolation”. **Numerical Algorithms**, Springer, v. 80, n. 1, p. 135–234, 2019. Citado na página 46.
- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENERGIA EÓLICA. **Infovento 21**. [S.l.], 2021. 2 p. Citado na página 13.
- BANERJEE, A. S.; SURYANARAYANA, P.; PASK, J. E. Periodic pulay method for robust and efficient convergence acceleration of self-consistent field iterations. **Chemical Physics Letters**, Elsevier, v. 647, p. 31–35, 2016. Citado na página 23.
- BARY, B.; SELIER, A. Coupled moisture—carbon dioxide—calcium transfer model for carbonation of concrete. **Cement and Concrete Research**, v. 34, n. 10, p. 1859–1872, out. 2004. ISSN 00088846. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0008884604000602>. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20 e 28.
- BRAGA, B. *et al.* A numerical analysis of carbonation process in cement-based materials. In: CONFERENCE TO CELEBRATE THE CENTENNIAL OF LMC AND KAREN SCRIVENER’S 60TH BIRTHDAY, 2018, Lausanne. **Resumos...** Lausanne: Conference to celebrate the centennial of LMC and Karen Scrivener’s 60th birthday, 2018. Citado 3 vezes nas páginas 21, 35 e 44.
- de Lana, J. A. *et al.* Behavior study of prestressed concrete wind-turbine tower in circular cross-section. **Engineering Structures**, v. 227, p. 111403, 2021. ISSN 0141-0296. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0141029620340049>. Citado na página 13.
- ENEVOLDSEN, P.; XYDIS, G. Examining the trends of 35 years growth of key wind turbine components. **Energy for sustainable development**, Elsevier, v. 50, p. 18–26, 2019. Citado na página 13.
- EVANS, C. *et al.* A proof that anderson acceleration improves the convergence rate in linearly converging fixed-point methods (but not in those converging quadratically). **SIAM Journal on Numerical Analysis**, SIAM, v. 58, n. 1, p. 788–810, 2020. Citado na página 26.

- JAIN, P. **Wind energy engineering**. New York: McGraw-Hill, 2011. OCLC: 693771826. ISBN 978-0-07-171478-5 978-0-07-176425-4. Disponível em: <http://accessengineeringlibrary.com/browse/wind-energy-engineering>. Citado na página 13.
- JIN, Q.; LI, V. C. Structural and durability assessment of ECC/concrete dual-layer system for tall wind turbine towers. **Engineering Structures**, v. 196, p. 109338, out. 2019. ISSN 01410296. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S014102961931185X>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 53.
- KELLEY, C. T. Numerical methods for nonlinear equations. **Acta Numerica**, Cambridge University Press, v. 27, p. 207–287, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 22 e 23.
- KNOLL, D. A.; KEYES, D. E. Jacobian-free newton–krylov methods: a survey of approaches and applications. **Journal of Computational Physics**, Elsevier, v. 193, n. 2, p. 357–397, 2004. Citado na página 23.
- LI, D.; LI, L.-y.; WANG, X. Mathematical modelling of concrete carbonation with moving boundary. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, Elsevier, v. 117, p. 104809, 2020. Citado na página 21.
- LI, G. *et al.* Influences of environment climate conditions on concrete carbonation rate. In: TRANS TECH PUBL. **Advanced Materials Research**. [S.l.], 2011. v. 194, p. 904–908. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 53.
- LIPNIKOV, K.; SVYATSKIY, D.; VASSILEVSKI, Y. Anderson Acceleration for Nonlinear Finite Volume Scheme for Advection-Diffusion Problems. **SIAM Journal on Scientific Computing**, v. 35, n. 2, p. A1120–A1136, jan. 2013. ISSN 1064-8275, 1095-7197. Disponível em: <http://epubs.siam.org/doi/10.1137/120867846>. Citado 3 vezes nas páginas 22, 23 e 26.
- LÖHNER, R. **Applied Computational Fluid Dynamics Techniques An Introduction Based on Finite Element Methods**. New York, NY: John Wiley & Sons, 2008. OCLC: 899164634. ISBN 978-0-470-98966-1. Disponível em: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:101:1-201412082079>. Citado 2 vezes nas páginas 21 e 22.
- MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. Rio de Janeiro: Livros Tecnicos e Cientificos, 2004. OCLC: 58559386. ISBN 978-85-216-1396-1. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22 e 56.
- MEHTA, P. K.; MONTEIRO, P. J. M. **Concrete**. Blacklick, USA: McGraw-Hill Professional Publishing, 2005. OCLC: 958501643. ISBN 978-0-07-158919-2. Disponível em: <http://public.ebookcentral.proquest.com/choice/publicfullrecord.aspx?p=4656483>. Citado na página 17.
- MOUKALLED, F.; MANGANI, L.; DARWISH, M. **The finite volume method in computational fluid dynamics: an advanced introduction with OpenFOAM and Matlab**. Cham Heidelberg New York Dordrecht London: Springer, 2016. (Fluid mechanics and its applications, volume 113). OCLC: 921234552. ISBN 978-3-319-16874-6 978-3-319-16873-9. Citado 4 vezes nas páginas 22, 28, 32 e 33.

PAPADAKIS, V. G.; VAYENAS, C. G.; FARDIS, M. N. A reaction engineering approach to the problem of concrete carbonation. **AIChE Journal**, v. 35, n. 10, p. 1639–1650, out. 1989. ISSN 0001-1541, 1547-5905. Disponível em: <http://doi.wiley.com/10.1002/aic.690351008>. Citado 3 vezes nas páginas 14, 18 e 19.

PAPADAKIS, V. G.; VAYENAS, C. G.; FARDIS, M. N. Experimental investigation and mathematical modeling of the concrete carbonation problem. **Chemical Engineering Science**, v. 46, n. 5-6, p. 1333–1338, 1991. ISSN 00092509. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/000925099185060B>. Citado na página 19.

PAPADAKIS, V. G.; VAYENAS, C. G.; FARDIS, M. N. Physical and Chemical Characteristics Affecting the Durability of Concrete. **Materials Journal**, v. 88, n. 2, p. 186–196, mar. 1991. ISSN 0889-325X. Disponível em: <https://www.concrete.org/publications/internationalconcreteabstractsportal/m/details/id/1993>. Citado na página 17.

PARK, D. Carbonation of concrete in relation to co2 permeability and degradation of coatings. **Construction and Building Materials**, Elsevier, v. 22, n. 11, p. 2260–2268, 2008. Citado na página 20.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. Hemisphere Publishing Corporation (CRC Press, Taylor & Francis Group), 1980. (Series on Computational Methods in Mechanics and Thermal Science). ISBN 978-0891165224. Disponível em: <http://www.crcpress.com/product/isbn/9780891165224>. Citado na página 32.

PINTO, M. d. O. **Fundamentos de energia eólica**. Rio de Janeiro: Grupo Gen - LTC, 2013. OCLC: 857059243. ISBN 978-85-216-2160-7 978-85-216-2161-4. Disponível em: <http://site.ebrary.com/id/10707210>. Citado na página 13.

POLLOCK, S.; REBHOLZ, L. G.; XIAO, M. Anderson-Accelerated Convergence of Picard Iterations for Incompressible Navier–Stokes Equations. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 57, n. 2, p. 615–637, jan. 2019. ISSN 0036-1429, 1095-7170. Disponível em: <https://epubs.siam.org/doi/10.1137/18M1206151>. Citado na página 27.

POSSAN, E. *et al.* Co2 uptake potential due to concrete carbonation: A case study. **Case Studies in Construction Materials**, v. 6, p. 147–161, 2017. ISSN 2214-5095. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2214509516300493>. Citado na página 18.

POTRA, F. A.; ENGLER, H. A characterization of the behavior of the Anderson acceleration on linear problems. **Linear Algebra and its Applications**, v. 438, n. 3, p. 1002–1011, fev. 2013. ISSN 00243795. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0024379512006738>. Citado na página 26.

RICHARDSON, M. G. **Fundamentals of durable reinforced concrete**. London ; New York: Spon Press, 2002. (Modern concrete technology, 12). OCLC: ocm48375929. ISBN 978-0-419-23780-8. Citado na página 17.

SAETTA, A. V.; SCHREFLER, B. A.; VITALIANI, R. V. 2 — D model for carbonation and moisture/heat flow in porous materials. **Cement and Concrete Research**, v. 25, n. 8, p. 1703–1712, dez. 1995. ISSN 00088846. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0008884695001662>. Citado 4 vezes nas páginas 19, 43, 44 e 58.

SAETTA, A. V.; VITALIANI, R. V. Experimental investigation and numerical modeling of carbonation process in reinforced concrete structures: Part i: Theoretical formulation. **Cement and concrete research**, Elsevier, v. 34, n. 4, p. 571–579, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 19.

SAETTA, A. V.; VITALIANI, R. V. Experimental investigation and numerical modeling of carbonation process in reinforced concrete structures: Part ii. practical applications. **Cement and Concrete Research**, Elsevier, v. 35, n. 5, p. 958–967, 2005. Citado 4 vezes nas páginas 19, 48, 50 e 58.

SIDI, A. Review of two vector extrapolation methods of polynomial type with applications to large-scale problems. **Journal of Computational Science**, Elsevier, v. 3, n. 3, p. 92–101, 2012. Citado na página 23.

STEFFENS, A.; DINKLER, D.; AHRENS, H. Modeling carbonation for corrosion risk prediction of concrete structures. **Cement and Concrete Research**, v. 32, n. 6, p. 935–941, jun. 2002. ISSN 00088846. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0008884602007287>. Citado na página 19.

SU, S.; DONG, Q.; WU, J. A vertex-centered and positivity-preserving scheme for anisotropic diffusion equations on general polyhedral meshes. **Mathematical Methods in the Applied Sciences**, v. 42, n. 1, p. 59–84, jan. 2019. ISSN 0170-4214, 1099-1476. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/mma.5324>. Citado na página 27.

TALUKDAR, S.; BANTHIA, N.; GRACE, J. Carbonation in concrete infrastructure in the context of global climate change—part 1: Experimental results and model development. **Cement and Concrete Composites**, Elsevier, v. 34, n. 8, p. 924–930, 2012. Citado na página 20.

TORRES, H. *et al.* Simplified mathematical model for concrete carbonation. **Journal of Materials in Civil Engineering**, American Society of Civil Engineers, v. 29, n. 10, p. 04017150, 2017. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 20.

TOTH, A.; KELLEY, C. Convergence analysis for anderson acceleration. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, SIAM, v. 53, n. 2, p. 805–819, 2015. Citado na página 26.

TRICKLEBANK, A. *et al.* **Concrete towers for onshore and offshore wind farms: conceptual design studies**. Camberley, Surrey: Concrete Centre, 2007. OCLC: 5858938667. ISBN 978-1-904818-48-9. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 53.

VELDHUIZEN, S. van; VUIK, C.; KLEIJN, C. On projected newton–krylov solvers for instationary laminar reacting gas flows. **Journal of Computational Physics**, v. 229, n. 5, p. 1724 – 1738, 2010. ISSN 0021-9991. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999109006159>. Citado na página 23.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. Harlow, Essex, England : Longman Scientific & Technical: New York : Wiley, 1995. ISBN 978-0-470-23515-7. Citado 3 vezes nas páginas 21, 22 e 32.



VISSER, J. Influence of the carbon dioxide concentration on the resistance to carbonation of concrete. **Construction and Building Materials**, Elsevier, v. 67, p. 8–13, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 20.

WALKER, H. F. Anderson acceleration: Algorithms and implementations. **WPI Math. Sciences Dept. Report MS-6-15-50**, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.

WALKER, H. F.; NI, P. Anderson Acceleration for Fixed-Point Iterations. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 49, n. 4, p. 1715–1735, jan. 2011. ISSN 0036-1429, 1095-7170. Disponível em: <http://epubs.siam.org/doi/10.1137/10078356X>. Citado 4 vezes nas páginas 15, 23, 24 e 26.

WILLERT, J.; TAITANO, W. T.; KNOLL, D. Leveraging Anderson Acceleration for improved convergence of iterative solutions to transport systems. **Journal of Computational Physics**, v. 273, p. 278–286, set. 2014. ISSN 00219991. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0021999114003611>. Citado na página 27.

WILLIS, D. *et al.* Wind energy research: State-of-the-art and future research directions. **Renewable Energy**, Elsevier, v. 125, p. 133–154, 2018. Citado na página 13.

ZHANG, Q. Mathematical modeling and numerical study of carbonation in porous concrete materials. **Applied Mathematics and Computation**, v. 281, p. 16–27, abr. 2016. ISSN 00963003. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0096300316300340>. Citado 11 vezes nas páginas 14, 15, 17, 18, 20, 28, 30, 35, 37, 42 e 58.

ZHOU, H.; SHENG, Z.; YUAN, G. A finite volume method preserving maximum principle for steady heat conduction equations with modified anderson acceleration. **Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals**, Taylor & Francis, v. 78, n. 6, p. 412–438, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/10407790.2020.1787054>. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 59.

ZOU, D. *et al.* Influence of Wind Pressure on the Carbonation of Concrete. **Materials**, v. 8, n. 8, p. 4652–4667, jul. 2015. ISSN 1996-1944. Disponível em: <http://www.mdpi.com/1996-1944/8/8/4652>. Citado 3 vezes nas páginas 20, 53 e 59.